



HAL
open science

Étude de la formation d'une structure de mousse par simulation directe de l'expansion de bulles dans une matrice liquide polymère

Julien Bruchon

► **To cite this version:**

Julien Bruchon. Étude de la formation d'une structure de mousse par simulation directe de l'expansion de bulles dans une matrice liquide polymère. Sciences de l'ingénieur [physics]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2004. Français. NNT : 2004ENMP1179 . pastel-00001335

HAL Id: pastel-00001335

<https://pastel.hal.science/pastel-00001335>

Submitted on 26 Jul 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée à

L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES DE
PARIS

par

Julien Bruchon

pour l'obtention du titre de

DOCTEUR

en

MÉCANIQUE NUMÉRIQUE

**Etude de la formation d'une structure de mousse
par simulation directe de l'expansion de bulles
dans une matrice liquide polymère**

Soutenance le 28 janvier 2004
devant un jury composé de :

| | |
|---------------------------|--------------------|
| M. Jean-François Agassant | Président |
| M. Arnaud Poitou | Rapporteur |
| M. Jean-Paul Caltagirone | Rapporteur |
| M. François Graner | Examineur |
| M. Rudy Koopmans | Examineur |
| M. Thierry Coupez | Directeur de Thèse |

Remerciements

Je remercie l'ensemble de la direction de l'Ecole des Mines de Paris pour m'avoir accueilli et permis d'effectuer ce travail de recherche au sein du Centre de Mise en Forme des Matériaux de Sophia-Antipolis.

Cette thèse est le résultat de plus de quatre années de travail effectué sous la direction de Thierry Coupez. Je tiens à le remercier pour sa compétence, sa rigueur, ainsi que pour le caractère novateur de ses idées. A son contact, j'ai bien sûr progressé tant dans les domaines numériques que physiques, mais j'ai surtout acquis une certaine vision de la recherche, et de la manière d'aborder les problèmes scientifiques.

Je remercie toutes les personnes que j'ai été amené à rencontrer au cours des différentes réunions du projet européen BIOFOAM, et avec qui j'ai pris plaisir à collaborer. Je tiens particulièrement à saluer les personnes de l'entreprise DOW qui ont été des partenaires précieux.

Je remercie les membres de mon jury : messieurs Arnaud Poitou et Jean-Paul Caltagirone pour avoir accepté la charge de rapporteur ; monsieur Jean-François Agassant pour avoir accepté de présider ce jury ; messieurs Rudy Koopmans et François Graner pour avoir accepté d'en faire parti.

Je salue les collègues et amis que j'ai côtoyé au CEMEF et en dehors, et qui, par leur bonne humeur et leur gentillesse ont permis à ces quatre années d'être agréables.

Je remercie Tho et Hyejin pour le renouvellement et le brin de folie qu'ils ont apporté au bureau, qui, il est vrai, n'en manquait déjà pas !

Je m'incline devant mes potes Karim, Serge, Romain, et bien sûr Mihaela, qui ont toujours été présents durant ces quatre années, et qui ont réussi l'exploit, dont je n'aurai sans doute pas été capable, de me supporter. Avec eux, mon passage sur la côte d'Azur restera un excellent souvenir.

Je veux également saluer Jacques, mon "papa gym" sans qui, rien n'aurait peut-être jamais commencé. Je remercie également Alain et Giselle, pour les mêmes raisons, ainsi que Philippe et Marie-Do.

Enfin, et surtout, toutes mes pensées vont à mes parents, qui m'ont toujours soutenu et encouragé ; à Anne-Lise et Alexandre pour leurs séjours sur la Côte et les petits plats dont ils m'ont régalié (les Lasagnes aux légumes, c'est excellent !); plus généralement à toute ma famille, avec une émotion particulière pour mon grand-père, que j'aurai aimé voir un peu plus longtemps.

Enfin, dites-moi avec vos lumières et votre expérience, où est la vérité, la totale vérité ? Quelle est la morale à tirer de cette histoire parfois canaille et triviale ? La vérité est-elle dans ce qui arrive tous les jours, dans les événements quotidiens, dans la mesquinerie et la monotonie de la vie de l'immense majorité des hommes ou réside-t-elle dans le rêve qu'il nous est donné de rêver pour fuir notre triste condition ? Comment s'est élevé l'homme dans sa marche à travers le monde : par la répétition, jour après jour, des petites choses et des soucis ou par le rêve libre, sans frontières ni limites ? [...] Où est la vérité, répondez-moi, s'il vous plaît : dans la petite réalité de chacun ou dans l'immense rêve humain ? Qui la porte à travers le monde, illuminant le chemin de l'homme ? Le Méritissime juge ou le pauvrissime poète ?

Jorge Amado (Le vieux marin, 1961)

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Sur la structure cellulaire des mousses | 5 |
| 1.1 | Introduction | 5 |
| 1.2 | Les mousses polymère | 6 |
| 1.2.1 | Classification des mousses polymère | 7 |
| 1.2.2 | Formation d'une structure de mousse | 8 |
| 1.2.2.1 | Phase de germination | 8 |
| 1.2.2.2 | Phase d'expansion | 9 |
| 1.2.3 | Procédés de fabrication des mousses polymère | 11 |
| 1.2.3.1 | Extrusion des mousses polymère | 11 |
| 1.2.3.2 | Injection des mousses polymère | 13 |
| 1.2.4 | Rhéologie d'une mousse polymère | 14 |
| 1.2.4.1 | Contrainte seuil | 15 |
| 1.2.4.2 | Régime d'écoulement | 16 |
| 1.2.5 | Modélisation et simulation de l'expansion d'une mousse polymère | 17 |
| 1.2.5.1 | Modèle cellulaire | 18 |
| 1.2.5.2 | Couplage micro/macro | 20 |
| 1.3 | Les mousses de savon | 23 |
| 1.3.1 | Lois d'équilibre local | 23 |
| 1.3.1.1 | Loi de Laplace-Young | 23 |
| 1.3.1.2 | Lois de Plateau | 27 |
| 1.3.2 | Comportement d'une mousse | 28 |
| 1.3.2.1 | Régime élastique | 28 |
| 1.3.2.2 | Régime plastique - régime d'écoulement | 30 |
| 1.3.3 | Simulation numérique d'une mousse de savon | 30 |
| 1.3.3.1 | Simulation de microstructure par minimisation locale de l'énergie | 30 |
| 1.3.3.2 | Application | 32 |
| 1.4 | Conclusion | 33 |
| 2 | Expansion d'une bulle de gaz dans une matrice polymère | 35 |
| 2.1 | Introduction | 35 |
| 2.2 | Construction du modèle physique | 36 |
| 2.2.1 | Conservation de la masse | 37 |
| 2.2.2 | Conservation de la quantité de mouvement | 37 |
| 2.2.2.1 | Conditions aux bords | 38 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.2.2.2 | Lois de comportement du polymère | 40 |
| 2.2.3 | Les équations mécaniques dans le liquide - Résumé | 41 |
| 2.3 | Discrétisation du système en vitesse - pression | 42 |
| 2.3.1 | Formulation variationnelle mixte en vitesse - pression du problème mécanique | 43 |
| 2.3.1.1 | Prolongement des champs vitesse et pression dans le gaz | 43 |
| 2.3.1.2 | Formulation variationnelle du problème mécanique | 44 |
| 2.3.1.3 | Introduction des fonctions caractéristiques | 48 |
| 2.3.2 | Discrétisation de la forme faible du problème mécanique | 48 |
| 2.4 | Suivi de l'évolution des domaines : résolution de l'équation de transport | 53 |
| 2.4.1 | Introduction | 53 |
| 2.4.2 | Une technique espace-temps Galerkin discontinu | 55 |
| 2.4.3 | Estimateur d'erreur a posteriori sur les fonctions caractéristiques | 60 |
| 2.4.4 | Amélioration de la description des interfaces : une technique de r-adaptation de maillage | 62 |
| 2.4.5 | Etude de la méthode espace-temps Galerkin discontinu | 63 |
| 2.4.5.1 | Cas 1D | 63 |
| 2.4.5.2 | Transport pseudo-2D d'un cercle | 67 |
| 2.4.5.3 | Test de Zalesak | 69 |
| 2.4.5.4 | Etude 3D de l'expansion d'une sphère | 70 |
| 2.4.5.5 | Etude d'un cas de déformation | 73 |
| 2.5 | Implémentation des méthodes numériques dans le code REM3D | 74 |
| 2.6 | Expansion d'une bulle de gaz dans une matrice liquide | 75 |
| 2.6.1 | Modèle micro-mécanique de l'expansion d'une cellule | 76 |
| 2.6.1.1 | Pression du gaz constante | 77 |
| 2.6.1.2 | Loi des gaz parfaits | 78 |
| 2.6.2 | Simulation de l'expansion d'une cellule | 78 |
| 2.6.2.1 | Échelle spatiale - Échelle temporelle | 79 |
| 2.6.2.2 | Calcul du pas de temps | 79 |
| 2.6.2.3 | Résultats | 80 |
| 2.7 | Couplage thermo-mécanique | 83 |
| 2.7.1 | Construction du modèle physique | 83 |
| 2.7.1.1 | Comportement anisotherme d'une bulle de gaz | 84 |
| 2.7.2 | Résolution du problème thermique | 86 |
| 2.7.2.1 | Prolongement du problème thermique dans le gaz | 86 |
| 2.7.2.2 | Discrétisation du problème thermique | 87 |
| 2.7.3 | Expansion anisotherme d'une bulle dans une matrice polymère | 90 |
| 2.7.3.1 | Expansion adiabatique d'une bulle de gaz | 90 |
| 2.7.3.2 | Expansion anisotherme d'une bulle | 91 |
| 2.8 | Conclusion | 92 |
| 3 | De l'expansion d'un système de bulles à l'expansion d'une structure de mousse | 97 |
| 3.1 | Introduction | 97 |
| 3.2 | Expansion d'un système de bulles dans une matrice liquide | 97 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.2.1 | Approche pleinement multidomaine | 99 |
| 3.2.2 | Approche formellement multidomaine | 100 |
| 3.2.2.1 | Discrétisation | 102 |
| 3.2.2.2 | Algorithme de reconstruction des bulles | 103 |
| 3.2.3 | Application : simulation de l'expansion d'un système de bulles | 107 |
| 3.2.3.1 | Interaction de deux bulles | 107 |
| 3.2.3.2 | Interaction de trois à neuf bulles | 110 |
| 3.2.3.3 | Structure de Kelvin | 114 |
| 3.3 | Du volume représentatif de la structure d'une mousse au volume de calcul | 117 |
| 3.3.1 | Définition et existence d'un volume représentatif | 117 |
| 3.3.2 | Modélisation d'un volume représentatif | 119 |
| 3.3.2.1 | Condition aux bords du domaine de calcul | 120 |
| 3.4 | Simulation de l'expansion d'un échantillon de mousse | 121 |
| 3.4.1 | Expansion du domaine de calcul : prise en compte du changement d'échelle | 121 |
| 3.4.1.1 | Discrétisation : vitesse de maillage | 124 |
| 3.4.1.2 | Validation : expansion d'une structure régulière | 125 |
| 3.4.1.3 | Conclusion | 128 |
| 3.4.2 | Expansion d'une structure 2D de mousse | 129 |
| 3.4.3 | Expansion d'une structure 3D de mousse | 130 |
| 3.4.4 | Expansion anisotherme d'une structure de mousse | 133 |
| 3.4.4.1 | Approche pleinement multidomaine | 135 |
| 3.4.4.2 | Approche formellement multidomaine | 136 |
| 3.4.4.3 | Simulation anisotherme de l'expansion d'une structure de mousse | 136 |
| 3.5 | Conclusion | 136 |
| 4 | De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique | 141 |
| 4.1 | Construction du modèle physique et numérique | 141 |
| 4.2 | Détermination de la viscosité d'un volume représentatif de mousse | 144 |
| 4.2.1 | Dépendance de la viscosité à la structure | 146 |
| 4.2.2 | Dépendance de la viscosité à la densité de bulles | 147 |
| 4.2.3 | Expression de la viscosité d'une mousse | 148 |
| 4.3 | Couplage micro-macro | 149 |
| 4.3.1 | Modèle analytique du taux d'expansion du gaz | 149 |
| 4.3.2 | Expression du taux d'expansion d'une mousse | 152 |
| 4.4 | Simulation macroscopique de l'expansion d'une mousse | 154 |
| 4.4.1 | Expansion fermée | 154 |
| 4.4.2 | Expansion libre | 159 |
| 4.5 | Couplage thermo-mécanique | 161 |
| 4.5.1 | Expansion libre anisotherme | 163 |
| 4.6 | Conclusion | 166 |
| A | Equation de transport d'un domaine | 173 |
| B | Dérivée du volume d'un domaine animé d'une vitesse | 175 |

Introduction

Peut-on imaginer un point commun entre le rasage du matin, la dégustation d'une flûte de champagne accompagnée d'un toast, la fabrication d'un pare-chocs automobile, l'isolation thermique d'un toit, ou encore la sieste de l'après-midi ? La mousse, bien sûr ! La mousse à raser, qui se forme par relâchement de la pression en sortant de la bombe. La mousse de champagne qui se forme toujours par relâchement de la pression, à l'ouverture de la bouteille, et qui est due au gaz carbonique dégagée par la fermentation. Les mousses alimentaires, comme le pain qui lève grâce à l'action conjointe de la levure (production de dioxyde de carbone) et de la chaleur (dilatation du dioxyde de carbone). Les mousses métalliques, comme la mousse d'aluminium, obtenue par réaction chimique dégageant de l'hydrogène dans de l'aluminium fondu, et qui, de par sa capacité à absorber un choc, constitue un excellent pare-chocs. Les bombes de mousse polyuréthane, qui, en se formant remplissent tous les interstices puis se solidifient, pouvant ainsi servir d'isolant thermique. Enfin, sur quoi sommes nous assis ? Sur quoi nous couchons nous ? Des mousses de rembourrage, à base de polymère. Arrêtons nous là, car nous pourrions continuer indéfiniment, tant les mousses sont présentes dans notre quotidien [30].

L'énumération ci-dessus nous montre la variété des formes prises par la mousse, la variété des procédés de fabrication (surpression, réactions chimiques), et la diversité des applications. En effet, hormis l'usage (non négligeable) alimentaire, la mousse sert à absorber les chocs, à rembourrer, à colmater, à isoler phoniquement et thermiquement, etc. Les bonnes propriétés de ce matériau de faible densité sont liées à sa structure interne. Lors de son expansion une mousse est constituée d'un ensemble de bulles de gaz évoluant dans un liquide. L'expansion terminée, la structure formée peut être figée par un refroidissement. C'est le cas des mousses polymère, sujet d'étude de ce document.

Schématiquement, la structure d'une mousse polymère peut se contrôler de deux façons : au travers des paramètres matériaux du polymère et du gaz ; au travers du procédé de fabrication. Ces deux moyens de contrôle relèvent de deux échelles physiques différentes. Ainsi, dans une mousse, l'expansion des bulles de gaz est gouvernée localement par les paramètres matériaux comme la masse volumique, la viscosité, la conductivité thermique. Ces paramètres dépendent des fluctuations locales de la pression, et des valeurs locales de la température. Ces deux grandeurs sont déterminées par le procédé de fabrication, et ne peuvent être calculées qu'en considérant la mousse et le procédé dans leur globalité.

Cette dualité entre échelle de la structure et échelle du procédé induit deux approches dans la modélisation et la simulation de l'expansion d'une mousse. Soit la modélisation se fait à l'échelle de la structure et décrit son évolution en fonction des paramètres matériaux, indépendamment de tout procédé. Soit la modélisation se fait à l'échelle du procédé, la structure ne pouvant plus être décrite directement. Parmi les modèles adoptant la première approche, les modèles dits cellulaires sont les plus répandus. Ils rendent compte de l'expansion d'une cellule élémentaire, *i.e.* d'une bulle de gaz sphérique dans un mélange liquide - gaz de dimension finie, et permettent d'établir une équation différentielle ordinaire vérifiée par le rayon de la bulle. Les auteurs travaillant avec ces modèles effectuent un couplage micro-macro via la masse volumique de la cellule afin d'obtenir une distribution de taille de cellule dans la mousse en fonction des fluctuations de pression et des gradients de température. Les méthodes numériques mises en jeu lors des simulations se limitent en général à des méthodes de type Runge-Kutta. Cette simplicité de mise en oeuvre explique la popularité de ces modèles : les simulations ne requièrent pas de culture numérique à proprement parler comme des codes éléments finis. Par contre cette simplicité est due à des hypothèses assez restrictives : une seule bulle sphérique est considérée. Ainsi, les modèles cellulaires ne peuvent pas décrire la formation et l'expansion d'une structure de mousse : la forme de la cellule demeure inchangée du début à la fin de l'expansion.

Les approches macroscopiques utilisent généralement des techniques numériques plus avancées telles que les éléments finis et des techniques de suivi de front de matière. Les simulations fournissent alors l'évolution de l'expansion (le front de matière) en fonction du procédé de fabrication (forme du moule, pression, température) et des paramètres matériaux, obtenus par une loi des mélanges. La structure peut être décrite au moyen de paramètres morphologiques, tels un rayon ou une forme de bulle, qui suivent des équations d'évolution. Des modèles micro-mécaniques peuvent être utilisés pour exprimer les paramètres matériaux en fonction de ces paramètres morphologiques. Ces modèles sont, pour la plupart, 2D et reposent sur des hypothèses restrictives : mousse structurée, fraction liquide nulle, etc. Ces hypothèses s'accordent mal avec la phase d'expansion, durant laquelle la fraction gazeuse passe de quelques pourcent à plus de 80% du volume total. Il en résulte, là aussi, que la structure est mal décrite par ce type d'approche.

Le travail présenté ici s'effectue dans le cadre du projet européen **BIOFOAM**. Ce projet étudie la possibilité de fabrication et d'utilisation de mousses dont la matrice polymère provient de bio-sources. Une des questions centrales de ce projet est donc : peut-on obtenir une structure de mousse viable avec le ou les bio-polymères sélectionnés pour leurs propriétés et leurs coûts de production. La réponse à cette question provient de l'expérience : différents essais d'expansion, combinant différents modes opératoires, sont effectués. Visuellement, il est alors possible de constater si la structure obtenue est homogène ou non, si elle est stable ou s'est effondrée par coalescence. La simulation numérique peut également aider à répondre à cette question, en évitant, du moins dans un premier temps, d'effectuer des expériences pouvant être délicates ou coûteuses. La confrontation de l'expérience et de la simulation peut de plus permettre de discriminer l'importance de tel ou tel phénomène ou paramètre.

Pour cette raison, nous nous proposons dans ce document d'élaborer une méthodologie numérique susceptible de simuler directement l'expansion d'un échantillon de mousse. Pour ce faire, nous considérons l'expansion d'un système de bulles de gaz dans un liquide, due à un relâchement de pression comme c'est le cas en injection ou en extrusion. Nous n'imposons aucune restriction quant à la forme des bulles et à la topologie de la structure. Nous considérons des mousses thermoplastiques, sans réaction chimique. Une telle approche nécessite de résoudre un système en vitesse - pression, faisant intervenir le couplage liquide - gaz, de suivre l'évolution du système de bulles, et de prendre en compte le changement d'échelle provoqué par l'expansion. Ce document est constitué de quatre chapitres. Le premier chapitre est une introduction bibliographique sur les mousses, polymère et savon, et sur les procédés de fabrication.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude de l'expansion d'une bulle de gaz et met en place la méthodologie numérique utilisée. Nous y décrirons le couplage liquide - gaz, ainsi que la méthode élaborée pour suivre une bulle en expansion. Le couplage thermo-mécanique sera également effectué.

Le troisième chapitre étend les techniques développées à l'étude de l'expansion d'un nombre quelconque de bulles, puis à la formation et à l'expansion d'une structure de mousse.

Le quatrième chapitre est une application de notre travail. Nous simulons l'expansion macroscopique d'une mousse en nous appuyant sur les outils développés précédemment.

Chapitre 1

Sur la structure cellulaire des mousses

1.1 Introduction

Ce premier chapitre bibliographique constitue une introduction aux mousses, et plus particulièrement aux mousses polymère, puisqu'il s'agit là du sujet d'étude de ce document. Ce matériau est un matériau poreux, présentant une microstructure qui conditionne largement ses propriétés physiques, mécaniques ou acoustiques [59]. Lors de la fabrication d'une mousse, on cherche donc à contrôler au mieux la formation de cette microstructure afin que le produit final ait les propriétés souhaitées pour l'application envisagée. Ainsi, pour simplifier, on peut dire que pour une application donnée, on cherche à obtenir une mousse d'une certaine densité et de "bonne qualité", *i.e.* ayant une certaine homogénéité dans la microstructure.

La première partie de ce chapitre clarifie ces notions. Nous verrons d'abord qu'un procédé de fabrication de mousse polymère se divise en une étape de germination, une étape d'expansion et une étape de refroidissement. Nous décrirons plus particulièrement les phases de germination et d'expansion, en dégagant les paramètres influant. Puis, nous présenterons deux procédés de fabrication de mousse polymère : l'extrusion et l'injection, en soulignant, là aussi, les facteurs déterminant la structure finale. Enfin, après avoir discuté de la rhéologie d'une mousse polymère, nous proposerons différents modèles numériques de la littérature rendant compte de l'expansion d'une mousse polymère. Notre attention se portera sur le modèle dit cellulaire, le plus répandu dans la littérature.

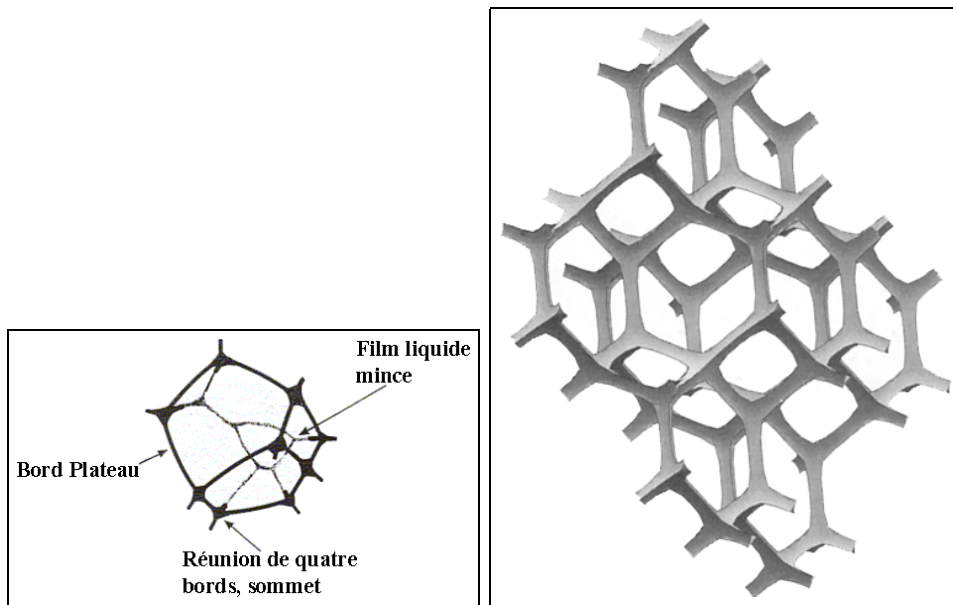
La deuxième partie de ce chapitre est consacrée aux mousses de savon. Bien que n'étant pas directement liées au sujet de ce document, nous avons jugé qu'il n'était pas inutile d'en parler. Ces mousses font intervenir une physique "différente" de celle des mousses polymère : leur procédé de fabrication est beaucoup plus simple, la tension superficielle joue un rôle important, et l'on s'intéresse alors à l'évolution

d'une structure formée vers un état d'équilibre. Cette évolution, nous le verrons, est régie par des lois de minimisation d'énergie : loi de Laplace et règles de Plateau. Nous caractériserons également, de manière succincte, la rhéologie d'une mousse de savon, avant d'indiquer les stratégies numériques rencontrées dans la littérature [68] rendant compte de ce comportement.

1.2 Les mousses polymère

Nous nous intéressons dans cette partie à caractériser une mousse polymère durant sa formation. Nous pouvons alors décrire la mousse comme un ensemble de bulles de gaz en expansion dans une matrice polymère liquide. Les bulles, initialement sphériques, interagissent entre elles au-delà d'un certain taux de gaz, et adoptent une forme polyédrique.

Afin d'appréhender et de modéliser ce processus, il est usuel d'introduire le concept de cellule [59]. Une cellule se définit comme un volume de gaz entouré d'une certaine quantité de liquide. Ainsi, la Figure 1.1(a) nous montre un exemple de cellule de mousse en fin d'expansion. Le liquide se trouve alors piégé entre plusieurs bulles, d'où la formation de bords Plateau comme montré sur la figure. Ces bords sont le lieu principal de présence du liquide. La jonction de plusieurs bords définit un sommet de la cellule. L'agencement des cellules (Figure 1.1(b)) caractérise alors la structure de la mousse, que l'on appelle, abusivement, microstructure.



(a) Une cellule

(b) Agencement de cellules

FIG. 1.1 – Structure d'une mousse représentée par un agencement de cellules : bulles de gaz entourées par du liquide.

Observons que la structure envisagée ci-dessus est stabilisée par l'emploi de tensioactifs dans la composition de la mousse. Les tensioactifs sont des molécules qui, du

fait de leur structure chimique, sont compatibles avec deux milieux distincts et immiscibles, ici le gaz et le liquide. Ces molécules se placent spontanément à l'interface liquide - gaz, réduisant l'énergie interfaciale, ou tension de surface.

Lorsque l'expansion de la mousse est achevée, l'épaisseur du liquide séparant les bulles est généralement très faible, puisque le taux de gaz peut aller jusqu'à plus de 90%. Durant le refroidissement, ces films liquides peuvent éclater, libérant le gaz. La mousse se résume alors au squelette décrit par la Figure 1.1(b), et est appelée mousse à cellule ouverte. Dans le cas où ces films n'éclatent pas mais se solidifient, la mousse est qualifiée de mousse à cellules fermées.

Pour résumer, trois échelles physiques apparaissent lors de l'étude des mousses, suivant le point de vue adopté ; chacune d'entre elles fait appel à un domaine particulier des sciences [68] :

- Une échelle nanométrique, qui correspond à l'étude des effets moléculaires aux interfaces liquide - gaz. Nous sommes ici dans le domaine de la chimie.
- Une échelle millimétrique, qui correspond à l'étude de la structure cellulaire. Nous sommes alors dans le domaine de la physique classique et de la mécanique des fluide, avec l'étude d'un milieu biphasique.
- Une échelle macroscopique (de l'ordre du mètre), qui correspond à l'étude de l'expansion d'une mousse lors d'un procédé de fabrication. La mousse peut alors être vue comme un milieu homogène. C'est le domaine de l'ingénierie.

Nous allons à présent classer les mousses polymère, préciser celles qui nous intéressent, avant d'étudier les différents procédés de fabrication.

1.2.1 Classification des mousses polymère

Nous distinguons principalement deux types [31] de mousse polymère :

- Les mousses *thermoplastiques*, produites par dispersion de bulles de gaz dans un thermoplastique fondu (polystyrène, polyéthylène, chlorure de polyvinyle, ...), avec solidification ultérieure.
- Les mousses *thermodurcissables* (polyuréthane, mousses époxydes, ...), dans lesquelles la réaction de polymérisation (exothermique) se déroule conjointement au processus d'expansion de la mousse. La mousse est stabilisée lorsque la polymérisation s'arrête.

Remarquons que les mousses à cellules fermées sont principalement des thermoplastiques, tandis que les mousses à cellules ouvertes proviennent des thermodurcissables. Nous l'avons dit en introduction, la caractéristique déterminante d'une mousse polymère est sa densité. Les mousses polymère peuvent être classées en fonction de leur densité. Ainsi, une mousse est généralement [31] dite de faible densité si elle contient plus de 90% de gaz, ce qui correspond à une masse volumique inférieure à 100kg.m^{-3} . Une mousse de densité moyenne a une masse volumique comprise entre 100 et 600kg.m^{-3} . Enfin, une mousse polymère à densité élevée contient moins de 60% de gaz, pour une masse volumique supérieure à 600kg.m^{-3} .

Par la suite, l'étude bibliographique de formation d'une mousse se limite à l'étude de mousses polymère structurales, *i.e.* de mousses thermoplastiques à forte densité.

1.2.2 Formation d'une structure de mousse

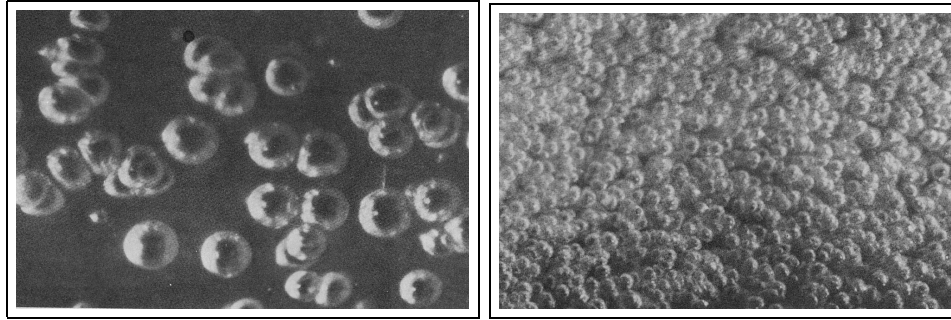
Le gaz qui provoquera ensuite le gonflement de la mousse peut être dispersé dans le mélange polymère de deux manières. Soit par injection directe d'un *agent gonflant* physique (un gaz du type nitrogène, CFC lorsque son emploi était autorisé, Chlorure de méthylène, HCFC, dont les interdictions sont prévues pour 2030) dans le mélange. Soit par utilisation d'un agent gonflant chimique. Ceux-ci, disponibles généralement sous forme de poudre, se décomposent sous l'effet de la chaleur dans la chambre de mélange, libérant des substances gazeuses (nitrogène, dioxyde de carbone).

Deux étapes fondamentales sont alors à distinguer lors de la formation d'une bulle dans un polymère liquide saturé en gaz : la germination et l'expansion.

1.2.2.1 Phase de germination

Lors de la fabrication d'une mousse polymère le gaz est d'abord dissout dans le mélange à haute pression (dans la chambre de mélange). Lorsque cette pression décroît (vers la sortie de filière en extrusion par exemple), le liquide atteint une sur-saturation critique [32], entraînant la formation de micro-bulles : c'est la germination. Ce processus provoque la diminution de la concentration de gaz dans le mélange. En dessous d'une certaine concentration, plus aucune micro-bulle n'est formée. La concentration de gaz est alors fortement réduite par diffusion du gaz présent dans le mélange vers les bulles existantes, jusqu'à épuisement du gaz disponible. On a alors atteint la concentration d'équilibre (saturation) du gaz dans le mélange polymère. Passé ce stade, les bulles croissent par diffusion du gaz des plus petites bulles vers les plus grandes (disproportionnement), jusqu'à atteindre une taille minimum au-delà de laquelle l'expansion est gouvernée par la différence de pression. Soulignons que les phénomènes précédemment décrits dépendent, entre autres, de la température et de la viscosité du mélange polymère. Nous renvoyons à [32] et [33] pour une étude plus complète sur la question.

Nous venons de décrire le mécanisme de germination homogène. Lorsque uniquement un petit nombre de bulles est créé durant la phase de germination, la structure cellulaire résultant est souvent assez "pauvre" : les bulles croissent de manière désordonnée et atteignent de grandes tailles. Il est possible d'ajouter au mélange des particules (par exemple des particules de métal) agissant comme des sites de germination et favorisant la création d'une structure plus homogène. La figure 1.2 issue de [31] illustre ce propos en montrant l'effet de ces particules de germination sur le nombre et la taille des bulles présentes dans un polyéthylène extrudé. Le mécanisme de la germination hétérogène ainsi obtenue est le même que celui d'une germination homogène, excepté le fait que les bulles se forment à moindre concentration de gaz.



(a) Sans particule de germination.

(b) Avec 0.01 % vol. de particules de métal.

FIG. 1.2 – Photographie issue de [31] illustrant l’effet de particules de germination sur le nombre et la taille des bulles dans un polyéthylène extrudé faible densité.

1.2.2.2 Phase d’expansion

Dans une mousse polymère obtenue par extrusion ou injection, l’expansion d’une bulle à proprement parler se fait d’abord par différence entre la pression interne p_g de la bulle et la pression p_{ext} du mélange polymère. Cela se fait en sortie de filière en extrusion, ou dans le moule en injection, selon des modalités que nous décrirons par la suite. Nous pouvons admettre que le gaz suit une loi des gaz parfaits. Sa masse volumique ρ_g s’exprime donc par :

$$\rho_g = \frac{\mathcal{M}p_g}{RT_g} \quad (1.1)$$

où \mathcal{M} désigne la masse molaire du gaz et $R = 8.314 J.mol^{-1}.K^{-1}$ la constante des gaz parfait. Lorsque l’expansion débute, les bulles sont sphériques (voir Figure 1.2) : la fraction gazeuse est encore petite, de l’ordre du pourcent à saturation. Au cours de l’expansion, la fraction volumique gazeuse augmente. Rappelons qu’un empilement de sphères rigides ne peut remplir un domaine à plus de 74,05% pour des sphères de tailles égales, ce taux pouvant monter à 85% pour des sphères de tailles différentes [59]. Ainsi, au-delà d’une certaine valeur de la fraction gazeuse, les bulles interagissent et adoptent des formes polyédriques (voir Figure 1.1(a)). Le chapitre 2 de ce document étudie plus en détail l’expansion d’une bulle de gaz par différence de pression. Cependant, nous pouvons déjà établir, selon la littérature [31], les paramètres les plus significatifs contrôlant la vitesse d’expansion d’une bulle dans un liquide :

- La diffusivité et la concentration de l’agent gonflant, dont l’augmentation accroît la vitesse d’expansion ;
- La viscosité du mélange, dont l’augmentation diminue la vitesse d’expansion.
- Le comportement non-Newtonien du polymère. Plus celui-ci est sensible au taux de cisaillement, et plus la vitesse d’expansion est élevée.

Ces tendances sont résumées sur la Figure 1.3. Notons également qu’une augmenta-

tion de la température du mélange produit une diminution de la viscosité, entraînant une augmentation de la vitesse d'expansion.

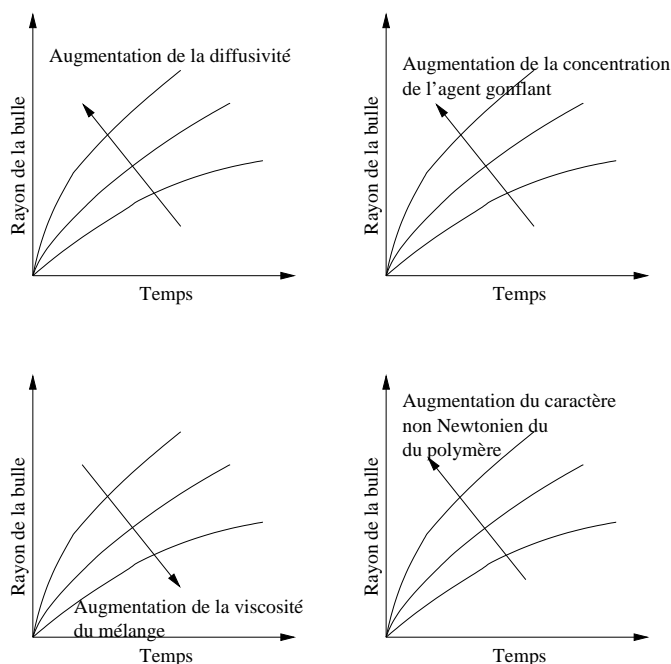


FIG. 1.3 – Vue schématique des effets des paramètres les plus influents sur l'expansion d'une bulle dans un polymère fondu : diffusivité et concentration de l'agent gonflant, viscosité du mélange, caractère non Newtonien du polymère.

Pour conclure cette partie, précisons les notions de solubilité et de diffusivité du gaz qui, nous l'avons vu, jouent un rôle important lors de l'expansion d'une bulle de gaz dans un polymère fondu. Pour une quantité donnée d'agent gonflant utilisé, la quantité de gaz dissout dans le polymère est fonction de la pression et de la température appliquées au mélange. Habituellement, on exprime la solubilité du gaz par la loi d'Henry qui postule, à saturation, la proportionnalité entre la concentration du gaz dissout dans le liquide et sa pression partielle :

$$C_g = K_p p_g \quad (1.2)$$

où C_g est la concentration du gaz dans le mélange [$mol.kg^{-1}$] et K_p , le coefficient de proportionnalité, est appelé constante d'Henry [$mol.kg^{-1}.atm^{-1}$]. Notons que l'usage veut que les pressions partielles soient exprimées en atmosphères et non en Pascal, d'où les unités de K_p . L'équivalence est : 1 atmosphère = 760 mm de mercure = 1013,25 hectopascals. La constante de Henry dépend des deux milieux, polymère et gaz, en présence, et varie également avec la température. Pour certains types de mélanges, il est possible d'exprimer cette thermo-dépendance par une loi d'Arrhénius.

Le processus de diffusion du gaz dissout dans le polymère vers les bulles est généralement exprimé par les deux lois de Fick. La première de ces lois est la loi fondamentale

de la diffusion des molécules. Elle postule que le gradient de concentration et le flux de diffusion J sont proportionnels. J est défini comme la quantité de matière (ici de gaz) qui traverse par seconde l'unité d'aire d'une surface normale au mouvement de transfert étudié. Nous avons donc :

$$J = -D\nabla C_g \quad (1.3)$$

où D est le coefficient de diffusion [$m^2.s^{-1}$]. Considérons maintenant un volume élémentaire ω du mélange : la variation avec le temps de la concentration du gaz dissout dans ω est égale à la quantité de gaz sortant par la frontière $\partial\omega$ de ω . D'où :

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} C_g(x, t) = - \int_{\partial\omega} J(x, t) \mathbf{n} \quad (1.4)$$

où \mathbf{n} est la normale unitaire extérieure à $\partial\omega$. Nous obtenons ainsi la deuxième loi de Fick :

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} + \text{div}[C_g \mathbf{v}] = D\Delta C_g \quad (1.5)$$

où \mathbf{v} est la vitesse. Pour établir l'Equation (1.5) nous avons considéré la diffusion isotrope, si bien que D est un scalaire. Ce coefficient dépend lui aussi de la température, cette dépendance pouvant s'exprimer par une loi d'Arrhénius. Dans le cas de bulles de gaz gonflant en milieu liquide, la loi de Henry (1.2) sert de condition aux bords (à la surface des bulles) pour fermer l'Equation (1.5).

1.2.3 Procédés de fabrication des mousses polymère

Lors de la mise en oeuvre d'un procédé de fabrication de mousse polymère, on souhaite obtenir une mousse ayant certaines propriétés physiques (élasticité, etc.), thermiques ou acoustiques. On désire généralement une mousse ayant une masse volumique donnée, possédant une distribution de taille et de forme de bulles homogène. Pour cela, il est possible, d'une part de jouer sur les propriétés des agents intervenant dans le procédé, et d'autre part d'optimiser ce procédé en choisissant des conditions de fabrication adéquates pour la structure cellulaire souhaitée.

1.2.3.1 Extrusion des mousses polymère

Fondamentalement, il existe deux procédés d'extrusion produisant une mousse structurée (mousse thermoplastique à peau intégrée avec une forte densité cellulaire) : le premier est une adaptation du procédé d'extrusion classique, le deuxième est le procédé Celuka. Lors du premier procédé (Figure 1.4), l'agent chimique gonflant se décompose dans l'extrudeuse. Ceci se fait sous haute pression, prévenant toute expansion prématurée. Un gradient de température est établi afin d'amorcer la décomposition dans la dernière zone de l'extrudeuse. L'expansion commence lorsque le mélange polymère - gaz arrive en sortie de filière avec approximativement

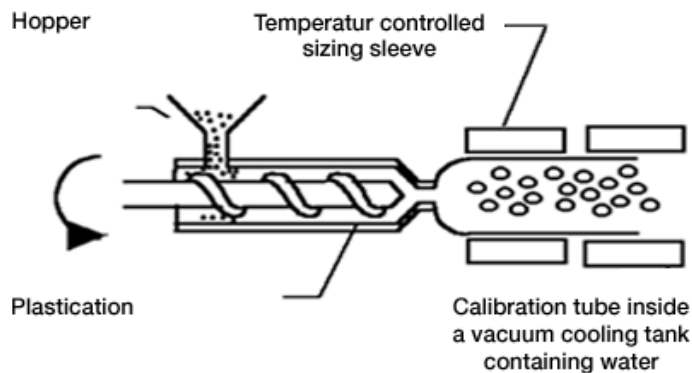


FIG. 1.4 – Procédé classique d'extrusion de mousse

la forme désirée. Lorsque le taux d'expansion voulu est atteint, l'extrudat expansé est refroidi, prenant ainsi sa forme finale. Le procédé décrit correspond à une expansion libre.

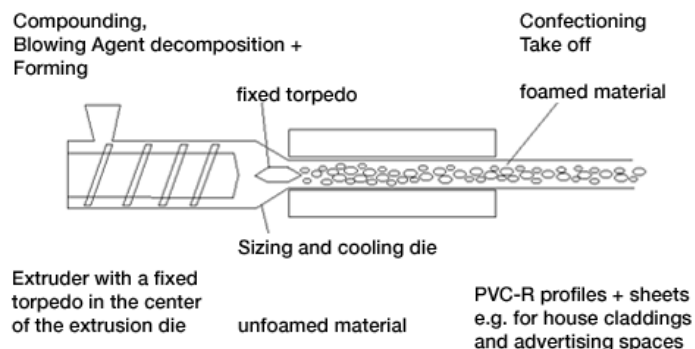


FIG. 1.5 – Procédé d'extrusion de mousse Celuka

Lors du procédé Celuka (Figure 1.5), la décomposition de l'agent gonflant s'opère comme dans le cas classique. Dans la filière, le mélange polymère - gaz est contraint à prendre la forme et les dimensions du produit final. La filière d'extrusion possède une torpille centrale dirigeant l'écoulement de l'extrudat vers les périphéries. L'espace vide ainsi créé au sein de l'extrudat permet à l'expansion d'avoir lieu. Dans le même temps, la surface de l'extrudat est rapidement refroidie, provoquant ainsi la formation d'une mousse à peau intégrale.

Dans le but d'obtenir une "bonne" structure de mousse, il est intéressant d'étudier à quel endroit de la filière l'expansion commence. En effet, une expansion qui commence trop tôt peut conduire à de grandes tailles de bulles et à une structure non uniforme. La pression dans la filière prise en cet endroit est appelée pression critique. C'est la pression permettant le début de l'expansion des bulles. Cette pression est fonction de plusieurs facteurs, dont : la température du mélange, la concentration d'agent gonflant, la solubilité du gaz dans le mélange, la taille initiale des bulles [31].

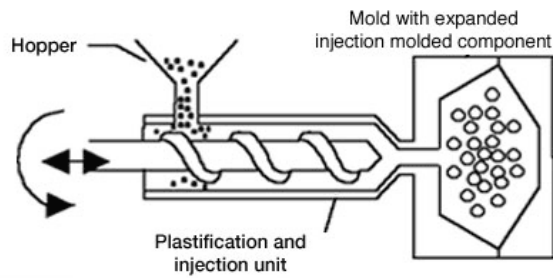


FIG. 1.6 – Procédé d’injection à fort chargement - haute pression de mousse polymère

1.2.3.2 Injection des mousses polymère

Tous les procédés de moulage par injection de mousses structurales sont soit à faible chargement (short-shot) - faible pression, soit à fort chargement (full-shot) - haute pression. Le qualificatif de faible ou haute pression se rapporte à la force nécessaire pour garder le moule fermé durant le remplissage. La différence majeure entre ces deux procédés réside dans la phase de remplissage du moule. A faible pression, un faible chargement est utilisé : le moule n’est pas rempli complètement par le mélange polymère-gaz, et c’est l’expansion du gaz qui finit de remplir la cavité. A haute pression (Figure 1.6), le moule est d’abord complètement rempli par le mélange polymère - gaz. Après formation d’une épaisseur de peau suffisante par refroidissement à la paroi, la cavité du moule est élargie, permettant ainsi l’expansion du mélange toujours fondu au centre du moule. L’avantage de l’injection à faible pression est sa facilité de mise en oeuvre en adaptant légèrement un équipement de moulage classique. D’un autre côté, bien que le procédé à haute pression soit techniquement plus dur à mettre en oeuvre (expansion du moule), il permet de contrôler l’épaisseur de peau, et d’obtenir des tailles finales de cellules uniformes.

Il ressort ainsi de la littérature [31] que plus la pression d’injection est élevée, plus la taille finale des bulles sera petite, avec une distribution uniforme. Ceci s’explique par les faits suivants :

- A forte pression d’injection, la plupart des bulles commencent à croître une fois le seuil d’injection franchi. A contrario, à faible pression d’injection, la croissance peut débuter dans le canal d’alimentation, et continuer dans le moule. Une faible pression produit donc des bulles de tailles plus importantes et plus hétérogènes que dans le cas d’une pression élevée.
- Une forte pression d’injection nécessite un temps de remplissage plus court que pour une faible pression. Ceci conduit donc à des bulles plus petites et donc de tailles plus homogènes.
- Le temps de relaxation des contraintes de la matrice viscoélastique est plus important dans le cas à haute pression (plus d’énergie stockée) que dans celui à faible pression.

Le second paramètre du procédé pouvant être contrôlé est la température du moule. Rappelons que la viscosité du mélange augmente lorsque la température diminue. Ainsi une température basse à la paroi va freiner l’expansion des bulles dans son voi-

sinage, et donc provoquer des hétérogénéités. Enfin, troisième paramètre, la température initiale du mélange. Une température de mélange basse donnera moins de bulles et des bulles plus petites qu'à température plus élevée. En effet, plus la température est basse, plus la viscosité augmente, freinant ainsi, et l'expansion due à la différence de pression, et l'expansion due à la diffusion du gaz. Pour résumer, la Figure 1.3 peut être complétée par la Figure 1.7.

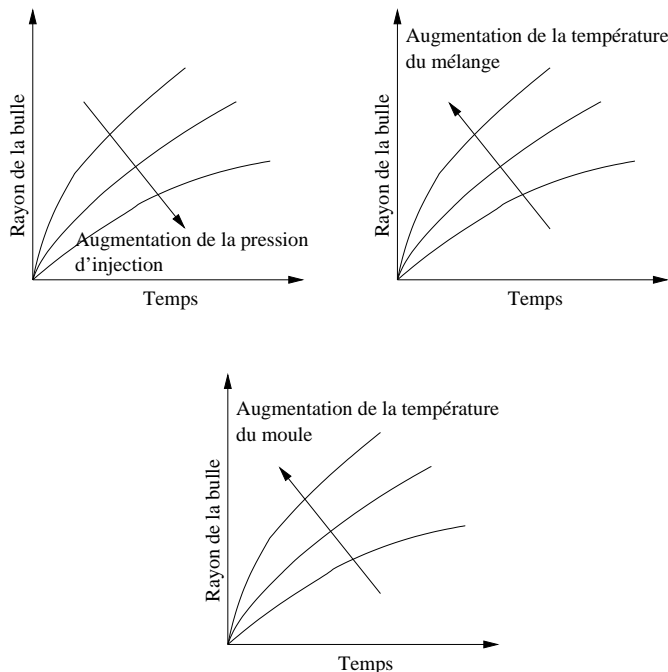


FIG. 1.7 – Vue schématique des effets des paramètres liés aux conditions d'injection sur l'expansion d'une bulle dans un polymère fondu : pression d'injection, température initiale du mélange, température du moule.

Il résulte de cette partie que la formation d'une structure cellulaire est un mécanisme complexe, influencé par le choix des agents mis en jeu (Figure 1.3) et par le choix des paramètres du procédé choisi (Figure 1.7). Dans ce contexte, la simulation numérique constitue un outil pouvant aider à la compréhension de la dépendance de la structure de mousse vis-à-vis des paramètres précédemment cités.

1.2.4 Rhéologie d'une mousse polymère

Nous abordons ici un des sujets les plus complexes des mousses polymère, dans la mesure où la rhéologie d'une mousse dépend de nombreux facteurs, dont, en premier lieu, de ses constituants, *i.e.* du polymère et du gaz. Il n'est pas non plus déraisonnable de penser que cette rhéologie puisse également dépendre de la densité de bulles de gaz présent dans la mousse, et donc de leur taille et de leur forme. Par exemple, est-ce qu'un fluide constitué d'une matrice liquide et d'un ensemble de bulles sphériques a la même rhéologie qu'un fluide constitué d'un agencement de cellules comme décrit sur la Figure 1.1(b), et ce pour des taux de gaz identiques ? Nous voyons donc qu'une des difficultés est que la rhéologie d'une mousse varie avec son degré d'expansion. Ainsi, pour exprimer la viscosité d'une mousse en fonction

du taux de gaz, des viscosités du polymère et du gaz, des rapprochements peuvent être faits avec les modèles décrivant les émulsions diluées et les suspensions de bulles de gaz [42], [43]. Cependant, ce rapprochement a ses limites. D'une part, le taux de gaz des émulsions est faible par rapport à celui d'une mousse. D'autre part, les effets non-newtoniens intervenant dans la rhéologie des émulsions proviennent de l'interaction bulle - liquide, alors que, pour les mousses, ces effets sont surtout dus à l'interaction des bulles entre elles [42].

Lorsque la structure de la mousse est bien formée, *i.e.* lorsque l'expansion s'est arrêtée, des modèles micromécaniques peuvent être utilisés pour rendre compte du comportement de la mousse [42], [59], [68]. Dans ces modèles, la structure de la mousse est idéalisée par une structure périodique, et la fraction liquide est supposée très petite. Nous allons décrire quelques caractéristiques rhéologiques d'une structure de mousse polymère formée : la présence d'une contrainte seuil, des effets non-newtoniens, et une vitesse de glissement en paroi.

1.2.4.1 Contrainte seuil

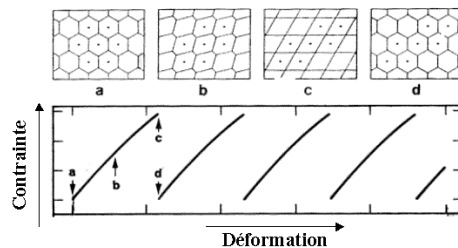


FIG. 1.8 – Courbe contrainte - déformation et changements topologiques associés, dans le cas du cisaillement faible d'une mousse 2D structurée (nid d'abeilles).

Lors d'un essai de cisaillement de mousse à faible taux de déformation, des réorganisations topologiques s'opèrent dans la structure, relâchant ainsi la contrainte. La Figure 1.8, extraite de [42] montre une simulation 2D de la déformation sous cisaillement d'une mousse modélisée par une structure en nid d'abeille, et fournit la courbe contrainte - déformation correspondante. En particulier, la figure c. représente la coalescence des bords Plateau, donnant une configuration instable. D'où la structure d'équilibre trouvée sur la figure d. qui complète le cycle. La contrainte maximale est relevée sur la courbe contrainte - déformation pour l'état c., et définit ainsi une contrainte seuil, notée σ_y (yield stress). Cette description suppose de petits taux de cisaillement et dans ce cas, le passage de l'état d'équilibre a. à l'état d'équilibre d. est considéré instantané. Relevons tout de même qu'une telle modélisation ne reflète pas tout à fait ce qui se passe dans une mousse réelle. En effet, alors que dans cette dernière les changements topologiques sont progressifs et aléatoires, ils ont lieu simultanément dans une mousse ordonnée supposée infinie.

1.2.4.2 Régime d'écoulement

Au-delà de la contrainte seuil σ_y la mousse s'écoule comme un fluide fortement visqueux. L'existence et la signification de ce seuil sont encore l'objet de débats dans la communauté des rhéologues. Admettons son existence, prédite par les modèles micro-mécaniques. Suivant le modèle des fluides de Bingham, la contrainte peut être décrite, au-delà de σ_y par :

$$\sigma = \sigma_y + \eta_p \dot{\varepsilon} \quad (1.6)$$

où $\dot{\varepsilon}$ est le taux de déformation, et η_p est appelée viscosité plastique. Remarquons que la valeur de la contrainte seuil diminue lorsque la fraction liquide augmente. Les rhéologues préfèrent présenter le résultat (1.6) en faisant apparaître la viscosité effective, rapport de la contrainte sur le taux de déformation. Nous avons alors :

$$\eta_{eff} = \frac{\sigma_y}{\dot{\varepsilon}} + \eta_p \quad (1.7)$$

Il est à noter que cette expression n'a de sens que pour des taux de déformation suffisamment élevés, la viscosité divergeant pour de faibles taux.

Pour conclure, précisons qu'un écoulement de mousse possède un glissement à la paroi [42], dont la vitesse dépend du cisaillement à la paroi. De même qu'il existe une contrainte seuil d'écoulement, il existe une contrainte seuil de glissement σ_{ys} . Ainsi, pour des parois assez lisses, il peut exister un intervalle de contraintes $[\sigma_{ys}, \sigma_y]$ dans lequel, la mousse se comportant comme un solide élastique est transportée par glissement aux parois (écoulement "bouchon"). La Figure 1.9 schématise le profil de vitesse d'un écoulement rectiligne de mousse dans un tube. Trois zones peuvent intervenir : la zone centrale, où la contrainte n'excède pas σ_y . La zone de cisaillement dans laquelle la contrainte excède σ_y . Enfin, la zone des parois qui présente une vitesse de glissement u_s .

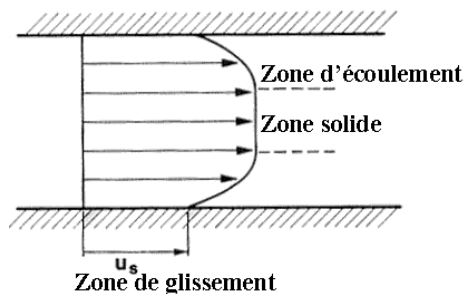


FIG. 1.9 – Profil de vitesse d'un écoulement rectiligne de mousse. Trois zones sont à distinguer : une zone solide, une zone d'écoulement, et une zone de glissement aux parois avec une vitesse de glissement u_s .

1.2.5 Modélisation et simulation de l'expansion d'une mousse polymère

Une simulation d'expansion d'une mousse polymère peut avoir plusieurs buts. On peut tout d'abord lui demander de fournir des renseignements sur le remplissage d'une pièce (en injection par exemple). Il s'agit par exemple de prédire le temps d'expansion ou encore les éventuels défauts de remplissage en fonction des conditions opératoires. Ce sont donc des données d'ordre macroscopique que l'on cherche à récupérer.

On peut également attendre d'une simulation d'expansion de mousse qu'elle donne des renseignements sur la microstructure, comme la distribution de rayons de bulles dans le moule, et ce, afin de prévoir les hétérogénéités et les défauts de structure (coalescence, etc.) Ce sont donc des renseignements d'ordre microscopique qui sont demandés.

Il ressort de ces attentes deux approches *a priori* différentes de la modélisation et de la simulation d'expansion de mousse polymère. Une approche que l'on qualifie de macroscopique, et une autre de microscopique.

L'approche macroscopique, envisagée dans [41] [44] [20], revient à considérer la mousse comme un fluide homogène, ce qui permet de prendre "facilement" en compte les conditions de fabrication. Les paramètres rhéologiques (viscosité) et thermiques (chaleur spécifique, conductivité) de ce fluide dépendent alors des paramètres de chacun de ses composants, généralement pondérés par la masse volumique de ces mêmes composants [41]. La structure de la mousse peut être prise en compte via des paramètres morphologiques (rayons des bulles, etc.) intervenant dans les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Une résolution par éléments finis fournit l'expansion macroscopique de la mousse au cours du temps. Cette approche macroscopique peut fournir une distribution de taille de bulle, une densité de bulles, etc. dans la mousse. La difficulté de cette approche est de relier les paramètres matériau comme la densité et la viscosité aux paramètres morphologiques introduits. Ceci se fait généralement au travers de modèle micro-mécaniques. Ces modèles, quand ils existent, ne sont valables que sous certaines hypothèses. Ainsi, les bulles sont supposées sphériques, et le taux de gaz est soit très grand, soit très faible, ce qui est incompatible avec la phase d'expansion. C'est ce qui est fait dans [43] pour la viscosité, où dans [20] qui utilise une masse volumique de la mousse donnée par des études expérimentales.

Une première étape dans la prise en compte de la structure de mousse consiste à relier explicitement les grandeurs de la mousse à des paramètres morphologiques, et en premier lieu à la taille des bulles [66], [47]. [47] étudie la distribution de taille de bulles dans un procédé d'expansion libre de mousses polyuréthane, au travers d'une densité de distribution de taille $f(l)$. Ainsi, $f(l)dl$ est le nombre de bulles, par unité de volume, dont la taille est comprise entre l et $l + dl$. L'expansion se fait par réactions chimiques : l'équation de la chaleur est couplée à des cinétiques de polymérisation, ainsi qu'au taux d'évaporation $N(l)$ de l'agent gonflant, via la

masse m_B de celui-ci. Ce taux d'évaporation est exprimé comme fonction de la taille de bulle. L'équation d'évolution de la masse d'agent gonflant présent dans la mousse s'écrit :

$$-\frac{dm_B}{dt} = \int_{l_N}^{\infty} M_B [N(l)f(l)V_L] dl \quad (1.8)$$

où l_N est une taille minimale de bulle, V_L le volume du mélange liquide - agent gonflant, et M_B la masse moléculaire de celui-ci. Le système est fermé par un bilan de population portant sur le nombre de bulles de taille comprise entre l et $l + dl$. Cette équation donne $f(l)$. Enfin, remarquons que les hétérogénéités de taille de bulles sont dues, d'une part à l'hétérogénéité initiale si l'on a supposé une germination hétérogène, et d'autre part aux conditions en température imposées aux parois.

Tout en restant à l'échelle de l'écoulement, il est donc possible d'obtenir des informations sur la structure de la mousse, en tenant compte de certains paramètres morphologiques et d'un bilan de population. Toutefois, le modèle décrit considère une croissance par diffusion de gaz, laquelle fait intervenir des hypothèses quant à la forme de la bulle (sphérique) et nécessite des lois expérimentales. Le mouvement des bulles par rapport au liquide n'est, ici, pas pris en compte. Le prendre en compte nécessiterait encore l'expression de la viscosité de la mousse en fonction de l .

Une autre approche consiste à simuler directement l'expansion d'une cellule. Ce sont les méthodes dites cellulaires [3], [4], [6], [54], [58], [57], [38]. Ces modèles considèrent une cellule sphérique, consistant en une bulle de gaz entourée par une quantité finie de mélange polymère - gaz. Le volume de polymère présent dans la cellule rend compte du nombre de bulles par unité de volume présent dans la mousse. A partir de la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, de la rhéologie du polymère et des propriétés du gaz, un modèle est bâti, donnant l'évolution du rayon de la bulle de gaz au cours du temps. La bulle croît par différence de pression, et par diffusion du gaz dissout dans le polymère. Ce modèle nécessite deux paramètres extérieurs à la cellule, ou paramètres macroscopiques : la pression et la température ambiante. Un modèle cellulaire peut alors être couplé à une approche macroscopique d'un écoulement mousseux via ces deux paramètres [4].

1.2.5.1 Modèle cellulaire

Le modèle cellulaire que nous décrivons ici est celui développé par Moris Amon dans [3]. La figure 1.10 résume le concept de cellule : une bulle sphérique de gaz de rayon $R_g(t)$ est entourée par une couronne de volume fini de mélange polymère - gaz. Le rayon total de la cellule est noté $S(t)$. Nous nous plaçons dans un système de coordonnées sphériques. Les symétries du système font que les champs mis en jeu sont purement radiaux, donc ne dépendent uniquement que de la coordonnée radiale r . La concentration $C_g(r, t)$ du gaz dans le mélange vérifie la loi de Henry (1.2) à la surface de la bulle, et est supposée constante en $r = S(t)$. Cette dernière relation

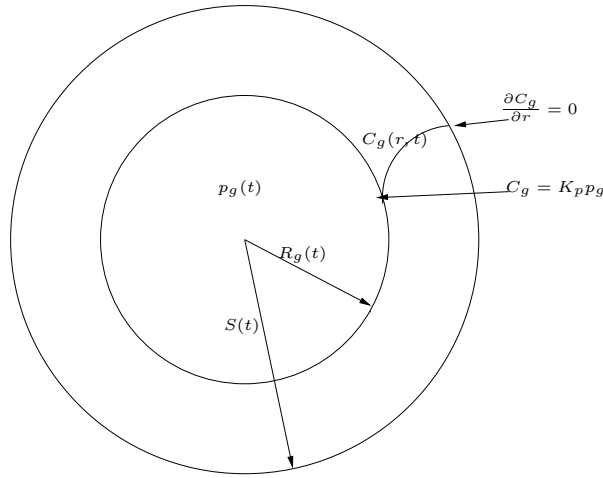


FIG. 1.10 – Cellule élémentaire : une bulle de gaz de rayon R_g , entourée d'un mélange gaz - polymère.

signifie qu'au delà de $r = S(t)$, la bulle ne perturbe plus la concentration.

Nous supposons ici, comme dans [3], que le polymère a un comportement Newtonien, *i.e.* que sa viscosité est constante. Sa masse volumique ρ_l dépend de la température ambiante $T_l(t)$. La bulle suit la loi des gaz parfaits (1.1). Deux variables extérieures au modèle interviennent : la température ambiante T_l et la pression ambiante p_{ext} , qui dépendent de la position de la cellule dans un écoulement macroscopique.

Initialement la bulle possède un rayon R_0 et une pression p_{g0} . De par la loi de Henry, le système est à l'équilibre thermodynamique : $C_g(r, 0) = c_0 = K_p p_{g0}$. Par contre, du fait de la surpression $p_{g0} > p_{ext}$, il n'y a pas équilibre mécanique. Pour l'atteindre, la bulle commence à croître, et donc p_g à décroître. De ce fait, la concentration à l'interface $C_g(R_g, t)$ décroît également par la loi d'Henry (1.2). Un gradient de concentration s'établit ainsi, diffusant le gaz du polymère vers la bulle.

Les inconnues du problème sont donc le rayon de la bulle $R_g(t)$, la pression de la bulle $p_g(t)$ et la concentration du gaz $C_g(r, t)$. Les équations d'équilibre fournissent un système de trois équations :

– La conservation de la masse et de la quantité de mouvement entraînent :

$$\begin{cases} \frac{dR_g}{dt} = \frac{V + \frac{4\pi}{3}R_g^3}{4\eta V} [(p_g - p_{ext})R_g - 2\gamma] - \frac{R_g}{3} \frac{d \ln \rho_l}{dt} \\ R_g(0) = R_0 \end{cases} \quad (1.9)$$

où V est le volume du polymère dans la cellule, η la viscosité du polymère, et γ la tension superficielle.

– La conservation de la masse de gaz dans le mélange, exprime que, le gain de masse de la bulle entre l'instant t et l'instant initial est égal à la perte de masse de gaz dans le mélange entre ces deux instants. Ceci s'écrit :

$$\frac{4\pi}{3} [R_g^3 \rho_g - R_0^3 \rho_{g0}] = mc_0 - \int_R^S 4\pi r^2 C_g \rho_l dr \quad (1.10)$$

- où m est la masse du liquide présent dans l'enveloppe.
 – La loi de Fick (1.5) s'écrit, dans notre cas :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_g}{\partial t} + \mathbf{v}_r \frac{\partial C_g}{\partial r} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial C_g}{\partial r}) \\ C_g(r, 0) = c_0 \\ C_g(R, t) = K_p p_g \\ \frac{\partial C_g}{\partial r}(S, t) = 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

Le système formé des Equations (1.9) - (1.11) définit complètement le modèle cellulaire.

Dans des conditions isothermes, la masse volumique ρ_l du liquide reste constante, puisqu'elle est supposée ne dépendre que de la température. Dans ce cas, l'Equation (1.9) permet de déduire un rayon initial minimal nécessaire à la croissance, *i.e.* tel que $dR_g(0)/dt > 0$.

Dans des conditions anisothermes, [3] caractérisent deux comportements différents. Loin de l'équilibre mécanique, la variation de ρ_l peut être négligée devant les autres termes. Cependant, proche de l'équilibre mécanique $[(p_g - p_{ext})R - 2\gamma \rightarrow 0]$ ou lorsque le polymère commence à solidifier ($\eta_l \rightarrow +\infty$), l'Equation (1.9) entraîne :

$$R \propto \rho_l^{-1/3} \quad (1.12)$$

Ce qui montre l'effet contractant de l'augmentation de la viscosité. Le modèle ainsi développé prévoit également un rayon maximal. Le volume de polymère présent dans la cellule, permet de tenir compte de la densité de bulles dans la mousse. Plus généralement, le modèle cellulaire rend compte des tendances mentionnées au paragraphe 1.2. Plusieurs améliorations ont été apportées à ce modèle, que ce soit au niveau de l'étape de germination [57], [58], ou de la prise en compte de la viscoélasticité [54], [38], [64].

1.2.5.2 Couplage micro/macro

Nous l'avons dit, le modèle cellulaire peut être couplé avec une description macroscopique de l'écoulement de la mousse, via les variables p_{ext} et T_l . La mousse est alors modélisée par un ensemble de cellules et un milieu compressible. Les auteurs [4], [6], [5] qui opèrent ce couplage se ramènent, par des hypothèses, à des cas 1D, que ce soit dans l'écriture de la vitesse ou de l'équation de la chaleur.

Ainsi, Moris Amon, en 1986 propose un couplage pour un cas idéalisé d'injection de mousse à faible pression [4]. Ce couplage prend en compte, pour des raisons de temps de calcul, une seule cellule représentant la totalité de la mousse. Une masse volumique globale de la mousse en est déduite à chaque instant, en fonction du taux de solidification du polymère.

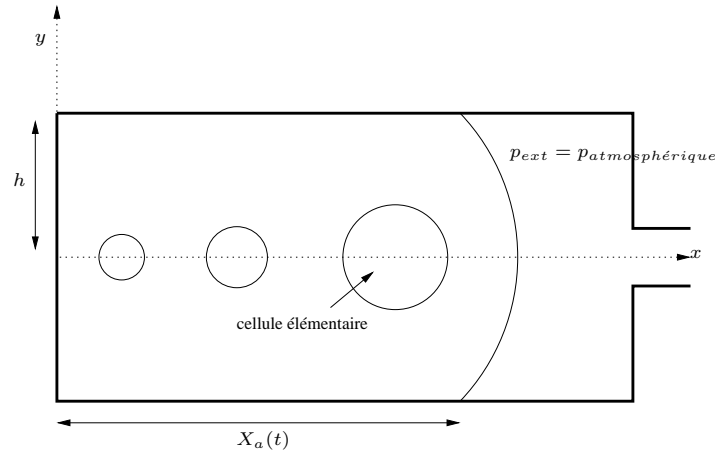


FIG. 1.11 – Représentation macroscopique idéalisée de l’injection à faible charge de mousse. $X_a(t)$ est la position du front de matière.

A. Arefmanesh utilise, sur le même principe, 100 cellules pour décrire une expansion isotherme [6] en 1990, avant d’aborder le cas anisotherme [5] en 1995. Nous allons, afin de fixer les idées, décrire le couplage isotherme effectué dans [6].

Nous considérons un cas d’injection à faible charge : le moule n’est pas complètement rempli, de manière à laisser l’expansion se développer. La position du front de matière polymère - vide est noté $X_a(t)$. Afin de se ramener à un cas 1D, les cellules sont supposées alignées sur le plan de symétrie du moule (voir Figure 1.11). Cette hypothèse se justifie par la nature isotherme de la simulation. De plus, la germination est supposée homogène.

Nous notons M la masse totale du polymère dans le moule, N le nombre de cellules utilisées, et ρ_{cell} la masse volumique d’une cellule. Rappelons que, conformément aux notations du modèle cellulaire, m et V sont la masse et le volume du polymère dans une cellule. Alors, en négligeant la masse du gaz, nous avons les relations suivantes :

$$m = \frac{M}{N} ; \quad V = \frac{m}{\rho_l} ; \quad \rho_{cell} = \frac{m}{V + 4\pi R_g^3/3} \quad (1.13)$$

Puisque la masse volumique de la mousse en un point x est égale à la masse volumique de la cellule située en ce point, la conservation de la masse dans la mousse s’écrit :

$$\frac{\partial \rho_{cell}}{\partial t} + \text{div}[\rho_{cell} \mathbf{v}] = 0 \quad (1.14)$$

La conservation de la quantité de mouvement, avec l’hypothèse de contact collant à la paroi, et les hypothèses effectuées dans [5], conduit à la relation suivante entre la vitesse $\mathbf{v} = (v_x, 0)$ et le gradient de pression :

$$v_x = \frac{y^2 - h^2}{2\eta} \frac{dp_{ext}}{dx} \quad (1.15)$$

où h est la demi-hauteur du moule. En explicitant, dans (1.14) la masse volumique d'une cellule donnée par (1.13) et la vitesse donnée par (1.15), et en prenant en compte l'Equation (1.9), nous obtenons une équation différentielle ordinaire du deuxième ordre décrivant le champ pression dans le moule :

$$\frac{d^2 p_{ext}}{dx^2} + \phi_1 \frac{dp_{ext}}{dx} + \phi_2 p_{ext} = \phi_3 \quad (1.16)$$

avec les coefficients ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 définis par :

$$\phi_1 = -\frac{4\pi R_g^2 \frac{\partial R_g}{\partial x}}{\xi} \quad ; \quad \phi_2 = -\frac{2\pi R_g^3}{h^2 \xi} \quad ; \quad \phi_3 = -\frac{2\pi R_g^3 (p_g - \frac{2\gamma}{R_g})}{h^2 \xi} \quad (1.17)$$

où ξ est le volume total de la cellule ($V + 4\pi R_g^3/3$). Remarquons le terme $\frac{\partial R_g}{\partial x}$, la dérivée du rayon selon x dans le moule. Nous adjoignons à l'Equation (1.16) des conditions aux bords. Par exemple, celles de [5] sont :

$$\begin{cases} \frac{\partial p_{ext}}{\partial x} = 0 & \text{en } x = 0 \\ p_{ext} = p_{atmosphérique} & \text{en } x = X_a(t) \end{cases} \quad (1.18)$$

Ainsi, les Equations (1.9), (1.10), (1.11) et (1.16) définissent complètement l'expansion de la mousse, sous les hypothèses faites. Une comparaison est faite entre simulation et expérience dans [4] et [5] : les tendances observées expérimentalement sont retrouvées par la simulation.

Cependant, les sources d'erreur restent multiples. Elles sont à chercher dans certains phénomènes qui ne sont pas pris en compte, comme le fait que l'expansion commence avant le seuil d'injection, donnant lieu à une distribution "initiale" hétérogène de taille de bulle. Par ailleurs, nous mettons en avant les approximations dues au modèle cellulaire : la forme sphérique d'une cellule n'est qu'une approximation de la réalité. L'absence d'interaction entre les cellules (si ce n'est par le volume de polymère attribué à chacune d'entre elles), puisque, dans le modèle macroscopique, une cellule est représentée par une masse ponctuelle. Enfin, la viscosité de la mousse est prise égale à celle du polymère, ce qui, nous l'avons dit, est sujet à discussion.

Plus généralement, nous pouvons conclure que les modèles d'expansion de mousse polymère rencontrés dans la littérature, soit ne peuvent pas décrire sa structure, soit la décrivent par l'intermédiaire de modèle micro-mécaniques, reposant sur des hypothèses restrictives et pas toujours compatibles avec la phase d'expansion. Notre approche, dans la suite de ce document, consiste à simuler l'expansion d'un échantillon de mousse en utilisant une méthode éléments finis. Si l'on se replace dans le contexte des modèles cellulaires cela signifie que notre cellule n'est plus une bulle et une matrice polymère, mais n bulles dans cette matrice.

Nous nous proposons, avant d'exposer notre méthode, d'étudier un domaine qui considère l'évolution de n bulles de gaz (ou n cellules) vers un état d'équilibre. C'est le domaine des mousses de détergent, ou mousses de savon.

1.3 Les mousses de savon

Nous nous intéressons ici à une mousse liquide déjà formée, que nous qualifions de "stationnaire", en disant que la fraction volumique gazeuse n'évolue plus. Comme dans le cas des mousses polymère, nous pouvons définir le concept de cellule, et décrire la mousse comme un ensemble de cellules (Figure 1.1). Contrairement aux mousses polymère, la viscosité du liquide (par exemple de l'eau) est négligée. La tension superficielle joue alors un rôle prépondérant. Le gaz peut atteindre des proportions dépassant les 99%, si bien que l'on définit ce type de mousse comme étant "un fluide complexe dans lequel les bulles de gaz sont séparées des films liquides minces" [42]. Précisons, afin de fixer le vocabulaire, que les mousses à très faible taux de liquide ($< 1\%$) sont qualifiées de sèches, tandis que celles dont la fraction liquide est plus importante ($\sim 10\%$) sont qualifiées de mouillées [68].

Dans la littérature, les études numériques de mousses de type savon portent sur l'évolution d'une structure vers un état d'équilibre. Il n'est donc plus question d'expansion, puisque cette évolution s'effectue à taux de gaz constant. Le passage à un état d'équilibre se fait par changements topologiques locaux dans la structure, correspondants à une minimisation de surface. La structure est également affectée par le phénomène de disproportionnement (coarsening process) : la différence de taille entre deux bulles voisines induit une surpression dans la plus petite, d'où une diffusion du gaz de la plus petite bulle vers la plus grande, jusqu'à disparition de la plus petite. Les autres phénomènes pouvant affecter la structure d'une mousse sont la coalescence (rupture de film entre deux bulles) et le drainage (écoulement du liquide dans les bords Plateau sous l'effet de la gravité et de la capillarité).

Nous allons d'abord étudier les lois d'équilibre local gouvernant les changements topologiques. Puis, nous étudierons les propriétés rhéologiques des mousses liquides, en les reliant à la structure cellulaire. Enfin, nous donnerons un aperçu des méthodes numériques existantes pour simuler l'évolution d'une mousse liquide.

1.3.1 Lois d'équilibre local

Notons p_g la pression d'une bulle, et p_{ext} la pression extérieure à cette bulle, que nous appellerons également pression du liquide. Nous établissons ici les lois d'équilibre local régissant la structure d'une mousse liquide (Figure 1.12). Rappelons que cette mousse ne s'ordonne pas spontanément. Ainsi, la structure d'équilibre n'est pas celle qui minimise globalement son énergie, mais celle qui la minimise localement. Nous dériverons d'abord la loi de Laplace-Young qui donne, pour une bulle ayant une surpression $p_g - p_{ext}$, la forme de sa surface. Puis nous présenterons les lois de Plateau, lois géométriques régissant l'agencement des cellules.

1.3.1.1 Loi de Laplace-Young

Considérons un petit élément de surface $ABCD$, rectangulaire curviligne, d'aire S , séparant deux fluides non miscibles (Figure 1.13). La longueur et la largeur de ce rectangle sont respectivement notées x et y comme indiqué sur la Figure 1.13. Le

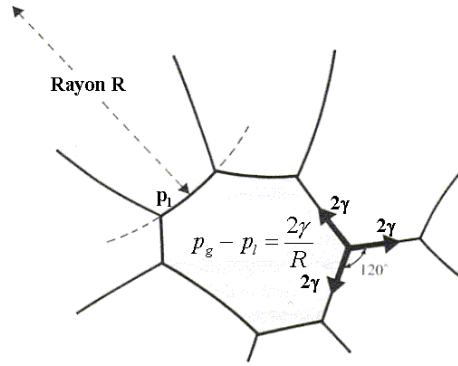


FIG. 1.12 – Représentation de la structure 2D d’une mousse à l’équilibre, d’après [68]. Les interfaces sont ici des arcs de cercle. La loi de Laplace-Young donne le rayon R en fonction de la différence $p_g - p_l$ entre pression du gaz et pression du liquide. La première loi de Plateau impose qu’uniquement trois bords se rencontrent avec des angles égaux de 120° .

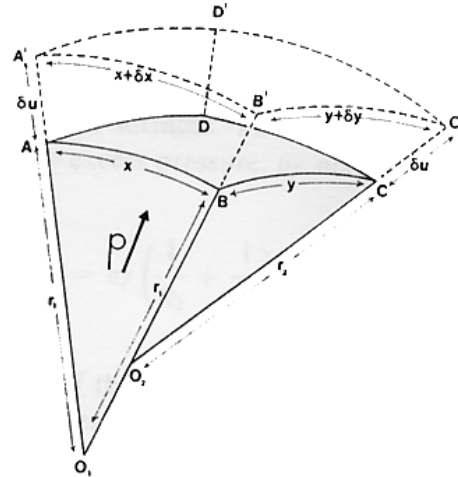


FIG. 1.13 – Dérivation de la loi de Laplace-Young. Deux milieux non miscibles sont séparés par une interface $ABCD$. Sous l’effet du déplacement normal δu provoqué par une surpression, $ABCD$ se transforme en $A'B'C'D'$.

rayon de courbure du côté x est r_1 , celui du côté y , r_2 , avec les centres de courbure O_1 et O_2 respectivement.

Supposons maintenant que, sous l’effet de l’excès de pression $p = p_g - p_{ext}$, l’élément de surface $ABCD$ subisse un déplacement δu normal à la surface. Sa nouvelle position est $A'B'C'D'$ comme spécifié sur la figure 1.13, avec des côtés devenant $x + \delta x$, $y + \delta y$, et des rayons de courbure $r_1 + \delta u$, $r_2 + \delta u$.

Le travail δW dû à l’excès de pression p , au cours du déplacement δu est défini par :

$$\delta W = pS\delta u \tag{1.19}$$

D’autre part, dans le cas isotherme, le travail nécessaire à une variation δS de l’interface est proportionnel au nombre de molécules migrant vers cette interface, *i.e.*

est proportionnel à δS [37], d'où :

$$\delta W = \gamma \delta S \quad (1.20)$$

La constante de proportionnalité γ a les dimensions d'une tension (force par unité de longueur) et est appelée *tension superficielle*. Elle dépend des deux fluides en présence. Nous pouvons développer l'Équation (1.20) en termes de x et de y :

$$\delta W = \gamma[(x + \delta x)(y + \delta y) - xy] \quad (1.21)$$

Le déplacement δu étant homogène, nous avons par le théorème de Thalès dans les triangles O_1AB et $O_1A'B'$:

$$\frac{x + \delta x}{r_1 + \delta u} = \frac{x}{r_1} \quad (1.22)$$

Ainsi nous obtenons :

$$x + \delta x = x\left(1 + \frac{\delta u}{r_1}\right) \quad (1.23)$$

Le même argument appliqué aux triangles O_2BC et $O_2B'C'$ donne :

$$y + \delta y = y\left(1 + \frac{\delta u}{r_2}\right) \quad (1.24)$$

En tenant compte de (1.23) et (1.24), l'Équation (1.20) devient :

$$\begin{aligned} \delta W &= \gamma[xy\left(1 + \frac{\delta u}{r_1}\right)\left(1 + \frac{\delta u}{r_2}\right) - xy] \\ &= \gamma xy \delta u \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + O(\delta u^2) \\ &= \gamma S \delta u \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + O(\delta u^2) \end{aligned} \quad (1.25)$$

Pour des petits déplacement δu , le terme en $O(\delta u^2)$ peut être négligé. En égalant les expressions (1.20) et (1.25) nous avons :

$$pS\delta u = \gamma S \delta u \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \quad (1.26)$$

D'où :

$$p = p_g - p_{ext} = \gamma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \quad (1.27)$$

La relation (1.27) est valide pour tout système orthogonal de coordonnées curvilignes associé à la surface d'interface. En particulier, pour un point quelconque de la surface,

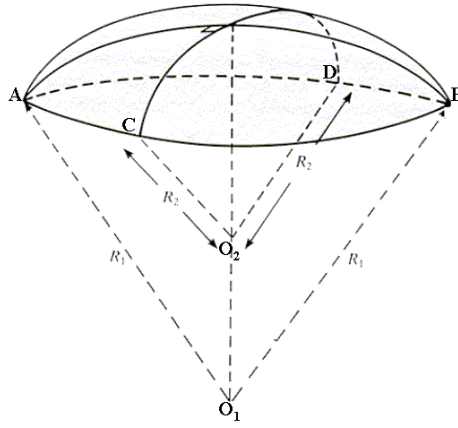


FIG. 1.14 – Représentation des rayons de courbures principales. $1/R_1$, courbure minimale, et $1/R_2$, courbure maximale.

nous opérons le choix de la base orthonormée dans le plan tangent correspondant aux courbures principales (minimales et maximales) $1/R_1$ et $1/R_2$ (Figure 1.14). Nous obtenons alors l'équation de Laplace-Young :

$$p = p_g - p_{ext} = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (1.28)$$

Les rayons de courbure R_1 et R_2 peuvent être positifs ou négatifs. Plus précisément, un rayon sera positif si la surface est convexe dans la direction du gradient de pression, et négatif si la surface est concave dans cette direction. L'Equation (1.28) détermine la forme de l'interface entre deux fluides (ici le polymère et le gaz), en supposant connu l'excès de pression en tout point de celle-ci. Il est également possible de dériver cette relation à partir d'arguments thermodynamiques [53]. Il apparaît alors que l'Équation (1.28) fournit la configuration de la bulle minimisant l'énergie libre de Helmholtz et donc sa surface pour un excès de pression $p_g - p_{ext}$. Remarquons d'ailleurs que si cette différence de pression est nulle, alors l'équation de Laplace-Young se réduit à :

$$\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = 0 \quad (1.29)$$

Il est alors possible de montrer [37] que l'Equation (1.29) correspond à un critère de surface minimale.

Dans une mousse, la pression est supposée constante dans chaque bulle. De même, la pression p_{ext} de la matrice liquide est supposée constante [68]. Si nous appliquons la loi de Laplace - Young (1.28) à chaque surface du film mince séparant deux bulles, alors la pression à l'intérieur de ce film est trouvée comme étant la moyenne de celle de ces deux bulles. D'où une contradiction avec le fait que p_{ext} est constante. Afin de lever cette contradiction, il est admis [68] que des forces de répulsion, d'origine diverse (stérique, électrostatique, etc.) maintiennent les deux surfaces du film à une

certaine distance, évitant son effondrement. Ces forces de répulsion par unité de surface sont représentées par une pression devant être incluse dans la condition d'équilibre. Cette pression est appelée *pression de disjonction*. La reconnaissance de son existence lève le paradoxe précédemment soulevé.

1.3.1.2 Lois de Plateau

Suite à ses observations sur les bulles de savons, J. Plateau proposa en 1873 plusieurs règles géométriques, qui, adjointes à la loi de Laplace-Young, déterminent dans la plupart des cas une configuration d'équilibre de mousse. Ces règles s'appliquent dans le cas limite d'une mousse sèche (la fraction volumique liquide tend vers zéro) et peuvent, dans ce cadre là, être établies mathématiquement comme une conséquence de minimisation des interfaces [37]. Cependant leur application est étendue à des mousses réelles dont la fraction liquide est non nulle mais reste petite.

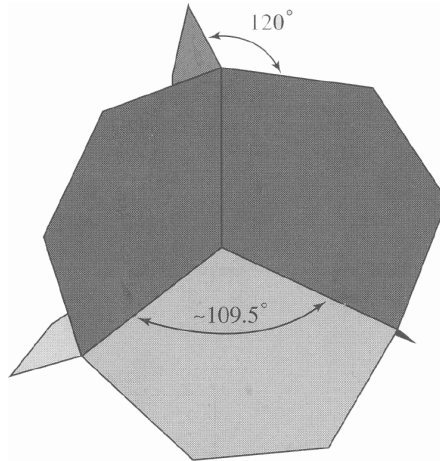
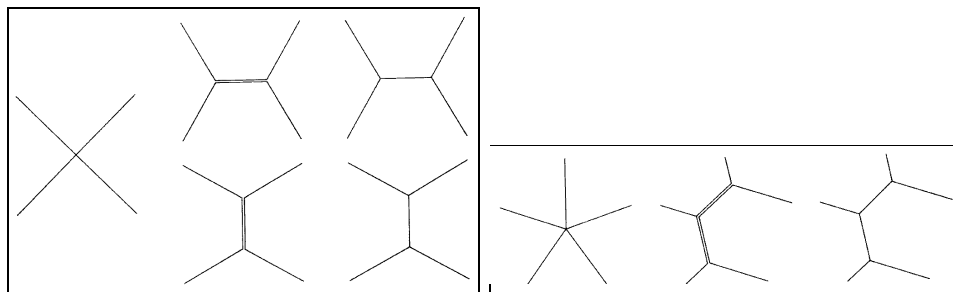


FIG. 1.15 – Les deux lois de Plateau. Dans une mousse à l'équilibre, uniquement trois films peuvent se rencontrer. Ils forment des angles égaux de 120° . De plus, quatre bords Plateau se rencontrent à angles de 109° formant un sommet.

Règle d'équilibre R1. Dans une mousse sèche, les films formant les surfaces des parois cellulaires, se rencontrent uniquement par trois, formant des angles de 120° .

Cette loi est illustrée en $3D$ sur la Figure 1.15. Remarquons qu'en $2D$, cette loi s'applique aux lignes formant les frontières de chaque cellule (Figure 1.12). Deux aspects sont à distinguer dans cette première règle. D'abord, le fait que les films ne se rencontrent que par trois. Cela résulte de la minimisation de l'énergie surfacique, et donc de la surface, dans une configuration d'équilibre. Il est d'ailleurs possible de montrer facilement en $2D$ [68] par un critère de minimisation de longueur, que l'intersection de plus de trois lignes n'est pas stable et donne lieu à des changements topologiques locaux rendant la structure compatible avec la règle *R1*, comme indiquée sur la Figure 1.16. Le deuxième aspect est la symétrie de cette intersection (angle de 120°), qui résulte simplement de l'équilibre des forces de tension superficielle s'exerçant sur les interfaces.



(a) Deux changements topologiques (haut et bas) peuvent découler d'une configuration instable à quatre films

(b) Changement topologique provoqué par une configuration instable à cinq films

FIG. 1.16 – Application de la première règle de Plateau en deux dimensions : Uniquement trois films se rencontrent, et à angles égaux de 120° . Les autres configurations sont instables et donnent lieu à des changements topologiques.

Règle d'équilibre R2. Dans une mousse sèche, pas plus de quatre lignes d'intersection (ou six surfaces) ne se rencontrent en un sommet, avec un angle de $109^\circ 28'$.

Cette règle est également illustrée sur la Figure 1.15. Sa preuve mathématique a été établie en tout généralité uniquement en 1976, grâce à la théorie des surfaces minimales appliquée à des bulles de gaz de différentes pressions régies par la loi de Laplace-Young [2].

Nous venons de donner trois lois suffisant à caractériser, dans la plupart des cas, la structure d'une mousse en équilibre dont la fraction liquide est inférieure à 1%. Pour une fraction liquide plus élevée, il n'existe pas de règle analogue à celles de Plateau. Nous allons à présent caractériser la mousse d'un point de vue rhéologique.

1.3.2 Comportement d'une mousse

Soumise à de faibles déformations, une mousse dont la structure est formée se comporte comme un solide. Il est alors possible d'affecter à la mousse un module élastique de cisaillement, comme à n'importe quel solide isotrope. Lorsque la déformation augmente, des changements topologiques irréversibles interviennent, et la mousse passe par un état plastique. Enfin, au-delà d'une contrainte dite contrainte seuil, la mousse s'écoule. Le passage d'un régime à l'autre dépend de la taille de bulle, ainsi, et de manière forte, que de la fraction liquide présente dans la mousse. Ces propriétés sont résumées sur les Figures 1.17 et 1.18, extraites de Weaire *et al.* [68].

1.3.2.1 Régime élastique

Ce régime correspond à un faible taux de déformation : les cellules ne subissent que peu de déformation, et la mousse se comporte en solide élastique. Son module

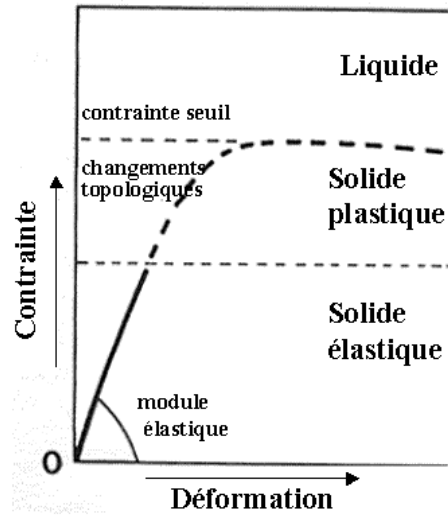


FIG. 1.17 – Courbe contrainte - déformation caractérisant le comportement d'une mousse liquide.

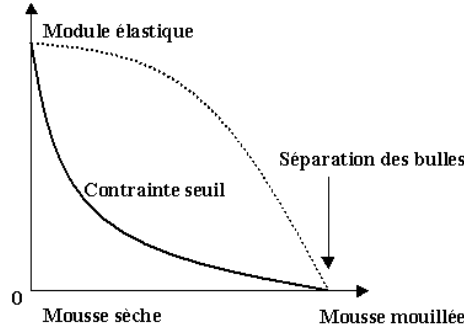


FIG. 1.18 – La contrainte seuil et le module élastique dépendent fortement de la fraction liquide.

de cisaillement μ est une propriété de surface, car entièrement due à la tension superficielle γ s'exerçant à l'interface liquide - gaz (voir paragraphe 1.3.1.1). Ce module élastique est donc petit, de l'ordre de $10 Pa$ pour une mousse produite par un détergent, à comparer aux $8 \times 10^{10} Pa$ d'un acier. La principale contribution au module de compressibilité est celle de la pression du gaz, de l'ordre de $10^5 Pa$. Le module de compressibilité est donc bien plus grand que celui de cisaillement. Dans de nombreuses études on le suppose infini, *i.e.* on suppose le gaz incompressible.

Dans le cas où la fraction liquide tend vers zéro (limite sèche), le module de cisaillement s'exprime, en $2D$ et en $3D$ comme suit :

$$\mu = \frac{c\gamma}{\bar{d}} \quad (1.30)$$

où \bar{d} est le diamètre moyen de la bulle, et c un paramètre adimensionnel dépendant de la structure. Selon [68] cette dépendance n'est pas forte, et l'étude d'une mousse structurée (en nid d'abeille) donne une bonne indication de ce paramètre.

1.3.2.2 Régime plastique - régime d'écoulement

Comme pour une mousse polymère, à faible taux de déformation, des réorganisations topologiques s'opèrent dans la structure de mousse, relâchant ainsi la contrainte. C'est le régime plastique.

Au-delà d'une contrainte seuil σ_y la mousse s'écoule comme un fluide visqueux, avec une viscosité effective donnée par la loi (1.7) décrite dans le cadre des mousses polymère.

1.3.3 Simulation numérique d'une mousse de savon

Pour conclure ce chapitre, nous exposons comment l'application des lois d'équilibre local décrites ci-dessus permet de construire un programme simulant l'évolution d'une structure de mousse.

1.3.3.1 Simulation de microstructure par minimisation locale de l'énergie

Nous nous intéressons ici à la simulation de l'évolution d'une structure de mousse donnée, en tenant compte de la loi de Laplace, des règles de Plateau, et des changements topologiques pouvant intervenir. Les propriétés rhéologiques ou thermiques des composants de la mousse ne sont pas prises en compte. Deux cas sont alors à distinguer : la limite sèche, où les bords Plateau se réduisent à un arc de cercle, et la limite dite mouillée [36], où la forme, l'épaisseur et la pression des bords Plateau interviennent. Nous nous plaçons d'abord dans le cas où la fraction liquide est quasi nulle. L'algorithme décrivant le cas mouillé en sera une conséquence [36]. De plus, les algorithmes que nous allons présenter se prêtent particulièrement bien au 2D, où la description des interfaces est simple. Ils peuvent être étendus au 3D, bien que dans ce cas, d'autres approches sont également envisagées [16], [49], [17], [24], [67].

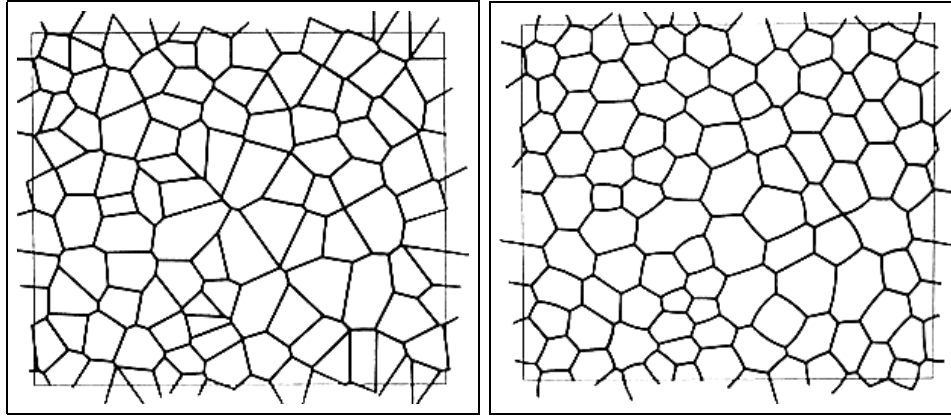
Algorithme pour la limite sèche

La première étape consiste à créer une structure de mousse initiale. C'est cette structure dont on cherche par la suite à déterminer l'état d'équilibre. Pour ce faire, un diagramme de Voronoï est utilisé [68]. Un tel diagramme fournit une partition $\bigcup_{i=1}^n C_i$ d'un plan (\mathcal{P}), définie à partir d'un ensemble de n points $g_i \in (\mathcal{P})$ par :

$$C_i = \{x \in (\mathcal{P}) ; d(x, g_i) \leq d(x, g_j), \forall j \neq i\} \quad (1.31)$$

où $d(x, y)$ est la distance du point x au point y . La figure 1.19 montre une structure construite par un diagramme de Voronoï. Des conditions de périodicité sont imposées aux bords de la structure afin d'éliminer tout effet de bord.

Chaque bulle (ou cellule) se caractérise par son aire et sa pression (A_i, p_i). Le gaz est supposé incompressible : il n'y a pas d'expansion des bulles, A_i et p_i ne changent que par réorganisation topologique locale, ou par disproportionnement. Ainsi, les variables devant être ajustées lors du calcul de la configuration d'équilibre sont :



(a) Structure initiale fournie par le diagramme de Voronoï.

(b) Structure à l'équilibre.

FIG. 1.19 – Exemple de simulation 2D de mousse non structurée, issu de [68]

- La pression p_i de chaque bulle, par la loi de Laplace :

$$p_i - p_j = 2\frac{\gamma}{r_{ij}}$$

où r_{ij} est le rayon de courbure de l'interface séparant les bulles i et j

- Les coordonnées de chaque sommet de la structure

Ces variables, pression et position des sommets, sont à ajuster en respectant les conditions suivantes :

- L'aire de chaque cellule doit être égale à une aire "cible" donnée.
- La règle R1 de Plateau (voir Figure 1.15) doit être respectée : les bords Plateau se rencontrent seulement par trois, à angle de 120° .

L'algorithme proposé dans [68] est local. On considère un point de coordonnées (x, y) , sommet de trois cellules (voir Figure 1.20). Les restrictions énoncées ci-dessus sont alors successivement appliquées à ce sommet, ainsi qu'à chaque sommet définissant la structure de mousse. Ce processus est répété de façon itérative jusqu'à convergence de la structure. Remarquons qu'aucune preuve de convergence de cette algorithme n'existe. Il semble néanmoins robuste pour les applications demandées [35]. Concrètement, en considérant les aires A_i et les angles ϕ_i de la Figure 1.20 comme fonctions de (p_1, p_2, p_3, x, y) , et par développement au second ordre, nous trouvons le système suivant à résoudre, pour chaque noeud :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial A_1}{\partial p_1} & \frac{\partial A_1}{\partial p_2} & \frac{\partial A_1}{\partial p_3} & \frac{\partial A_1}{\partial x} & \frac{\partial A_1}{\partial y} \\ \frac{\partial A_2}{\partial p_1} & \frac{\partial A_2}{\partial p_2} & \frac{\partial A_2}{\partial p_3} & \frac{\partial A_2}{\partial x} & \frac{\partial A_2}{\partial y} \\ \frac{\partial A_3}{\partial p_1} & \frac{\partial A_3}{\partial p_2} & \frac{\partial A_3}{\partial p_3} & \frac{\partial A_3}{\partial x} & \frac{\partial A_3}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_1}{\partial p_1} & \frac{\partial \phi_1}{\partial p_2} & \frac{\partial \phi_1}{\partial p_3} & \frac{\partial \phi_1}{\partial x} & \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial p_1} & \frac{\partial \phi_2}{\partial p_2} & \frac{\partial \phi_2}{\partial p_3} & \frac{\partial \phi_2}{\partial x} & \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta p_1 \\ \Delta p_2 \\ \Delta p_3 \\ \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta A_1 \\ \Delta A_2 \\ \Delta A_3 \\ \phi_1 - 120 \\ \phi_2 - 120 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

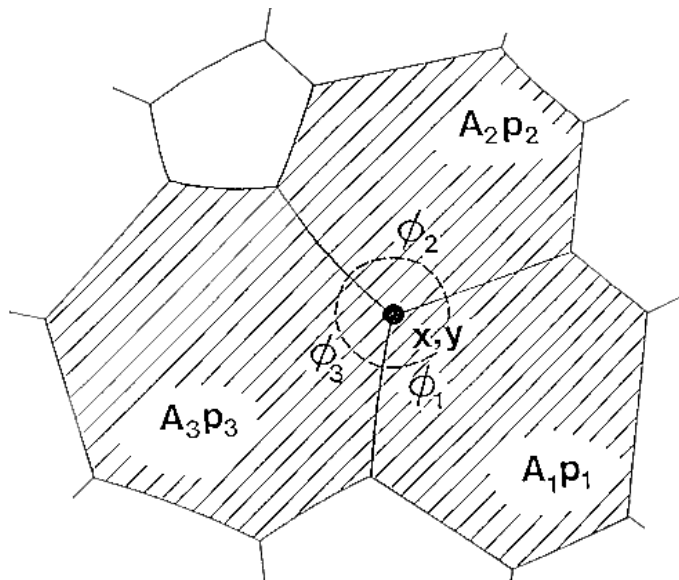


FIG. 1.20 – Paramètres mis en jeu dans un itération de l’algorithme proposé dans [68].

Les ΔA_i du second membre de 1.32 sont la différence entre l’aire actuelle de la $i^{\text{ème}}$ cellule et son aire cible. L’effet de disproportionnement peut être pris en compte dans ce second membre [68]. Enfin, sur la structure obtenue, les changements topologiques décrits par la Figure (1.16) doivent être repérés et traités.

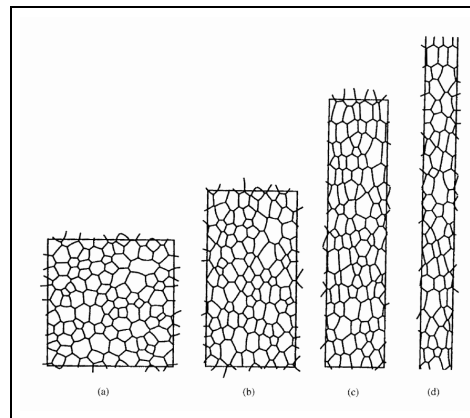
Extension de l’algorithme à une fraction liquide non nulle

La méthode proposée par [68] pour le cas mouillé est globalement la même que dans le cas précédent. La mousse est d’abord générée par un diagramme de Voronoï, avec une étape supplémentaire qui est la création des bords Plateau. La pression p_{ext} des bords Plateau intervient dans les équations d’équilibre. Le rayon de courbure des parois des cellules peut alors être calculé grâce à la loi de Laplace, avec une distinction entre la différence de pression entre deux cellules et la différence de pression entre une cellule et un bord Plateau.

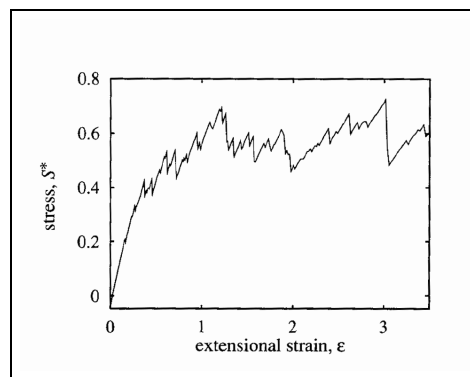
1.3.3.2 Application

L’approche micromécanique présentée ci-dessus a été, rappelons le, développée pour les mousses de détergent. Outre le fait qu’elle permet l’étude de l’évolution d’une mousse, elle peut également fournir des renseignements sur sa rhéologie, comme le montre la courbe contrainte - déformation de la Figure 1.21, extraite de [68] et [35]. Cette courbe est obtenue en imposant, dans l’algorithme précédent, le déplacement suivant sur chaque sommet (x, y) de la mousse :

$$\vec{u}(x, y) = \begin{pmatrix} \varepsilon x \\ \frac{-\varepsilon}{1+\varepsilon} y \end{pmatrix} \quad (1.33)$$



(a) Simulation d'un essai d'élongation de mousse.



(b) Courbe contrainte - déformation.

FIG. 1.21 – Simulation d'un essai d'élongation de structure de mousse, extraite de [68]

1.4 Conclusion

Le sujet de ce document est le développement d'une méthode numérique permettant de simuler l'expansion d'une mousse polymère. Une revue de la littérature existante nous a montré deux approches : une approche "micro", qui consiste à simuler l'évolution locale de la structure, sans référence au procédé de fabrication ; une approche "macro" qui considère la mousse dans son ensemble, tient compte du procédé de fabrication, et permet d'obtenir une description de la structure dans toute la mousse, via des paramètres morphologiques.

Dans l'approche macroscopique, la mousse est considérée comme un fluide homogène. L'influence de sa structure est traduite, au niveau macroscopique, en exprimant ses paramètres matériau (densité, viscosité, conductivité thermique) en fonction des paramètres morphologiques décrivant cette structure (taille des bulles, forme des bulles, etc.). Cela se fait en utilisant des modèles micro-mécaniques. Ces modèles

reposent généralement sur des hypothèses restrictives, comme une fraction liquide négligeable, qui ne sont guère adéquates avec la simulation de la phase d'expansion.

Les simulations à l'échelle de la structure permettent de lier directement l'évolution des propriétés d'une mousse à celle de sa structure. Ainsi, pour les mousses de type savon, des simulations de cisaillement de structure renseignent sur la rhéologie de la mousse. Pour les mousses polymère, les modèles cellulaires fournissent l'évolution de la taille d'une cellule, et donc l'évolution de la densité de la mousse. Cependant, les simulations à l'échelle de la structure rencontrées dans la littérature sont basées sur des outils numériques "simples", qui nécessitent également un certain nombre d'hypothèses restrictives. Ainsi, les modèles cellulaires considèrent l'évolution d'une seule bulle sphérique, et ne rendent donc pas réellement compte de l'évolution d'une structure : la forme de la cellule reste sphérique au cours de l'expansion, alors que le taux de gaz passe de quelques pourcent à plus de 80% du volume total.

Nous nous proposons, dans la suite de ce document, de développer une méthode originale d'étude de la formation d'une structure de mousse. Cette méthode est basée sur la simulation d'un ensemble de bulles évoluant dans une matrice polymère. L'utilisation d'une technique éléments finis permet de traiter réellement l'interaction polymère - bulles et bulles - bulles.

L'objectif d'une telle approche est de fournir une description au moins locale de la structure d'une mousse polymère en expansion.

Chapitre 2

Expansion d'une bulle de gaz dans une matrice polymère

2.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est d'étudier l'expansion d'une bulle de gaz entourée d'une certaine quantité de polymère (voir Figure 2.1). Les données du problème sont :

1. Des données internes au modèle :
 - pression initiale p_g^0 du gaz ;
 - rayon initial R_g^0 de la bulle de gaz ;
 - La rhéologie du polymère.
2. Une donnée externe au modèle : la contrainte $\sigma \mathbf{n} = -p_{ext} \mathbf{n}$ exercée par le milieu extérieure sur la cellule considérée.

La bulle croît alors par différence entre sa pression interne p_g et la contrainte externe p_{ext} .

Nous considérerons d'abord le cas isotherme. La première partie de ce chapitre est consacrée à la modélisation et à la mise en équations du problème. Le point important est le couplage entre le liquide et le gaz qui suit une loi des gaz parfaits. Les méthodes numériques mises en oeuvre pour discrétiser ces équations seront ensuite exposées. En particulier, il est nécessaire de résoudre une équation de transport afin de suivre l'évolution de la bulle de gaz. Pour cela, une méthode originale espace-temps Galerkin discontinu est présentée et étudiée.

Un modèle analytique décrivant l'expansion d'une bulle sera proposé. Ce modèle nous permettra d'évaluer l'exactitude de nos simulation.

Finalement, le couplage thermo-mécanique sera effectué, et différentes simulations d'expansion anisotherme de bulle proposées.

2.2 Construction du modèle physique

Considérons un milieu biphase formé d'une bulle de gaz et d'un fluide polymère. L'hypothèse suivante est faite :

Hypothèse 2.1 *Le gaz et le polymère fondu sont deux fluides non miscibles.*

Nous ne considérons donc pas de gaz dissout dans le liquide, et nous n'utiliserons pas de lois de type Henry (1.2) ou Fick (1.5). Le seul moteur de l'expansion des bulles est la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de ces bulles.

Nous nous donnons un volume de calcul Ω , contenant une matrice polymère Ω_l et une bulle de gaz Ω_g , dont les positions sont supposées connues à chaque instant $t \in [0, \Theta]$ (Figure 2.1) :

$$\Omega = \Omega_l(t) \cup \Omega_g(t) \quad (2.1)$$

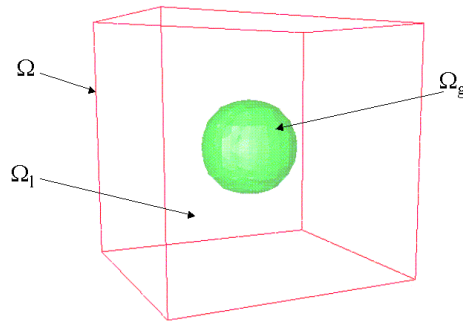


FIG. 2.1 – Le domaine de calcul Ω , la matrice liquide Ω_l , la bulle de gaz Ω_g

Hypothèse 2.2 *La bulle de gaz suit la loi des gaz parfaits.*

L'hypothèse 2.2 implique que les variables thermodynamiques associées à une bulle Ω_g sont définies uniquement en moyenne sur Ω_g . Ainsi, le volume $|\Omega_g|$, la pression partielle p_g de Ω_g sont reliés par la loi d'état scalaire des gaz parfaits :

$$\boxed{p_g |\Omega_g| = p_g^0 |\Omega_g^0| = \text{constante}} \quad (2.2)$$

Cette loi ne permet donc pas de calculer une vitesse dans le gaz. Il s'agit d'un modèle que l'on qualifiera de quasi-statique.

La phase liquide doit satisfaire, classiquement, les lois de conservation suivantes :

- Conservation de la masse,
- Conservation de la quantité de mouvement.

Nous allons écrire ces lois de conservation en termes de champs de vitesse \mathbf{v} et de pression p définis sur Ω_l . La pression du gaz p_g est vue comme condition aux bords du domaine liquide. Le système d'équations ainsi construit décrira l'écoulement d'un liquide dû aux contraintes exercées par une bulle de gaz, elles-mêmes régies par la loi des gaz parfaits.

2.2.1 Conservation de la masse

Le principe fondamental de la mécanique classique postule que *la masse d'un système matériel que l'on suit dans son mouvement reste constante* [26]. Ce principe s'exprime par l'équation dite de continuité, qui appliquée à notre cas, s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho_l \mathbf{v}] = 0 \quad \forall (x, t) \in \Omega_l(t) \times [0, \Theta] \quad (2.3)$$

où ρ_l est la masse volumique du polymère. Nous faisons alors l'hypothèse d'incompressibilité du polymère :

Hypothèse 2.3 *Le domaine liquide Ω_l (le polymère fondu) est incompressible : sa masse volumique ρ_l est constante en temps et en espace.*

Cette hypothèse se justifie dans la mesure où le polymère fondu n'est pas soumis à de fortes pressions [28], et où l'on ne modélise pas le refroidissement de la mousse. La prise en compte de cette dernière étape nécessiterait d'exprimer la thermo-dépendance de la masse volumique du polymère. Ce travail a été effectué par [60] pour la simulation d'un cycle complet d'injection - compactage, et pourrait compléter notre modélisation de la phase d'expansion de mousse polymère. Néanmoins, afin de ne pas cumuler les difficultés, nous nous limitons à l'hypothèse d'incompressibilité 2.3, laquelle nous permet de simplifier l'équation de continuité (2.3) en :

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \forall x \in \Omega_l(t), \quad \forall t \in [0, \Theta]} \quad (2.4)$$

2.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

Cette loi de conservation, appelée également loi fondamentale de la dynamique s'énonce ainsi [26] : *Il existe une chronologie (dite galiléenne) et un repère (dit galiléen) tels que pour cette chronologie et dans ce repère, pour tout système matériel, la dérivée par rapport au temps du torseur des quantités de mouvement est égale au torseur des forces extérieures appliquées au système.* Cet énoncé, appliqué à la résultante du torseur des quantités de mouvement, se traduit en mécanique des milieux continus par l'équation du mouvement :

$$\rho_l \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho_l f \quad \forall (x, t) \in \Omega_l(t) \times [0, \Theta] \quad (2.5)$$

où $\rho_l f$ est la densité des forces massiques extérieures agissant sur le système. Nous faisons à présent l'hypothèse suivante :

Hypothèse 2.4 *Compte-tenu de la forte viscosité d'un polymère fondu (de l'ordre de 1000 Pa.s) et des contraintes dues à la pression du gaz, l'inertie et les forces de masse sont négligées.*

L'hypothèse 2.4 permet simplifier l'Equation (2.5) en l'équation d'équilibre :

$$\boxed{\nabla \cdot \sigma = 0 \quad \forall x \in \Omega_l(t), \quad \forall t \in [0, \Theta]} \quad (2.6)$$

Nous adjoignons à présent les conditions aux bords adéquates à l'équation (2.6), avant d'expliciter la loi de comportement du polymère.

2.2.2.1 Conditions aux bords

Les conditions en contrainte sur $\partial\Omega_l$ effectuent, d'une part le couplage liquide - gaz, et assurent d'autre part le couplage micro-macro en exprimant la contrainte exercée par le milieu extérieur sur le volume de calcul.

Hypothèse 2.5 *Au cours de son expansion, la totalité de la bulle de gaz reste dans le domaine de calcul Ω .*

Ainsi :

$$\partial\Omega \cap \Omega_g = \emptyset \quad (2.7)$$

Ceci signifie que nous ne gérons pas la sortie des bulles. Nous en verrons les conséquences au chapitre 3, avec notamment l'apparition d'effets de bord que l'on doit contrôler. Cela étant, l'hypothèse 2.5 permet de décomposer $\partial\Omega_l$ comme suit :

$$\partial\Omega_l = \partial\Omega \cup \partial\Omega_g \quad (2.8)$$

Sur le bord $\partial\Omega$, nous posons :

$$\boxed{\sigma \mathbf{n} = -p_{ext} \mathbf{n} \quad \forall x \in \partial\Omega} \quad (2.9)$$

où p_{ext} est une pression extérieure donnée.

D'après la loi de Laplace-Young introduite au paragraphe 1.3.1.1, la condition sur le bord $\partial\Omega_g$ s'écrit [3] :

$$\sigma \mathbf{n} = -p_g \mathbf{n} + \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \mathbf{n} \quad \forall x \in \partial\Omega_g \quad (2.10)$$

où γ la tension superficielle, et R_1 et R_2 les rayons principaux de courbure au point considéré. Nous faisons l'hypothèse suivante :

Hypothèse 2.6 *La contribution du terme de tension superficielle est négligeable devant celle de la pression motrice lors de l'expansion d'une mousse polymère.*

Cette hypothèse est justifiée par les ordres de grandeur des termes mis en jeu. En nous basant sur [42], nous définissons le nombre capillaire $Ca = \eta U / \gamma$, où U est une vitesse caractéristique, égale au rayon R_g de la bulle multiplié par le taux de cisaillement. Ce nombre adimensionnel évalue le rapport entre les forces de viscosité, qui tendent à déformer la bulle, et la tension superficielle qui tend à la maintenir sphérique. En nous basant sur le modèle cellulaire de [3] (voir aussi le paragraphe 2.6.1), la vitesse U est, à une constante près, égale à la vitesse d'expansion \dot{R}_g . Toujours dans le cadre du modèle cellulaire, l'Equation (1.9) se simplifie en $\dot{R}_g = [(p_g - p_{ext})R_g - 2\gamma] / 4\eta$ si l'on considère un volume de polymère infini ($V \gg |\Omega_g|$) et une masse volumique du polymère constante).

Il en résulte que $Ca = \sqrt{3}[(p_g - p_{ext})R_g - 2\gamma] / 2\gamma$. Les effets de la tension superficielle peuvent donc être négligés si : $p_g - p_{ext} \gg \gamma / R_g$. Remarquons que cette hypothèse est discutable juste après la germination où le rayon R_g d'une micro-bulle est petit ; de même, en fin d'expansion, la tension superficielle n'est plus forcément négligeable puisque $p_g - p_{ext}$ est petit. Néanmoins, entre ces deux extrêmes, au cours de la phase d'expansion, les études de la littérature [3], [31] montrent que cette hypothèse est vérifiée.

Il s'en suit que nous réécrivons la condition aux bords (2.10) en :

$$\boxed{\sigma \mathbf{n} = -p_g \mathbf{n} \quad \forall x \in \partial\Omega_g} \quad (2.11)$$

Remarquons, pour conclure, le résultat suivant portant sur la valeur moyenne de σ dans Ω_l :

Proposition 2.1 *Si σ vérifie les conditions (2.9) et (2.11) et est à divergence nulle, alors on a :*

$$\frac{1}{|\Omega_l|} \int_{\Omega_l} \sigma = \frac{I}{|\Omega_l|} (p_g - p_{ext}) |\Omega_g| - p_{ext} I \quad (2.12)$$

où I est le tenseur identité.

Preuve : Nous utilisons la convention des indices répétés d'Einstein. Ainsi,

$$Div \sigma = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, d \quad (2.13)$$

Par le théorème de Green, l'Equation (2.13) implique :

$$0 = \int_{\Omega_l} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} x_k = \int_{\partial\Omega_l} \sigma_{ij} n_j x_k - \int_{\Omega_l} \sigma_{ij} \frac{dx_k}{dx_j} \quad \forall i = 1, \dots, d \quad \forall k = 1, \dots, d \quad (2.14)$$

En utilisant les conditions (2.9) et (2.11) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_l} \sigma_{ij} n_j x_k &= -p_{ext} \int_{\partial\Omega} I_{ij} n_j x_k + p_g \int_{\partial\Omega_g} I_{ij} n_j x_k \\ &= -p_{ext} \int_{\partial\Omega} n_i x_k + p_g \int_{\partial\Omega_g} n_i x_k \end{aligned} \quad (2.15)$$

où la normale \mathbf{n} est prise extérieure au domaine sur lequel on intègre, d'où le signe "+" devant p_g . En appliquant le théorème de la divergence, l'Equation (2.15) devient :

$$\int_{\partial\Omega_l} \sigma_{ij} n_j x_k = -p_{ext} \int_{\Omega} \frac{dx_k}{dx_i} + p_g \int_{\Omega_g} \frac{dx_k}{dx_i} \quad (2.16)$$

En injectant (2.16) dans (2.14) nous avons :

$$\int_{\Omega_l} \sigma_{ij} \frac{dx_k}{dx_j} = -p_{ext} \int_{\Omega} \frac{dx_k}{dx_i} + p_g \int_{\Omega_g} \frac{dx_k}{dx_i} \quad (2.17)$$

Sachant que $\frac{dx_l}{dx_j} = \delta_{lj}$, symbole de Kronecker qui est 1 si $j = l$ et 0 sinon, la relation (2.17) équivaut à :

$$\int_{\Omega_l} \sigma_{ik} = (p_g |\Omega_g| - p_{ext} |\Omega|) \delta_{ik} \quad \forall i = 1, \dots, d \quad \forall k = 1, \dots, d \quad (2.18)$$

Ce qui équivaut à :

$$\frac{1}{|\Omega_l|} \int_{\Omega_l} \sigma_{ik} = \frac{|\Omega_g|}{|\Omega_l|} (p_g - p_{ext}) \delta_{ik} - p_{ext} \delta_{ik} \quad \forall i = 1, \dots, d \quad \forall k = 1, \dots, d \quad (2.19)$$

qui est la version indicelle du résultat énoncé.

2.2.2.2 Lois de comportement du polymère

Hypothèse 2.7 *Le comportement du liquide de Ω_l est un comportement pseudo-plastique.*

Sa loi de comportement s'écrit [1] :

$$\boxed{\sigma = 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v}) - pI} \quad (2.20)$$

$|\varepsilon(\mathbf{v})|$ est le taux de cisaillement généralisé, défini par :

$$|\varepsilon(\mathbf{v})| = \sqrt{2 \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}(\mathbf{v})^2} \quad (2.21)$$

Pour déterminer complètement la loi de comportement (2.20), il nous reste à exprimer η en fonction de $|\varepsilon(\mathbf{v})|$. Plusieurs lois semi-empiriques sont proposées dans la littérature [1]. Nous ne donnons ici que les 3 lois utilisées dans la suite du document.

Loi de Newton : C'est la loi la plus simple. Le fluide est considéré comme newtonien, et sa viscosité est donc égale à une constante, η_0 , également appelée consistance du fluide :

$$\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|) = \eta_0 \quad (2.22)$$

Loi puissance :

$$\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|) = \eta_0 |\varepsilon(\mathbf{v})|^{m-1} \quad (2.23)$$

où m est l'indice de pseudo-plasticité ($m = 1$ pour un fluide newtonien). Cette loi présente l'avantage d'être simple, et donc de se prêter aux calculs analytiques. Elle rend compte de la rhéo-fluidité du fluide à fort taux de cisaillement, mais diverge pour de faibles taux de cisaillement (voir figure 2.2).

Loi de Carreau :

$$\frac{\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|) - \eta_\infty}{\eta_0 - \eta_\infty} = (1 + \lambda^2 |\varepsilon(\mathbf{v})|^2)^{\frac{m-1}{2}} \quad (2.24)$$

où λ est un temps caractéristique. η_∞ représente la viscosité lorsque le taux de cisaillement tend vers l'infini, et est généralement pris à zéro. Cette loi permet de représenter à la fois le plateau newtonien à faible taux de cisaillement, et le caractère rhéo-fluidifiant du fluide à fort taux de cisaillement.

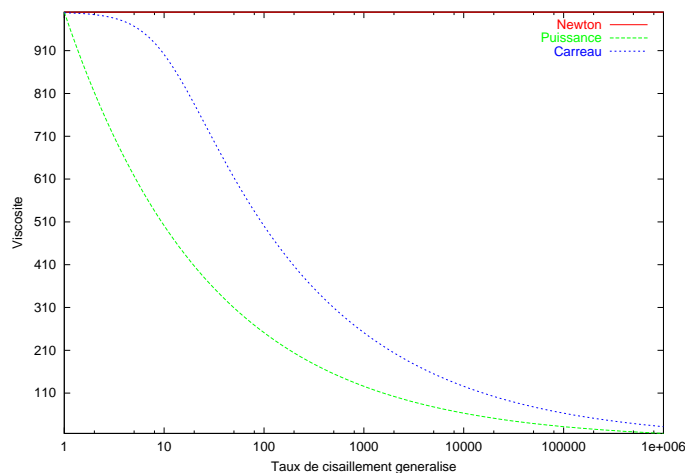


FIG. 2.2 – Lois de comportement visqueuses

2.2.3 Les équations mécaniques dans le liquide - Résumé

Nous venons de formuler les hypothèses nous menant à la construction d'un modèle d'expansion isotherme d'une bulle de gaz dans un liquide pseudo-plastique. Nous donnons maintenant les équations complètes de ce modèle, valides dans Ω_l , formulées en vitesse - pression.

Trouver la vitesse $\mathbf{v} \in \mathcal{C}^2(\Omega_l)$ et la pression $p \in \mathcal{C}^1(\Omega_l)$, telles que, $\forall t \in]0, \Theta[$, $\forall x \in \Omega_l(t)$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot [2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p & = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} & = 0 \\ \sigma \mathbf{n} & = -p_g \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega_g \\ \sigma \mathbf{n} & = -p_{ext} \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.25)$$

où p_g est la pression de la bulle, donnée par (2.2), et η est la viscosité du liquide, donnée par (2.24). Remarquons qu'il est possible, par un changement de variable, de se ramener dans (2.25) à une condition homogène sur $\partial\Omega$. Définissons en effet δp tel que :

$$p = \delta p + p_{ext} \quad (2.26)$$

Le système (2.25) devient alors :

$$\begin{cases} \nabla \cdot [2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla \delta p & = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} & = 0 \\ \sigma \mathbf{n} & = -(p_g - p_{ext}) \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega_g \\ \sigma \mathbf{n} & = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.27)$$

Ainsi, l'expansion de la bulle est due à la différence de pression $p_g - p_{ext}$. Lorsque cette différence est nulle, et en conditions isothermes, la solution de (2.27) est $p = p_{ext}$ et $\mathbf{v} = 0$.

2.3 Discrétisation du système en vitesse - pression

Dans le système (2.25), le couplage liquide gaz est assuré via la condition sur $\partial\Omega_g$: $\sigma \mathbf{n} = -p_g \mathbf{n}$, où p_g , la pression du gaz, est telle que $p_g|\Omega_g| = \text{constante}$. Il est donc nécessaire de connaître exactement le volume $|\Omega_g|$ de la bulle, et de savoir imposer une condition en contrainte sur l'interface $\partial\Omega_g$. De plus, la proposition B.1 de l'Annexe B relie directement l'expansion de la bulle à la vitesse d'interface. La bonne description de la vitesse d'interface est donc capitale.

Donnons nous un maillage sur Ω . La pertinence et la validité des méthodes numériques utilisées dans la discrétisation et la résolution du système (2.25) dépendent directement de leurs capacités à décrire correctement, à travers le maillage utilisé, les interfaces liquide - gaz. Il existe deux grandes catégories de techniques pour gérer les interfaces :

- Les techniques dites lagrangiennes qui consistent à déplacer les noeuds du maillage avec la vitesse de la matière. Le maillage suit donc l'interface de façon à représenter à chaque instant sa position de manière précise. Ceci permet d'imposer aisément des conditions sur cette interface. De plus, dans notre cas, seul le domaine liquide Ω_l aurait besoin d'être maillé. Néanmoins, en raison de l'expansion des bulles,

des remaillages seraient nécessaires afin, d'une part, de garder la précision sur les interfaces, et d'autre part d'éviter que le maillage ne dégénère. De plus, dans les simulations à plusieurs bulles, les contacts bulles - bulles seraient à gérer.

- Les techniques dites eulériennes qui consistent à travailler sur un maillage fixe. L'interface n'est alors pas suivie explicitement. Il est donc nécessaire d'introduire une méthode pour reconstituer l'emplacement de chaque domaine (ici le liquide et la ou les bulles). Ceci peut se faire au moyen de marqueurs, particules sans masse, se déplaçant avec la matière et indiquant la présence ou non de tel domaine dans les éléments du maillage (méthode MAC, Marker and Cell). Cependant, cette technique nécessite l'utilisation de beaucoup de particules, d'où un coût mémoire élevé. Une autre technique permettant de déterminer l'emplacement d'un domaine consiste à introduire la fonction caractéristique de ce domaine, solution d'une équation de transport (méthode VOF, Volume Of Fluid). La résolution numérique de cette équation entraîne une certaine diffusion sur la position des interfaces. Les méthodes eulériennes nécessitent de résoudre les équations du problème dans tout le domaine de calcul (et non plus uniquement dans la partie liquide, dans notre cas). De plus, la position des interfaces n'étant pas précisément déterminée, il est nécessaire de faire apparaître les conditions aux bords sur ces interfaces de façon naturelle dans la formulation du problème. En contre-partie, les méthodes eulériennes permettent de s'affranchir des défauts des méthodes lagrangiennes (perte de précision, remaillage) lors de grands déplacements ou de fortes déformations, ce qui est le cas dans les mousses, où la partie liquide passe, en cours de simulation, de 99% à 20% ou moins du volume total.

Nous adoptons une démarche eulérienne. Dans la suite, nous allons donc voir, d'une part comment définir implicitement la condition en contrainte sur $\partial\Omega_g$, et d'autre part comment suivre l'évolution de la bulle dans le domaine liquide.

2.3.1 Formulation variationnelle mixte en vitesse - pression du problème mécanique

2.3.1.1 Prolongement des champs vitesse et pression dans le gaz

Nous considérons une bulle de gaz Ω_g , de volume $|\Omega_g|$, obéissant à la loi des gaz parfaits (2.2). Ce modèle implique que la pression p_g de cette bulle est définie uniquement en moyenne sur Ω_g . Nous imposons au champ pression p d'être continu sur Ω et d'avoir la valeur constante p_g dans Ω_g . Ainsi, nous posons : $p \in \mathcal{C}^0(\Omega)$,

$$p = p_g \quad \text{dans } \Omega_g \tag{2.28}$$

L'approche adoptée (modèle quasi-statique) ne fournit pas de vitesse dans le gaz. Cependant, en dérivant par rapport au temps la loi des gaz parfait (2.2), nous obtenons :

$$\frac{dp_g}{dt} |\Omega_g| + p_g \frac{d|\Omega_g|}{dt} = 0 \tag{2.29}$$

Ce qui, par la proposition B.1 de l'Annexe B, équivaut à :

$$\frac{1}{p_g} \frac{dp_g}{dt} = -\frac{1}{|\Omega_g|} \int_{\partial\Omega_g} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (2.30)$$

Ainsi, l'évolution de p_g ne dépend que de la vitesse à l'interface gaz - polymère, ce qui montre que la vitesse du gaz n'a pas d'influence. Toutefois, il est nécessaire de prolonger la vitesse dans le gaz afin d'avoir un problème bien posé en vitesse - pression dans tout Ω . Ce prolongement ne doit pas perturber l'écoulement du liquide, *i.e.* ne doit pas modifier la vitesse à l'interface. Nous imposons ainsi au champ vitesse \mathbf{v} d'être continu sur Ω et de minimiser le tenseur des vitesses de déformation dans Ω_g . Nous posons : $\mathbf{v} \in \mathcal{C}^0(\Omega)^3$,

$$2\eta_g \nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p_g = 0 \quad \text{dans } \Omega_g \quad (2.31)$$

Le paramètre η_g est une constante, ayant les dimensions d'une viscosité, et est appelé viscosité du gaz. Nous montrerons qu'il doit être petit pour que le nouveau problème soit consistant avec le problème initial. Remarquons que $\nabla p_g = 0$ dans (2.31), étant donné que p_g est une constante. Néanmoins ce terme doit apparaître dans la formulation faible du problème pour qu'il y ait continuité de la contrainte à l'interface liquide - gaz.

L'Equation (2.31) peut également s'interpréter comme étant l'équation d'équilibre $\nabla \cdot \sigma_g = 0$ dans Ω_g , où le tenseur de Cauchy dans le gaz σ_g a été perturbé par un terme visqueux : $\sigma_g = 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}) - p_g I$.

Pour résumer, nous imposons aux champs vitesse et pression, définis dans Ω_l par le système (2.25) les propriétés suivantes :

$$\boxed{\begin{array}{l} \mathbf{v} \in \mathcal{C}^0(\Omega)^3 \cap \mathcal{C}^2(\Omega_g)^3, \quad p \in \mathcal{C}^0(\Omega) \\ \left\{ \begin{array}{ll} 2\eta_g \nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{v})] = \nabla p_g & \text{dans } \Omega_g \\ p = p_g & \text{dans } \Omega_g \end{array} \right. \end{array}} \quad (2.32)$$

2.3.1.2 Formulation variationnelle du problème mécanique

Nous introduisons l'espace fonctionnel $L^2(\Omega)$ des fonctions réelles, définies dans Ω , et à carré sommable dans Ω :

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} ; \int_{\Omega} v^2 dx < +\infty \right\} \quad (2.33)$$

Nous notons $\mathcal{C}_c^1(\Omega)$ l'ensemble des fonctions réelles, définies dans Ω , et à support compact dans Ω . Nous définissons alors l'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$ par :

$$\begin{aligned}
 H^1(\Omega) = \\
 \{v \in L^2(\Omega) ; \exists g_i \in L^2(\Omega) \text{ t.q. } \forall \phi \in C_c^1(\Omega), \int_{\Omega} v \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = - \int_{\Omega} \phi g_i, i = 1, \dots, d\}
 \end{aligned}
 \tag{2.34}$$

On montre [18] que pour $v \in H^1(\Omega)$, la fonction $g_i \in L^2(\Omega)$ introduite dans (2.34) est unique. On la note $\frac{\partial v}{\partial x_i}$. Si $v \in H^1(\Omega) \cap C^1(\Omega)$, alors $\frac{\partial v}{\partial x_i}$ correspond à la notion classique de dérivée.

Nous introduisons les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
 - \mathcal{V} &= H^1(\Omega)^3 \\
 - \mathcal{P} &= L^2(\Omega)
 \end{aligned}$$

Nous allons, successivement, établir la forme variationnelle de (2.25) et (2.32). Ceci nous permettra alors de poser la forme variationnelle finale du problème définissant \mathbf{v} et p dans tout Ω .

Dans Ω_l , les champs \mathbf{v} et p , solution de (2.25) vérifient :

$$\left\{ \begin{aligned}
 \int_{\Omega_l} 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) - \int_{\Omega_l} p \nabla \cdot w &= - \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} p_{ext} w \cdot \mathbf{n} \\
 &\quad - \int_{\partial\Omega_g} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n}) \cdot w \\
 - \int_{\Omega_l} q \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0
 \end{aligned} \right.$$

$$\forall w \in \mathcal{V}, \forall q \in \mathcal{P}
 \tag{2.35}$$

Remarquons que le signe "-" précédant l'intégrale sur $\partial\Omega_g$ dans (2.35) vient du fait que la normale \mathbf{n} intervenant dans cette intégrale est la normale extérieure au gaz, laquelle est opposée à la normale extérieure à la partie liquide.

Dans Ω_g , les champs \mathbf{v} et p doivent également satisfaire (2.32). Ceci entraîne que, dans Ω_g , \mathbf{v} et p vérifient :

$$\left\{ \begin{aligned}
 \int_{\Omega_g} 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) &= p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot w + \int_{\partial\Omega_g} (2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p_g \mathbf{n}) \cdot w \\
 - \int_{\Omega_g} p q &= -p_g \int_{\Omega_g} q
 \end{aligned} \right.
 \tag{2.36}$$

$$\forall w \in \mathcal{V}, \forall q \in \mathcal{P}$$

La formulation variationnelle mixte définissant \mathbf{v} et p dans tout Ω est déduite en sommant les expressions (2.35) et (2.36). Les termes de bord $-\int_{\partial\Omega_g} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})w - pw) \cdot \mathbf{n}$ et $\int_{\partial\Omega_g} (2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v})w - p_g w) \cdot \mathbf{n}$ présents dans (2.35) et (2.36) s'annulent par continuité de la contrainte normale sur $\partial\Omega_g$.

Ainsi, la forme variationnelle mixte associée au problème (2.25) et (2.32) est :

A chaque instant t , connaissant $\Omega_l(t)$ et $\Omega_g(t)$, trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$ tels que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_l} 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) + \int_{\Omega_g} 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) - \int_{\Omega_l} p \nabla \cdot w \\ = - \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} p_{ext} w \cdot \mathbf{n} + p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot w \\ - \int_{\Omega_l} q \nabla \cdot \mathbf{v} - \alpha_p \int_{\Omega_g} p q = -\alpha_p p_g \int_{\Omega_g} q \end{array} \right.$$

$\forall (w, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$

(2.37)

Le système (2.37) est fermé, en isotherme, par une équation scalaire (2.2) donnant p_g en fonction du volume de Ω_g . La constante α_p introduite dans (2.37) pénalise la condition $p = p_g$ imposée dans Ω_g . Les dimensions de ce paramètre sont celles de l'inverse d'une viscosité :

$$[\alpha_p] = Pa^{-1}s^{-1} \quad (2.38)$$

Le système (2.37) est non linéaire en vitesse du fait de la dépendance de la viscosité η au taux de cisaillement généralisé. Il est possible de montrer [9], qu'avec la loi de comportement envisagée (2.24), la formulation mixte (2.37) est équivalente à un problème de point selle sur $\mathcal{V} \times \mathcal{P}$. En particulier, on montre [9] que la solution (\mathbf{v}, p) du système (2.37) existe et est unique dans les espaces $\mathcal{V} \times \mathcal{P}$ choisis.

Par construction de la formulation faible (2.37), la solution (\mathbf{v}, p) du système (2.25), (2.32) est également solution de cette formulation faible (2.37).

D'autre part, en prenant des fonctions test w et q dans (2.37) suffisamment régulières et à support compact, successivement, dans Ω_l puis dans Ω_g , on montre, par application de la formule de Green, que (\mathbf{v}, p) , solution de (2.37), est aussi "solution" de (2.25) et (2.32), à savoir :

$$(\mathbf{v}, p) \text{ solution de (2.37)} \implies \left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot [2\eta\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega_l \\ \left\{ \begin{array}{l} 2\eta_g \nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p_g = 0 \\ p = p_g \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega_g \end{array} \right. \quad (2.39)$$

En faisant l'hypothèse que Ω est un ouvert assez régulier ($\Omega \in \mathcal{C}^2$), on peut montrer [25] que $\mathbf{v} \in H^2(\Omega)^d$ et $p \in H^1(\Omega)$ (nous l'admettons ici). Donc les égalités de (2.39) ont lieu au sens $L^2(\Omega)$ (presque partout dans Ω_l et Ω_g). (Rappelons que l'espace de

Sobolev H^2 est défini de manière analogue à H^1 , mais en considérant de plus les dérivées secondes).

Pour une étude plus détaillée sur ce sujet et sur les développements théoriques que cela comporte, nous renvoyons à [55], [29], [25] et [9]. Dans la suite, nous nous contenterons d'établir formellement que le problème faible (2.37) est consistant avec le problème fort (2.25), *i.e.* que la formulation faible (2.37) tient compte, implicitement, des conditions imposées sur $\partial\Omega$ et $\partial\Omega_g$ dans (2.25).

Soulignons que pour obtenir (2.39), on s'est débarrassé des termes de bord apparaissant dans la formule de Green en prenant des fonctions test à support compact dans Ω_l et Ω_g . A présent, prenons une fonction test $w \in \mathcal{V}$. Nous multiplions les deux équations d'équilibre de (2.39) par w et intégrons en utilisant la formule de Green. Alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_l} 2\eta\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) - \int_{\Omega_l} p \nabla \cdot w = \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n}) \cdot w \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad - \int_{\partial\Omega_g} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n}) \cdot w \\ \int_{\Omega_g} 2\eta_g\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) = p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot w + \int_{\partial\Omega_g} (2\eta_g\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p_g\mathbf{n}) \cdot w \end{array} \right. \quad (2.40)$$

En sommant les deux équations de (2.40), et en retranchant cette somme de (2.37), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})w - pw) \cdot \mathbf{n} - \int_{\partial\Omega_g} (2\eta\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p\mathbf{n}) \cdot w \\ + \int_{\partial\Omega_g} (2\eta_g\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n} - p_g\mathbf{n}) \cdot w = - \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} p_{ext}w \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Formellement, nous déduisons de (2.41) que $\sigma\mathbf{n} = -p_{ext}\mathbf{n}$ sur $\partial\Omega$, et que, sur $\partial\Omega_g$:

$$\sigma\mathbf{n} = (2\eta_g\varepsilon(\mathbf{v}) - p_g I)\mathbf{n} \quad (2.42)$$

La contrainte est supposée bornée. Nous pouvons donc prendre le coefficient η_g suffisamment petit pour garantir que :

$$2\eta_g \|\varepsilon(\mathbf{v})\mathbf{n}\|_{\mathbb{R}^d} \ll \|p_g\mathbf{n}\|_{\mathbb{R}^d} = |p_g| \quad (2.43)$$

Sous la condition (2.43), l'Equation (2.42) implique que :

$$\sigma\mathbf{n} \approx -p_g\mathbf{n} \text{ sur } \partial\Omega_g \quad (2.44)$$

La relation (2.44) est la condition d'interface (à l'approximation près) du problème mécanique initial (2.25).

Il en résulte que, si η_g est pris assez petit, la formulation faible (2.37) est consistante avec le problème initial (2.25).

2.3.1.3 Introduction des fonctions caractéristiques

La formulation faible (2.37) fait intervenir des intégrales définies sur les domaines Ω_l et Ω_g . Afin de rendre cette formulation effective dans un contexte élément fini, nous introduisons les fonctions caractéristiques.

La fonction caractéristique $\mathbb{1}_A$ d'un domaine $A \subset \mathbb{R}^d$ est définie comme suit :

$$\mathbb{1}_A(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in A \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^d \setminus A \end{cases} \quad (2.45)$$

Nous introduisons la fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_l}$ du domaine liquide Ω_l , et la fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_g}$ de la bulle. Ces fonctions permettent de passer d'une intégrale définie sur Ω_l ou Ω_g à une intégrale définie sur Ω :

$$\int_{\Omega_l} (\dots) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_l} (\dots) \quad \text{et} \quad \int_{\Omega_g} (\dots) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} (\dots) \quad (2.46)$$

En utilisant ces propriétés, nous réécrivons le système (2.37) sous sa forme finale :

A chaque instant t , connaissant $\mathbb{1}_{\Omega_l}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}$, trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$ tels que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_l} 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|) \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) + \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_l} p \nabla \cdot w \\ \quad = - \int_{\partial\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_l} p_{ext} w \cdot \mathbf{n} + p_g \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} \nabla \cdot w \\ - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_l} q \nabla \cdot \mathbf{v} - \alpha_p \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} p q = -\alpha_p p_g \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} q \end{array} \right.$$

$\forall (w, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$

(2.47)

Le système (2.47) doit être résolu avec l'équation scalaire (2.2) donnant p_g . De plus, chaque fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_l}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}$ est déterminée par l'équation de transport (voir Annexe A) :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \alpha = 0 \quad \forall (x, t) \in \Omega \times [0, \Theta]$$

(2.48)

Ainsi, conjointement au système (2.47), il est nécessaire de résoudre une équation du type (2.48), étant donné que nous avons la relation : $\mathbb{1}_{\Omega_l}(x, t) = 1 - \mathbb{1}_{\Omega_g}(x, t) \quad \forall (x, t)$.

2.3.2 Discrétisation de la forme faible du problème mécanique

Nous discrétisons le problème (2.47) à l'aide d'une méthode éléments finis. Ceci consiste à définir des espaces fonctionnels \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h de dimensions finies "proches"

des espaces \mathcal{V} et \mathcal{P} de dimensions infinies, et à approcher la solution $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$ de (2.47) par $(\mathbf{v}_h, p_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$.

Nous procédons d'abord à la discrétisation de Ω , en se donnant un maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$ de Ω . Nous appellerons Ω_h le domaine ainsi discrétisé. Les éléments K constituant ce maillage sont des d-simplexes (des tétraèdres en 3D), et l'on a :

$$\Omega_h = \bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h(\Omega)} K \quad (2.49)$$

Ainsi, en notant $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ les fonctions qui approchent $\mathbb{1}_{\Omega_l}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}$, et qui seront définies précisément par la suite, le problème discret s'écrit :

Connaissant $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$, trouver $(\mathbf{v}_h, p_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v}_h)|) \varepsilon(\mathbf{v}_h) : \varepsilon(w_h) + \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}_h) : \varepsilon(w_h) \\ - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_h \nabla \cdot w_h = - \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_{ext} w_h \cdot \mathbf{n} + p_g \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h \nabla \cdot w_h \\ - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h q_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h - \alpha_p \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h p_h q_h = - \alpha_p p_g \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h q_h \end{cases} \quad (2.50)$$

$$\forall (w_h, q_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$$

Dans le système (2.50), le coefficient α_p prend toute son importance. En effet, dans le cas discret, les fonctions caractéristiques $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ ne valent plus exactement 1 ou 0, mais prennent leurs valeurs entre 1 et 0. C'est l'effet de diffusion numérique. Considérons K un élément du maillage sur lequel ni $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ ni $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ s'annulent. On peut dire que K contient à la fois du liquide et du gaz. Dans ce cas, plus la valeur de α_p est élevée, et plus la condition $p = p_g$ est privilégiée au détriment de $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ sur cet élément. Inversement, plus la valeur de α_p est petite (mais toujours strictement positive), plus la condition d'incompressibilité sera privilégiée par rapport à l'imposition de la pression du gaz sur un tel élément.

Notons d_v la dimension de \mathcal{V}_h , d_p la dimension de \mathcal{P}_h , et choisissons $\{\phi_m\}_{m=1, \dots, d_v}$ une base de \mathcal{V}_h et $\{\lambda_m\}_{m=1, \dots, d_p}$ une base de \mathcal{P}_h . Nous décomposons alors \mathbf{v}_h et p_h sur ces bases en écrivant :

$$\mathbf{v}_h = \sum_{m=1}^{d_v} V_m \phi_m \quad \text{et} \quad p_h = \sum_{m=1}^{d_p} P_m \lambda_m \quad (2.51)$$

De plus, dans le problème (2.50), il est possible de prendre, sans perte de généralité, $w_h = \phi_m$ et $q_h = \lambda_m$. Ainsi, le système (2.50) équivaut au système suivant :

$$\begin{pmatrix} A_l + A_g & {}^t B_l \\ B_l & -D_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_l + F_g \\ -G_l \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

où :

$V \in \mathbb{R}^{d_v}$, $V = {}^t(V_1, \dots, V_{d_v})$ est le vecteur solution en vitesse, et $P \in \mathbb{R}^{d_p}$, $P = {}^t(P_1, \dots, P_{d_p})$ est le vecteur solution pression. Les opérateurs A_l , A_g , B_l et D_g sont définis par :

$$\begin{aligned}
 - A_l &: \mathbb{R}^{d_v} \rightarrow \mathbb{R}^{d_v}, A_{lm} = \sum_{p=1}^{d_v} V_p \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v}_h)|) \varepsilon(\phi_p) : \varepsilon(\phi_m) \\
 - A_g &\in \mathcal{M}_{d_v, d_v}(\mathbb{R}), A_{gmp} = \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h 2\eta_g \varepsilon(\phi_p) : \varepsilon(\phi_m) \\
 - B_l &\in \mathcal{M}_{d_p, d_v}(\mathbb{R}), B_{lmp} = - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h \lambda_m \nabla \cdot \phi_p \\
 - D_g &\in \mathcal{M}_{d_p, d_p}(\mathbb{R}), D_{gmp} = \alpha_p \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h \lambda_p \lambda_m
 \end{aligned}$$

On remarque que, puisque l'opérateur A_l n'est pas linéaire par rapport à v_h , le système (2.52) n'est pas, lui non plus, linéaire. Les termes F_l , F_g et G_g du second membre s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 - F_l &\in \mathbb{R}^{d_v}, F_{lm} = - \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_{ext} \phi_m \cdot \mathbf{n} \\
 - F_g &\in \mathbb{R}^{d_v}, F_{gm} = p_g \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h \nabla \cdot \phi_m \\
 - G_g &\in \mathbb{R}^{d_p}, G_{gm} = \alpha_p p_g \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h \lambda_m
 \end{aligned}$$

Reste maintenant à choisir les espaces d'approximation \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h . Ces espaces ne peuvent être choisis indépendamment l'un de l'autre, et doivent satisfaire une condition de compatibilité de manière à assurer l'existence et l'unicité de la solution (\mathbf{v}_h, p_h) du problème (2.52). [9] montre que, lorsque la viscosité η suit une loi de Carreau (2.24), si \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h sont tels que $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, $\mathcal{P}_h \subset \mathcal{P}$, et que de plus la condition min-max discrète suivante est vérifiée :

$$\min_{Q \in \mathbb{R}^{d_p}} \max_{W \in \mathbb{R}^{d_v}} \frac{(B_l W, Q)}{({}^t Q G_{\mathcal{P}_h} Q)^{1/2} ({}^t W G_{\mathcal{V}_h} W)^{1/2}} \geq \beta^* > 0 \quad (2.53)$$

alors il existe un unique couple $(\mathbf{v}_h, p_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$ solution du système (2.52).

Dans (2.53), (\cdot, \cdot) désigne le produit scalaire dans \mathbb{R}^{d_p} : $(B_l W, Q) = {}^t W {}^t B_l Q$. $G_{\mathcal{V}_h}$ et $G_{\mathcal{P}_h}$ désignent les matrices de Gram des vecteurs formant la base des espaces \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h (voir (2.51)). Plus précisément, $(G_{\mathcal{V}_h})_{ij} = (\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{V}}$ (produit scalaire dans \mathcal{V}) et $(G_{\mathcal{P}_h})_{ij} = (\lambda_i, \lambda_j)_{\mathcal{P}}$, de sorte que : $\|w_h\|_{\mathcal{V}}^2 = {}^t W G_{\mathcal{V}_h} W$, pour $w_h \in \mathcal{V}_h$, $w_h = \sum_{i=1}^{d_v} W_i \phi_i$; de même $\|q_h\|_{\mathcal{P}}^2 = {}^t Q G_{\mathcal{P}_h} Q$, pour $q_h \in \mathcal{P}_h$, $q_h = \sum_{i=1}^{d_p} Q_i \lambda_i$.

Cette condition de compatibilité (2.53) est également celle donnée, dans le cadre des formulations mixtes classiques, par le théorème de Brezzi - Babuska [27] appliqué à la formulation discrète. Elle équivaut à :

$$Ker {}^t B_l = \{0\} \quad (2.54)$$

Si la condition de compatibilité (2.54) n'est pas vérifiée, l'unicité de la solution en pression du problème (2.52) n'est pas assurée. Prenons, en effet, (V, P) solution de (2.52). Si il existe $P^* \in \mathbb{R}^{d_p}$ non constant tel que $P^* \in Ker {}^t B_l$ (i.e.

$\int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_i}^h p_h^* \nabla \cdot \phi_m = 0 \quad \forall m$ où $p_h^* = \sum_{i=1}^{d_p} P_i^* \lambda_i$) et tel que $DP^* = 0$ alors $(V, P + P^*)$ est encore solution de (2.52). p_h^* est dite pression parasite.

La théorie de Brezzi - Babuska permet d'établir l'existence et l'unicité de la solution de la formulation variationnelle mixte du problème continu [9], ainsi que celle de la formulation discrète (ce que nous venons de montrer). De plus, cette théorie fournit un résultat de stabilité pour le choix des espaces $\mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$. Plus précisément, pour un fluide newtonien, si les conditions de Brezzi-Babuska sont vérifiées dans le cas continu et dans le cas discret [27], il existe une constante C telle que :

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\|_{\mathcal{V}} + \|p - p_h\|_{\mathcal{P}} \leq C \left(\inf_{w \in \mathcal{V}_h} \|\mathbf{v} - w\|_{\mathcal{V}} + \inf_{q \in \mathcal{P}_h} \|p - q\|_{\mathcal{P}} \right) \quad (2.55)$$

Des résultats de convergence avec une viscosité suivant la loi de Carreau sont donnés dans [9].

Le code de calcul **REM3D** dans lequel nous avons implémenté notre méthode utilise l'élément fini $P1^+/P1$, introduit par [7]. Cet élément, représenté sur la Figure 2.3, consiste à choisir la pression p_h continue sur Ω_h et linéaire sur chaque élément du maillage. La vitesse \mathbf{v}_h est choisie continue sur Ω_h , et se décompose, sur un élément, en la somme d'une partie linéaire et d'une partie non linéaire appelée fonction bulle.

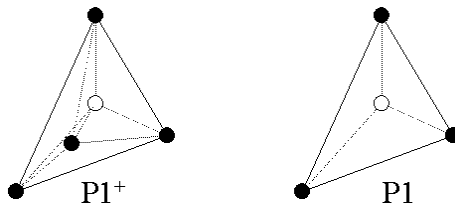


FIG. 2.3 – Éléments $P1^+/P1$, ou MINI-élément

La fonction bulle sert à assurer la condition de compatibilité (2.54). Elle s'annule sur la frontière de l'élément, et est affine par morceau sur les quatre sous-tétraèdres internes à l'élément (version proposée par [21]). Les espaces \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h s'expriment donc par :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_h &= V_h \oplus B_h \\ \text{où } V_h &= \{w_h \in \mathcal{C}^0(\Omega_h)^3 ; w_h|_K \in P1(K)^3\} \\ B_h &= \{b_h \in \mathcal{C}^0(\Omega_h)^3 ; b_h|_{\partial K} = 0 \text{ et } b_h|_{K_i} \in P1(K_i)^3 \quad i = 1, \dots, 4\} \\ \mathcal{P}_h &= \{q_h \in \mathcal{C}^0(\Omega_h) ; q_h|_K \in P1(K)\} \end{aligned} \quad (2.56)$$

où $(K_i)_{i=1, \dots, 4}$ est la décomposition du tétraèdre K en quatre sous-tétraèdres ayant comme sommet commun le barycentre de K .

$P1(K)$ est l'espace des polynômes sur K de degré inférieur ou égal à 1.

L'erreur d'approximation de l'élément $P1^+/P1$ est du premier ordre (en $O(h)$ où h est la taille de maille).

Notons $NbElt$ le nombre d'éléments du maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$, et $NbNoe$ le nombre de noeuds. Nous avons alors : $\dim \mathcal{V}_h = d \times (NbNoe + NbElt)$ et $\dim \mathcal{P}_h = NbNoe$. Remarquons qu'un maillage 3D possède environ 5 fois plus d'éléments que de noeuds. Choisissons $N_m \in \mathcal{P}_h$ la fonction valant 1 au noeud numéro m et s'annulant aux autres noeuds, et Nb_K la fonction polynômiale de degré 1 sur les sous-éléments de K , valant 1 au barycentre de K et s'annulant à ses sommets. Nous prenons alors comme base de \mathcal{V}_h et de \mathcal{P}_h :

$$\begin{aligned} \{\phi_i\}_{i=1, \dots, d_v} &= \{ \{\phi_i^1\}_{i=1, \dots, d \times NbNoe}, \{\phi_i^2\}_{i=1, \dots, d \times NbElt} \} \\ &= \{ e_1(N_1), \dots, e_d(N_1), \dots, e_1(N_{NbNoe}), \dots, e_d(N_{NbNoe}), \\ &\quad e_1(Nb_1), \dots, e_d(Nb_1), \dots, e_1(Nb_{NbElt}), \dots, e_d(Nb_{NbElt}) \} \\ \{\lambda_i\}_{i=1, \dots, d_p} &= \{ N_1, \dots, N_{NbNoe} \} \end{aligned} \quad (2.57)$$

où $e_i(a)$ est le vecteur de \mathbb{R}^d dont la $i^{\text{ème}}$ composante est $a \in \mathbb{R}$ et dont les autres composantes sont nulles.

Avec le choix du MINI-élément, le problème (2.52) se réécrit en [50] :

$$\begin{pmatrix} A_l^1 + A_g^1 & 0 & {}^t B_l^1 \\ 0 & A_l^2 & {}^t B_l^2 \\ B_l^1 & B_l^2 & -D_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^1 \\ V^2 \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_l^1 + F_g^1 \\ 0 \\ -G_l \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

où $V^1 \in \mathbb{R}^{d \times NbNoe}$ est le vecteur des composantes de la vitesse \mathbf{v}_h aux noeuds du maillage, tandis que $V^2 \in \mathbb{R}^{d \times NbElt}$ contient les composantes de la vitesse aux barycentres des éléments. De plus :

$$\begin{aligned} - A_l^1 : \mathbb{R}^{d \times NbNoe} &\rightarrow \mathbb{R}^{d \times NbNoe}, \\ A_l^1_m(V^1) &= \sum_{p=1}^{d \times NbNoe} V_p^1 \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h 2\eta(\varepsilon(|V^1|)) \varepsilon(\phi_p^1) : \varepsilon(\phi_m^1) \\ - A_l^2 : \mathbb{R}^{d \times NbElt} &\rightarrow \mathbb{R}^{d \times NbElt}, A_l^2_m(V^2) = \sum_{p=1}^{d \times NbElt} V_p^2 \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h 2\eta(\varepsilon(|V^1|)) \varepsilon(\phi_p^2) : \varepsilon(\phi_m^2) \end{aligned}$$

La définition de A_g^1 est analogue à celle de A_l^1 . De la même façon, nous avons $B_l^1_{mp} = - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h \lambda_m \nabla \cdot \phi_p^1$, tandis que B_l^2 correspond aux fonctions ϕ^2 .

Enfin, $F_l^1_m = - \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_{ext} \phi_m^1 \cdot \mathbf{n}$ et $F_g^1_m = p_g \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_g}^h \nabla \cdot \phi_m^1$.

Le système (2.58) appelle quelques remarques :

- D'abord la bulle n'est pas considérée dans le gaz. En effet, dans le gaz, la pression est imposée comme étant constante. Il ne peut donc pas y avoir de pression parasite.
- D'autre part, le fait que la fonction bulle s'annule sur la frontière de tout élément K du maillage entraîne que $F_l^2_m = - \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_{ext} \phi_m^2 \cdot \mathbf{n} = 0$. Considérant de plus que $\nabla \phi^1$ est constant par élément, nous avons $\int_K \nabla \phi^1 : \nabla \phi^2 = 0$.

- Enfin, la partie non linéaire de la vitesse est négligée dans le calcul du taux de cisaillement intervenant dans l'expression de la viscosité du liquide. D'où la notation $\varepsilon(|V^1|)$ dans (2.58).

Ces deux derniers points permettent de découpler les équations portant sur la partie linéaire V^1 de la vitesse de celles portant sur sa partie bulle V^2 .

Enfin, par une technique de condensation classique, les degrés de liberté liés à la bulle sont éliminés. Ainsi, on obtient une formulation mixte en vitesse - pression avec pour inconnues les valeurs nodales des d composantes de la vitesse et de la pression en chaque sommet des tétraèdres. La condensation de la bulle permet de se ramener localement à une approximation du type $P1/P1$. La matrice élémentaire liée à l'élément K s'écrit alors :

$$M_K = \begin{pmatrix} A_{lK}^1 + A_{gK}^1 & {}^t B_{lK}^1 \\ B_{lK}^1 & -C_{lK} - D_{gK} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

Nous l'avons dit, le système en vitesse pression obtenu n'est pas linéaire, du fait de l'opérateur A_l^1 . C'est pourquoi une méthode de Newton-Raphson est utilisée afin de se ramener à une suite de problèmes linéaires. Le système ainsi linéarisé est résolu par une méthode itérative de type résidu minimal. Nous renvoyons à [23] pour plus de détails sur la résolution d'un système de ce type.

2.4 Suivi de l'évolution des domaines : résolution de l'équation de transport

2.4.1 Introduction

Nous nous intéressons dans cette section à la résolution numérique de l'équation de transport suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{v}_c \cdot \nabla \alpha & = C(x, t) \\ \alpha(x, 0) & = \alpha_0(x) \\ \alpha(x, t) & = \alpha_b(x, t) \quad \forall x \in \partial\Omega^- \end{cases} \quad (2.60)$$

où $\alpha : (x, t) \in \Omega \times [0, \Theta] \mapsto \alpha(x, t) \in \mathbb{R}$.

L'équation (2.60) représente le transport d'une quantité α avec une vitesse de convection \mathbf{v}_c , typiquement égale à la vitesse de la matière \mathbf{v} , et un terme source C . C est supposé connu dans (2.60).

Si l'on prend $C = 0$, on retrouve l'équation de transport des fonctions caractéristiques décrite en annexe A.

Pour que le le système (2.60) soit bien posé, il faut imposer α sur la partie entrante $\partial\Omega^-$ de la frontière $\partial\Omega$:

$$\partial\Omega^- = \{x \in \partial\Omega; \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n} < 0\} \quad (2.61)$$

où \mathbf{n} est la normale extérieure à $\partial\Omega$.

La méthode éléments finis que nous développons dans cette partie pour résoudre numériquement l'Equation (2.60) entre dans la classe des méthodes Galerkin discontinu. Ces méthodes consistent en une approximation discontinue de la solution du problème. Elles ont tout d'abord été étudiées et utilisées dans [45] pour des équations hyperboliques pour lesquelles l'information se propage selon les caractéristiques. De telles techniques conduisent à des méthodes éléments finis stables et de précision élevée. Typiquement, l'erreur d'approximation commise est, en norme L^2 , en $k + \frac{1}{2}$, où k est l'ordre du polynôme utilisé. Nous renvoyons à [11], [10], [51] ou [52] pour des développements et des applications de ces méthodes. Enfin, soulignons que les méthodes de type Galerkin discontinu privilégient l'information amont sans ajout explicite d'une 'viscosité artificielle'.

Dans le but d'obtenir une méthode stable pour tout pas de temps sans limitation de type C.F.L., nous avons choisi de développer une méthode implicite en temps. De cette manière seule la physique du problème et l'erreur souhaitée sur la solution détermine la valeur du pas de temps. Plus particulièrement nous nous sommes orientés vers les techniques élément fini espace-temps. Ce type de méthode consiste à considérer le temps comme une quatrième dimension et à appliquer une technique élément fini dans un espace à quatre dimensions que nous notons $\tilde{\Omega}$.

L'utilisation d'une méthode Galerkin discontinu dans un contexte espace-temps permet de se ramener à des systèmes d'équations définies sur la "tranche" courante de l'espace-temps $\Omega \times [t_n, t_{n+1}]$. En effet, grâce à la discontinuité en temps de la solution cherchée, il est possible de découpler "passé" et "futur", de manière à ce que la solution ne dépende, sur $\Omega \times [t_n, t_{n+1}]$ que de sa valeur en t_n^- .

Citons les contributions suivantes au développement des méthodes espace-temps, pour la plupart dans le cas de problème d'advection-diffusion : [34], [63], [48], [40], ou [61]. D'autres auteurs construisent des algorithmes pour générer des maillages espace-temps non-structurés [46].

La solution α de l'Equation de transport purement convective (2.60) est approchée par une fonction α_h choisie constante sur chaque élément spatial du maillage et polynomiale d'un degré élevé q en temps. Mais commençons par nous placer dans un cadre complètement espace-temps en prolongeant l'opérateur gradient et le champs de vitesse dans un espace à quatre dimensions. Nous posons donc :

$$\tilde{v} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_c \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \tilde{\nabla} = \begin{pmatrix} \nabla \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

Ainsi, l'Equation (2.60) se réécrit en :

$$\boxed{\tilde{v} \cdot \tilde{\nabla} \alpha = C \text{ dans } \tilde{\Omega}} \quad (2.63)$$

2.4.2 Une technique espace-temps Galerkin discontinu

Considérons une partition de l'intervalle $[0, \Theta]$ ordonnée comme suit : $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N_t}$. Nous définissons l'intervalle I par $I =]t_n, t_{n+1}[$, de façon à avoir, formellement : $[0, \Theta] = \bigcup_I \bar{I}$. Les notations suivantes sont définies :

- $\tilde{\Omega} = \Omega \times [0, T]$ est le domaine de calcul espace-temps
- $\mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})$ est le maillage spatio-temporel, et l'on a : $\tilde{\Omega} = \bigcup_{\tilde{K} \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})} \tilde{K}$
- $\tilde{K} = K \times I$ est un élément du maillage $\mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})$
- $\tilde{F} \subset \partial \tilde{K}$ est une face de \tilde{K}
- $\mathcal{F}(\mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})) = \{\tilde{F} \subset \partial \tilde{K}; \forall \tilde{K} \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})\}$ est l'ensemble des faces du maillage $\mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})$
- $\mathcal{K}(\tilde{F}) = \{\tilde{K} \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega}); \tilde{F} \subset \partial \tilde{K}\}$ est l'ensemble des éléments \tilde{K} partageant la face \tilde{F}
- $\mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}}$ est la normale unitaire à la face \tilde{F} extérieure à \tilde{K} .

Soulignons le choix du maillage espace-temps $\mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})$: un élément de ce maillage est vu simplement comme le produit cartésien d'un élément spatial K par un intervalle de temps I .

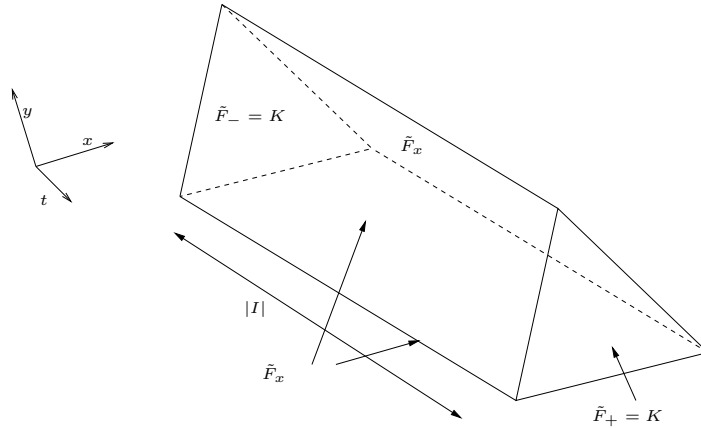


FIG. 2.4 – Élément espace-temps $\tilde{K} = K \times I$ représenté avec $d = 2$ (dimension spatiale)

L'espace d'approximation $\mathcal{P}^{s,q}(\tilde{\Omega})$ est défini comme suit :

$$\mathcal{P}^{s,q}(\tilde{\Omega}) = \{f \in L^2(\tilde{\Omega}); f|_{\tilde{K}} \in P^s(K) \times P^q(I), \forall \tilde{K} = K \times I \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega})\} \quad (2.64)$$

Le champ \tilde{v} est supposé continu sur $\tilde{\Omega}$. En prenant $\alpha_h \in \mathcal{P}^{s,q}$, le terme convectif de (2.63) se définit par dualité :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{v} \cdot \tilde{\nabla} \alpha_h, \Psi \rangle_{\tilde{\Omega}} &= - \sum_{\tilde{K}} \int_{\tilde{K}} \alpha_h \nabla \cdot [\Psi \tilde{v}] \\ &= - \sum_{\tilde{K}} \left(\int_{\partial \tilde{K}} \alpha_h \Psi \tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}} - \int_{\tilde{K}} \tilde{\nabla} \alpha_h \cdot \tilde{v} \Psi \right) \end{aligned} \quad (2.65)$$

où $\Psi : \tilde{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction choisie suffisamment régulière : $\Psi \in \mathcal{C}_c^1(\tilde{\Omega})$ l'ensemble des fonctions dérivables, à dérivée continue sur $\tilde{\Omega}$ et à support compact.

Nous définissons sur les faces \tilde{F} l'opérateur espace-temps de saut $[\cdot]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}}$ par :

$$[f]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}}(x) = \sum_{\tilde{K}' \in \mathcal{K}(\tilde{F})} f|_{\tilde{K}'}(x) \mathbf{n}_{\tilde{K}'}^{\tilde{F}} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}} \quad \forall x \in \tilde{F} \quad (2.66)$$

Avec cette définition nous pouvons réécrire l'Equation (2.65) en :

$$\langle \tilde{v} \cdot \tilde{\nabla} \alpha_h, \Psi \rangle = - \sum_{\tilde{F} \in \mathcal{F}} \int_{\tilde{F}} [\alpha_h]_{\tilde{K}(\tilde{F})}^{\tilde{F}} \Psi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}(\tilde{F})}^{\tilde{F}} + \sum_{\tilde{K}} \int_{\tilde{K}} \tilde{\nabla} \alpha_h \cdot \mathbf{v} \Psi \quad (2.67)$$

où $\tilde{K}(\tilde{F})$ est un élément de $\mathcal{K}(\tilde{F})$ dont le choix est arbitraire.

Nous l'avons dit en introduction, les méthodes Galerkin discontinu privilégient l'information amont. Dans un cadre spatio-temporel cela signifie privilégier l'information spatialement amont, *i.e.* allant dans le sens convectif, mais cela signifie également privilégier l'information allant du passé vers le futur, donc respecter le principe de causalité [34].

Ce décentrement, qui assure la stabilité de la méthode, est obtenu comme suit. Nous considérons la décomposition du flux de matière en sa partie négative et sa partie positive :

$$\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}} = (\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}})^- + (\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}})^+ \quad (2.68)$$

De plus, dans un maillage, seuls deux éléments partagent la même face, *i.e.* $\mathcal{K}(\tilde{F}) = \{\tilde{K}, \tilde{K}'\}$, et :

$$(\tilde{v}(x) \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}'}^{\tilde{F}})^+ = -(\tilde{v}(x) \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}})^- \quad \forall x \in \tilde{F} \quad (2.69)$$

Tenant compte de la relation (2.69), l'Equation (2.63) est discrétisée en :

$$\sum_{\tilde{K}} \left(- \sum_{\tilde{F} \in \partial \tilde{K}} \int_{\tilde{F}} [\alpha_h]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}} \Psi (\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}})^- + \int_{\tilde{K}} \tilde{\nabla} \alpha_h \cdot \tilde{v} \Psi \right) = \sum_{\tilde{K}} \int_{\tilde{K}} C \Psi \quad (2.70)$$

Nous choisissons maintenant l'espace dans lequel nous cherchons α_h : $\alpha_h \in \mathcal{P}^{0,q}$. Une base de cet espace est :

$$\mathcal{B}^{0,q} = \{\mathbb{1}_{\tilde{K}}(x, t)(t - t_n)^p\}_{\tilde{K} \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega}); p=1, \dots, q} \quad (2.71)$$

En développant α_h sur cette base, nous pouvons écrire sur chaque élément \tilde{K} :

$$\alpha_h(x, t)|_{\tilde{K}} = \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p (t - t_n)^p \quad (2.72)$$

Enfin, nous achevons la discrétisation de (2.70) en remplaçant Ψ par Ψ_h choisi dans $\mathcal{B}^{0,q}$: $\Psi_h = \mathbb{1}_{\tilde{K}}(t - t_n)^r$. Nous pouvons à présent écrire explicitement notre méthode en développant les termes de (2.70).

Tout d'abord, vu que α_h est cherchée constante sur chaque élément spatial, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{K}} \tilde{\nabla} \alpha_h \cdot \tilde{v} \Psi_h &= \int_{K \times I} (t - t_n)^r \frac{\partial}{\partial t} \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p (t - t_n)^p \\ &= |K| \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p p \int_I (t - t_n)^{r+p-1} \\ &= |K| \sum_{p=1}^q \alpha_{\tilde{K}}^p \frac{p}{p+r} |I|^{p+r} \end{aligned} \quad (2.73)$$

Traitons à présent les termes de saut. Comme présenté à la Figure 2.4, l'élément \tilde{K} possède $d+3$ faces frontières (d étant la dimension spatiale) qui se décomposent en :

- deux faces temporelles que nous notons \tilde{F}_- et \tilde{F}_+ qui sont en fait l'élément K . Ainsi, le voisin de \tilde{K} par \tilde{F}_- est $K \times I^-$ où I^- est l'intervalle de temps précédent I , tandis que le voisin de \tilde{K} par \tilde{F}_+ est $K \times I^+$ où I^+ est l'intervalle de temps suivant I .
De plus, la normale à \tilde{F}_- extérieure à \tilde{K} est ${}^t(\vec{0}, -1)$, la normale à \tilde{F}_+ est ${}^t(\vec{0}, +1)$ et la mesure de ces deux faces est $|K|$.
- $d+1$ faces spatiales notées \tilde{F}_x . Chacune de ces faces est le produit d'une face F de ∂K avec I : $\tilde{F} = F \times I$. La normale unitaire extérieure à \tilde{F} est : ${}^t(\mathbf{n}_K^F, 0)$ où \mathbf{n}_K^F est la normale à la face F .

En tenant compte des ces relations, nous avons :

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{F}_-} [\alpha_h]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_-} \Psi_h (\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_-})^- &= \int_K (\alpha_{\tilde{K}}^0 - \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p |I^-|^p) (t_n - t_n)^r (-1) \\ &= |K| (\sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p |I^-|^p - \alpha_{\tilde{K}}^0) \delta_{0r} \end{aligned} \quad (2.74)$$

Où δ_{0r} , le symbole de Kronecker, vaut 1 si $r = 0$ et 0 sinon.

De plus :

$$\int_{\tilde{F}_+} [\alpha_h]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_+} \Psi_h (\tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_+})^- = 0 \quad \text{car } \tilde{v} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_+} = 1 \quad (2.75)$$

et :

$$\begin{aligned}
 \int_{\tilde{F}_x} [\alpha_h]_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_x} \Psi_h(\tilde{\nu} \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_x})^- &= \int_{F \times I} \sum_{p=0}^q (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}(\tilde{F}_x)}^p) (t - t_n)^{p+r} (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_{\tilde{K}}^{\tilde{F}_x})^- \\
 &= \sum_{p=0}^q (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}(\tilde{F}_x)}^p) \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^-
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

En mettant bout à bout les développements (2.73), (2.76), (2.74) et (2.75) nous arrivons au système linéaire suivant permettant de déterminer α_h sur la tranche $\Omega_h \times I$:

$$\begin{aligned}
 \delta_{0r} \alpha_{\tilde{K}}^0 &+ \sum_{p=1}^q \frac{p}{p+r} \alpha_{\tilde{K}}^p |I|^{p+r} \\
 &- \frac{1}{|K|} \sum_{p=0}^q \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \sum_{F \in \partial K} (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}(\tilde{F}_x)}^p) \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^- d\Gamma \\
 &= \delta_{0r} \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}^-}^p |I|^{-p} + \int_{\tilde{K}} C(x, t) (t - t_n)^r
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

$\forall r \in [0, q] \cap \mathbb{N}, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h(\Omega)$

Comme nous l'avions annoncé nous obtenons une méthode implicite. Cette méthode est donc stable quel que soit le pas de temps $|I|$ utilisé.

Le système (2.77) est linéaire, donc de la forme $A\alpha_h = b$, où A est une matrice $(q+1)NbElt \times (q+1)NbElt$. A est une matrice creuse, puisque, sur chaque ligne, hormis la diagonale qui est non nulle, au plus $d+1$ termes extra-diagonaux sont non nuls. Ces termes correspondent aux contributions des voisins d'un élément.

A est une matrice non symétrique. Pour résoudre (2.77) nous avons utilisé une méthode itérative de type Jacobi. Ceci signifie décomposer A en : $A = D - E - F$ où D est une matrice diagonale, E une matrice triangulaire inférieure et F une matrice triangulaire supérieure. Ainsi, en notant ${}^k\alpha_h$ la solution à la k ième itération, nous résolvons :

$$\begin{aligned}
 {}^0\alpha_h &= \alpha_h(t_n^-) \\
 \text{Répéter : } &{}^{k+1}\alpha_h = D^{-1}(E + F) {}^k\alpha_h + b \\
 &{}^k\alpha_h \leftarrow {}^{k+1}\alpha_h \\
 \text{Jusqu'à : } &distance({}^k\alpha_h, {}^{k+1}\alpha_h) < \epsilon
 \end{aligned} \tag{2.78}$$

Supposons qu'il existe une norme vectorielle $|\cdot|$ telle que pour la norme subordonnée correspondante notée $\|\cdot\|$ on ait $\|D^{-1}(E + F)\| < 1$. Alors, pour toute donnée initiale ${}^0\alpha_h$, la méthode de Jacobi (2.78) converge [56].

Rappelons que, par définition, A est à diagonale dominante si :

$$|A_{ii}| > \sum_{\substack{j \geq 1 \\ j \neq i}} |A_{ij}| \quad (2.79)$$

Nous avons alors la proposition suivante :

Proposition 2.2 *Si la matrice A est à diagonale dominante, alors la méthode de Jacobi converge.*

En effet, définissons la norme matricielle suivante :

$$\|T\|_\infty = \max_i \sum_{j \geq 1} |T_{ij}| \quad (2.80)$$

Par définition, $D_{ij} = A_{ij}\delta_{ij}$ tandis que $(E + F)_{ij} = -A_{ij}$ si $i \neq j$ et $(E + F)_{ii} = 0$. Nous avons alors :

$$\|D^{-1}(E + F)\|_\infty = \max_i \sum_{\substack{j \geq 1 \\ j \neq i}} \left| \frac{A_{ij}}{A_{ii}} \right| \quad (2.81)$$

Si A est à diagonale dominante, alors la propriété (2.79) implique que $\|D^{-1}(E + F)\|_\infty < 1$, et donc la méthode de Jacobi converge.

Lorsque la fonction α_h est P_0 par intervalle de temps, il est aisé de vérifier que la matrice A du système (2.77) obtenue avec $q = 0$ est à diagonale dominante. En effet, dans ce cas, $|A_{ii}| = 1 - \frac{|I|}{|K|} \sum_{F \in \partial K} \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^-$, tandis que la somme des valeurs absolues des termes extra-diagonaux vaut $-\frac{|I|}{|K|} \sum_{F \in \partial K} \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^-$. Donc nous sommes assurés de la convergence de la méthode lorsque $p = 0$. Pour des ordres plus élevés, la matrice A n'est plus à diagonale dominante. Nous n'avons pas, dans ce cas, établi de résultat de convergence. Néanmoins, nous avons constaté en pratique une convergence dans tous les cas de l'algorithme (2.78), avec un nombre d'itérations dépendant du pas de temps pour ϵ fixé.

De plus, l'utilisation d'une méthode de Jacobi permet de nous ramener, à chaque itération, à un système local (par élément) $(q + 1) \times (q + 1)$. Concrètement, à la k ième itération nous résolvons :

$$\begin{aligned}
 \delta_{0r} \alpha_{\tilde{K}}^{k+1} &+ \sum_{p=1}^q \frac{p}{p+r} \alpha_{\tilde{K}}^p |I|^{p+r} \\
 &- \frac{1}{|K|} \sum_{p=0}^q \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \sum_{F \in \partial K} \alpha_{\tilde{K}}^p \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^- d\Gamma \\
 &= -\frac{1}{|K|} \sum_{p=0}^q \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \sum_{F \in \partial K} \alpha_{\tilde{K}(\tilde{F})}^p \int_F (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^F)^- d\Gamma \\
 &+ \delta_{0r} \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}^-}^p |I^-|^p + \int_{\tilde{K}} C(x, t) (t - t_n)^r
 \end{aligned} \tag{2.82}$$

$$\forall r \in [0, q] \cap \mathbb{N}, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h(\Omega)$$

La condition d'arrêt est alors :

$$\left(\sum_{p=0}^q \sum_K (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}}^{p+1})^2 \right)^{1/2} < \epsilon \tag{2.83}$$

2.4.3 Estimateur d'erreur a posteriori sur les fonctions caractéristiques

Nous nous intéressons ici à quantifier l'erreur commise lors de la discrétisation de l'équation de transport par notre méthode Galerkin discontinu. Nous nous plaçons dans le cadre où $C(x, t) = 0$ et les valeurs de α , que ce soit initialement ou sur $\partial\Omega$ sont 0 ou 1. Nous supposons connu le champ de vitesse convective \mathbf{v}_c , et nous définissons l'erreur d'approximation en norme $L^2(\tilde{\Omega})$ par :

$$e_h = \|\alpha - \alpha_h\|_{0, \tilde{\Omega}} = \left(\int_0^\Theta \int_{\Omega_h} (\alpha - \alpha_h)^2 dx dt \right)^{1/2} \tag{2.84}$$

La fonction caractéristique α , solution de (2.60), ne prend que deux valeurs 0 ou 1. En conséquence, les éléments du maillage apportant une contribution non nulle à e_h sont les éléments sur lesquels la valeur de α_h est strictement comprise entre 0 et 1. Autrement dit, ce sont les éléments situés à l'interface du domaine caractérisé par α_h . L'erreur e_h mesure donc la diffusion de cette interface due à la discrétisation.

L'erreur e_h ne peut être évaluée que dans certains cas très particuliers. Dans le cas général, nous nous proposons de construire un estimateur d'erreur a posteriori θ . On souhaite donc que :

$$\theta \approx e_h \tag{2.85}$$

Nous définissons en premier lieu l'erreur de discretisation de α par :

$$E_d = \left(\int_0^\Theta \int_{\Omega_h} (\alpha - \pi_h^{0,q}(\alpha))^2 dx dt \right)^{1/2} \quad (2.86)$$

où $\pi_h^{0,q}(\alpha)$ est la projection orthogonale de la fonction α dans l'espace $\mathcal{P}^{0,q}(\tilde{\Omega})$ des fonctions constantes par élément K du maillage et polynômes de degré q par intervalle de temps I . Nous notons plus simplement π_h à la place de $\pi_h^{0,q}(\alpha)$. En développant l'expression (2.86), nous avons :

$$E_d = \left(\int_0^\Theta \int_{\Omega_h} (\alpha - 2\alpha\pi_h + \pi_h^2) dx dt \right)^{1/2} \quad (2.87)$$

Notons que pour obtenir (2.87) nous utilisons le fait que $\alpha^2 = \alpha$, vu que α vaut 0 ou 1. Il nous faut à présent expliciter les trois termes composant E_d en fonction de π_h uniquement.

π_h vérifie, par définition, la condition d'orthogonalité suivante :

$$\int_0^\Theta \int_{\Omega_h} (\alpha - \pi_h)\alpha^* dx dt = 0 \quad \forall \alpha^* \in \mathcal{P}^{0,q}(\tilde{\Omega}) \quad (2.88)$$

En prenant α^* comme une fonction de la base $\mathcal{B}^{0,q}$, $\alpha^* = \mathbb{1}_K \mathbb{1}_I (t - t_n)^r$ (voir définition (2.71)), et en considérant la décomposition de π_h sur cette base, $\pi_{h|\tilde{K}} = \sum_{p=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p (t - t_n)^p$, la relation (2.88) équivaut à :

$$\int_I \int_K \alpha (t - t_n)^r = \int_I \int_K \sum_{p=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p (t - t_n)^{p+r} \quad \forall r = 0, \dots, q, \quad \forall \tilde{K} = K \times I \in \mathcal{T}_h(\tilde{\Omega}) \quad (2.89)$$

Ce qui entraîne, en intégrant le membre de droite :

$$\int_I \int_K \alpha (t - t_n)^r = |K| \sum_{p=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \quad (2.90)$$

En prenant $r = 0$ nous obtenons le premier terme composant E_h dans (2.87).

Prenons maintenant $\alpha^* = \pi_h$ dans (2.88). Après intégration, ce choix fournit la relation suivante :

$$\int_I \int_K \alpha \pi_h = |K| \sum_{p,k=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p \pi_{\tilde{K}}^k \frac{|I|^{p+k+1}}{p+k+1} \quad (2.91)$$

Ce qui correspond au terme croisé intervenant dans l'expression de E_h (2.87).

Enfin, un calcul direct montre que :

$$\int_I \int_K \pi_h^2 = |K| \sum_{p=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p \pi_{\tilde{K}}^p \frac{|I|^{2p+1}}{2p+1} + 2|K| \sum_{\substack{p,k=0 \\ k > p}}^q \pi_{\tilde{K}}^p \pi_{\tilde{K}}^k \frac{|I|^{p+k+1}}{p+k+1} \quad (2.92)$$

Nous pouvons alors écrire explicitement E_h comme :

$$E_h = \left(\sum_{K,I} |K| \sum_{p=0}^q \pi_{\tilde{K}}^p \left(\frac{|I|^{p+1}}{p+1} + \pi_{\tilde{K}}^p \frac{|I|^{2p+1}}{2p+1} - 2 \sum_{k=0}^p \pi_{\tilde{K}}^k \frac{|I|^{p+k+1}}{p+k+1} \right) \right)^{1/2} \quad (2.93)$$

A présent, en nous fondant sur les travaux de [50], nous posons l'estimateur d'erreur a posteriori suivant :

$$\theta = \left(\sum_{K,I} |K| \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}}^p \left(\frac{|I|^{p+1}}{p+1} + \alpha_{\tilde{K}}^p \frac{|I|^{2p+1}}{2p+1} - 2 \sum_{k=0}^p \alpha_{\tilde{K}}^k \frac{|I|^{p+k+1}}{p+k+1} \right) \right)^{1/2} \quad (2.94)$$

Remarquons que les éléments K apportant une contribution non nulle à θ dans (2.94) sont bien les éléments sur lesquels α_h est nulle ou vaut 1.

De plus, dans le cas particulier où $q = 0$, *i.e.* où α est approchée par une fonction constante par interval de temps I , l'estimateur θ devient :

$$\theta = \left(\sum_{K,I} |K| |I| \alpha_{\tilde{K}}^0 (1 - \alpha_{\tilde{K}}^0) \right)^{1/2} \quad (2.95)$$

Le cas (2.95) correspond à l'estimateur proposé dans [50].

2.4.4 Amélioration de la description des interfaces : une technique de r-adaptation de maillage

Nous avons déjà souligné l'importance d'une bonne description des interfaces liquide - gaz. Notre stratégie numérique est basée sur une approche eulérienne, ce qui signifie que les bulles de gaz croissent dans un maillage fixe de tout le domaine de calcul. Ceci entraîne un effet de diffusion numérique sur les interfaces : au lieu d'avoir uniquement des éléments où les fonctions caractéristiques valent 0 ou 1, nous avons des éléments où ces fonctions prennent des valeurs comprises entre 0 et 1.

Afin de limiter cette diffusion nous utilisons la technique de r-adaptation de maillage implémentée dans **REM3D** par E. Bigot [14]. Voir aussi [15] et [22]. Cette technique consiste à déplacer les noeuds du maillage tout en maintenant sa topologie inchangée. Contrairement aux approches lagrangiennes ou ALE (Arbitrairement Lagrangien Eulerien), le maillage ne se déforme pas suivant le mouvement de la matière : ses

éléments sont contractés à l'interface liquide - gaz, avant de reprendre leurs tailles et leurs formes initiales une fois que l'interface est passée.

Ce déplacement des noeuds du maillage se traduit par une vitesse du maillage, que nous appellerons vitesse d'adaptation du maillage, notée \mathbf{v}_a . Cette vitesse d'adaptation est prise en compte dans le transport des fonctions caractéristiques en posant : $\mathbf{v}_c = \mathbf{v} - \mathbf{v}_a$.

2.4.5 Etude de la méthode espace-temps Galerkin discontinu

Nous étudions le comportement de notre méthode dans des cas où α est connue de manière analytique. Nous nous intéressons à l'analyse de l'erreur commise en fonction de la taille de maille, du pas de temps, et de l'ordre d'approximation temporelle choisie. Nous porterons également notre attention sur la forme des interfaces obtenues en fonction des paramètres cités.

Pour ce faire, différentes vitesses de convection \mathbf{v}_c seront choisies, correspondant aux mouvements élémentaires suivants : translation, rotation, expansion. Ces mouvements préservent la géométrie de la bulle. Cette section sera conclue par l'étude de la déformation d'une bulle.

Mais, avant tout, commençons par le cas le plus simple : l'étude d'une translation en 1D.

2.4.5.1 Cas 1D

Nous débutons par une remarque d'ordre général sur notre méthode Galerkin discontinu en explicitant le système (2.77) dans le cas 1D. Le maillage consiste simplement en une succession d'intervalles (voir figure 2.5). Un élément K possède deux voisins que nous notons K^g (voisin de gauche) et K^d (voisin de droite). La frontière ∂K est réduite à deux points que nous appelons F^g et F^d , selon les conventions de la Figure 2.5. Les deux normales à ∂K , extérieures à K , sont -1 en F^g et $+1$ en F^d .

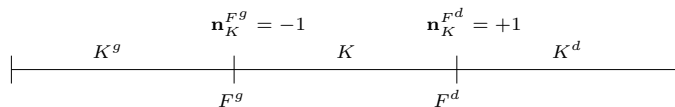


FIG. 2.5 – Conventions en 1D

La vitesse \mathbf{v}_c est un champ scalaire, et l'on a :

$$\int_{F^g} (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^{F^g})^- d\Gamma = -\mathbf{v}_c^+ \text{ et } \int_{F^d} (\mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n}_K^{F^d})^- d\Gamma = \mathbf{v}_c^- \quad (2.96)$$

Tenant compte de la relation (2.96), le système (2.77) se réécrit alors en 1D comme suit :

$$\begin{aligned}
 \delta_{0r} \alpha_{\tilde{K}}^0 &+ \sum_{p=1}^q \frac{p}{p+r} \alpha_{\tilde{K}}^p |I|^{p+r} \\
 &- \frac{1}{|K|} \sum_{p=0}^q \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \left((\alpha_{\tilde{K}^g}^p - \alpha_{\tilde{K}}^p) \mathbf{v}_c^+ + (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}^d}^p) \mathbf{v}_c^- \right) \\
 &= \delta_{0r} \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}^-}^p |I^-|^p + \int_{\tilde{K}} C(x, t) (t - t_n)^r
 \end{aligned} \tag{2.97}$$

$\forall r \in [0, q] \cap \mathbb{N}, \forall K \in \mathcal{T}_h(\Omega).$

En considérant les relations suivantes :

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c^+ + \mathbf{v}_c^- \text{ et } |\mathbf{v}_c| = \mathbf{v}_c^+ - \mathbf{v}_c^- \tag{2.98}$$

nous remarquons que l'on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 (\alpha_{\tilde{K}^g}^p - \alpha_{\tilde{K}}^p) \mathbf{v}_c^+ + (\alpha_{\tilde{K}}^p - \alpha_{\tilde{K}^d}^p) \mathbf{v}_c^- &= -\frac{\mathbf{v}_c}{2} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p - \alpha_{\tilde{K}^g}^p) \\
 &+ \frac{|\mathbf{v}_c|}{2} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p + \alpha_{\tilde{K}^g}^p - 2\alpha_{\tilde{K}}^p)
 \end{aligned} \tag{2.99}$$

En utilisant cette égalité, notre méthode, en 1D, devient :

$$\begin{aligned}
 \delta_{0r} \alpha_{\tilde{K}}^0 &- \delta_{0r} \sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}^-}^p |I^-|^p + \sum_{p=1}^q \frac{p}{p+r} \alpha_{\tilde{K}}^p |I|^{p+r} \\
 &+ \sum_{p=0}^q \frac{|I|^{p+r+1}}{p+r+1} \left(\frac{\mathbf{v}_c}{2|K|} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p - \alpha_{\tilde{K}^g}^p) - |K| \frac{|\mathbf{v}_c|}{2|K|^2} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p + \alpha_{\tilde{K}^g}^p - 2\alpha_{\tilde{K}}^p) \right) \\
 &= \int_{\tilde{K}} C(x, t) (t - t_n)^r
 \end{aligned} \tag{2.100}$$

Mise sous cette forme, notre méthode Galerkin discontinu s'interprète ainsi : la première ligne de (2.100) correspond, comme nous l'avons déjà vu, au terme de dérivée temporelle ; sur la deuxième ligne, le terme $\frac{\mathbf{v}_c}{2|K|} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p - \alpha_{\tilde{K}^g}^p)$ correspond à la discrétisation du terme $\mathbf{v}_c \cdot \nabla \alpha$ avec une erreur en $o(|K|^2)$, tandis que le terme $\frac{|\mathbf{v}_c||K|}{2|K|^2} (\alpha_{\tilde{K}^d}^p + \alpha_{\tilde{K}^g}^p - 2\alpha_{\tilde{K}}^p)$ est un terme de viscosité numérique correspondant à la discrétisation de $|\mathbf{v}_c| \frac{|K|}{2} \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2}$. Cette viscosité est contrôlée par $|K|$ et assure la stabilité de la méthode.

Remarquons enfin, qu'à l'ordre 0 en temps ($q = 0$), la méthode décrite par (2.100) est comparable à une méthode de Godunov pour les équations hyperboliques linéaires, à ceci près que notre méthode Galerkin discontinu est implicite. D'où sa stabilité pour tout pas de temps et d'espace, sans condition CFL.

Étude d'une translation

Pour cette première étude, le domaine Ω est réduit à l'intervalle $[0, 1]$. La vitesse \mathbf{v}_c est prise constante et égale à l'unité : $\mathbf{v}_c = 1$. La fonction α est initialement prise égale à $\mathbb{1}_{[0, 0.2]}$ de sorte que l'équation de transport étudiée s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 0 \\ \alpha(x, 0) = \mathbb{1}_{[0,0.2]} \quad \forall x \in [0, 1] \\ \alpha(0, t) = 0 \quad \forall t \in [0, 1] \end{cases} \quad (2.101)$$

La solution à cette équation est : $\alpha(x, t) = \mathbb{1}_{[t, t+0.2]}(x)$. Nous avons représenté sur la Figure 2.6 plusieurs valeurs moyennes de α_h sur l'intervalle de temps $[0.6, 0.8]$. Ces valeurs sont obtenues en utilisant notre méthode espace-temps Galerkin discontinu et en faisant varier certains paramètres. Ainsi, le pas d'espace $dx = |K|$ qui est constant, a été pris à $1/100$ et $1/500$, successivement ; le pas de temps dt vaut $1/100$ puis $1/50$; enfin, l'ordre d'approximation en temps q vaut 0 ou 1 (qui correspond à $P0$ et $P1$, respectivement dans la légende de la Figure 2.6).

Nous constatons une nette diminution de la diffusion des interfaces (éléments où α_h est comprise strictement entre 0 et 1) lorsque l'approximation $P1$ en temps est utilisée. Pour preuve, la solution obtenue avec une approximation $P1$ et $dx = 1/100$, $dt = 1/50$ diffuse moins que celle correspondant à une approximation $P0$ et $dx = 1/500$, $dt = 1/100$. D'autre part, la diffusion diminue notablement avec le raffinement du maillage (diminution du pas d'espace). C'est donc avec une approximation $P1$ en temps et avec $dx = 1/500$ que la "meilleure" solution est obtenue, puisque, dans ce cas, la valeur maximale de α_h est bien 1, et que donc la diffusion est fortement réduite par rapport aux autres simulations. Remarquons enfin que plus l'ordre d'approximation temporelle est élevé ($q = 1$ ou plus), plus le pas de temps peut être choisi grand (ici $1/50$) tout en maintenant la même qualité sur la solution obtenue.

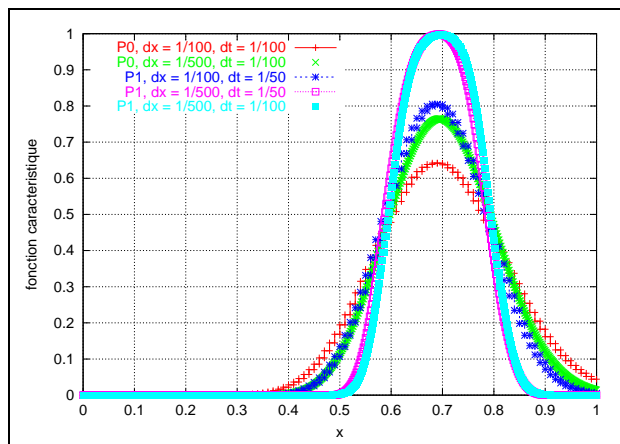
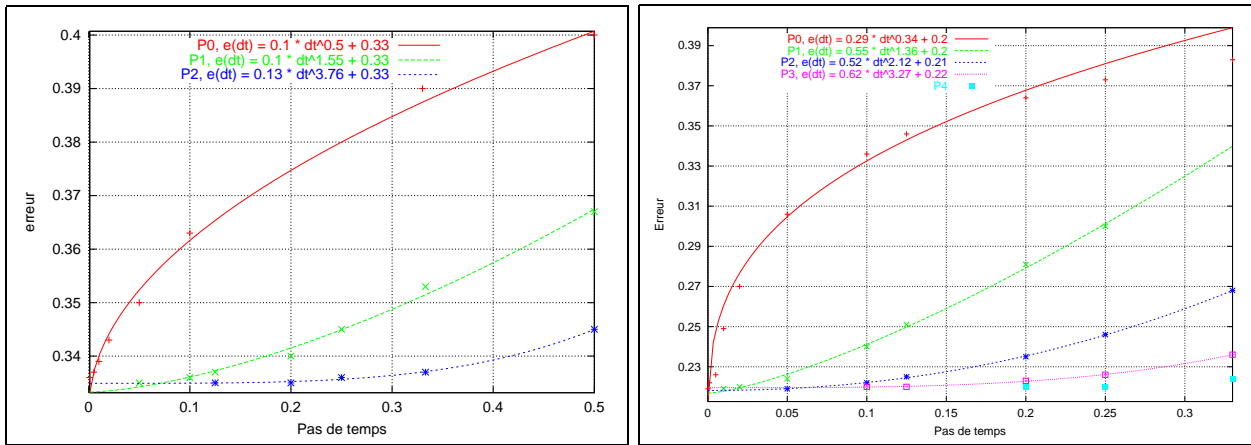


FIG. 2.6 – Transport 1D avec une vitesse $\mathbf{v}_c = 1$: fonction transportée au temps $t=0.6$ (solution analytique : $\alpha(x, 0.6) = \mathbb{1}_{[0.6,0.8]}$) Initialement la fonction vaut 1 sur l'intervalle $[0, 0.2]$ et est nulle ailleurs. Simulations avec divers pas d'espace dx , de temps dt et de degrés d'approximation temporelle ($P0$, $P1$)

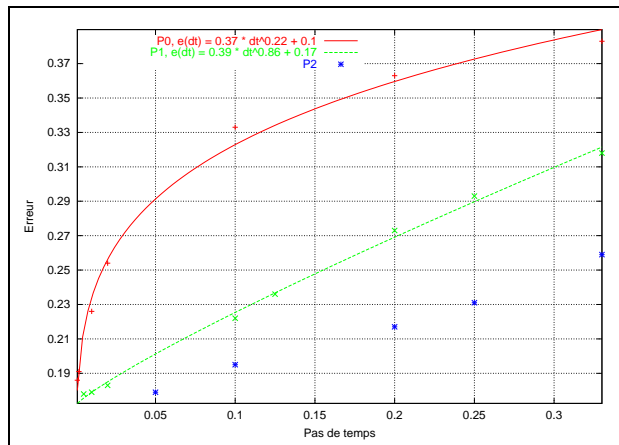
Afin de quantifier la description que nous venons de faire, nous avons tracé sur les Figures 2.7(a), 2.7(b) et 2.7(c) l'erreur e_h (voir définition (2.84)) obtenue pour le problème (2.101) en utilisant trois pas d'espace différents : $dx = 1/10$, $1/100$ et $1/500$ respectivement. Chacune de ces Figures montre l'évolution de l'erreur en fonction

du pas de temps et pour différents ordres d'approximation temporelle (P_0 , P_1 , P_2 , etc.)



(a) $\Delta x = 1/10$

(b) $\Delta x = 1/100$



(c) $\Delta x = 1/500$

FIG. 2.7 – Erreur d'approximation $e_h = \|\alpha - \alpha_h\|_{0,\tilde{\Omega}}$ de la fonction caractéristique lors de la translation d'un segment en 1D (voir expression (2.84)). Pour chacun des pas d'espace dx utilisés, l'erreur est tracée en fonction du pas de temps dt et pour plusieurs ordres d'approximation temporelle : P_0 , P_1 , etc. Les points correspondent à l'erreur calculée pour un pas de temps donné. Les courbes correspondent aux fonctions $adt^b + c(dx)$ utilisées pour représenter cette erreur.

Au vu des Figures 2.7(a), 2.7(b) et 2.7(c), nous écrivons l'erreur sous la forme : $e_h(|I|) = a|I|^b + c(dx)$ où c est l'erreur liée à la discrétisation spatiale (au pas d'espace). Nous constatons que pour une approximation P_0 en temps, l'exposant b est inférieur à 1. Puis, pour chaque ordre d'approximation supplémentaire en temps, nous gagnons un ordre sur b .

2.4.5.2 Transport pseudo-2D d'un cercle

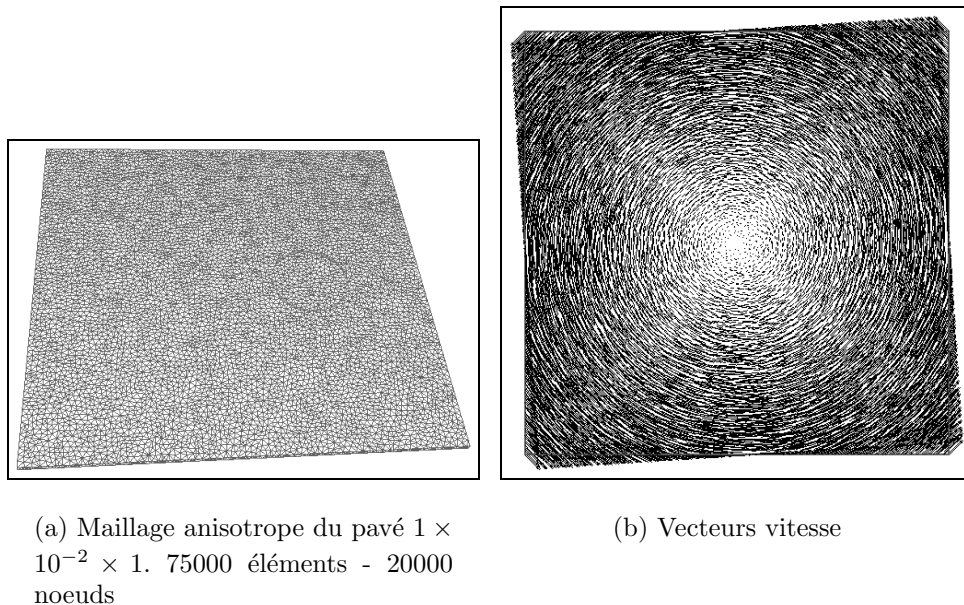


FIG. 2.8 – Cas pseudo-2D

Nous étudions à présent la rotation d'un cercle autour d'un axe. Ce cas est inspiré de [65]. Bien que la vitesse que nous imposons soit strictement 2D, nous utilisons un domaine 3D pour des raisons techniques : nous travaillons sur un code purement 3D qui ne gère pas le 2D. Le volume de calcul est donc le pavé de dimensions $1 \times 10^{-2} \times 1$ représenté sur la Figure 2.8(a). Un maillage anisotrope permet de mettre une seule couche d'éléments dans l'épaisseur, d'où un gain en terme de nombre d'éléments. Pour ces raisons nous qualifions ce test de pseudo-2D.

Initialement nous définissons un domaine cylindrique dans le volume de calcul, avec un rayon de 10^{-1} et une hauteur de 10^{-2} , comme indiqué sur la Figure 2.8(a). Nous étudions la rotation de ce domaine autour du point $(0.5, 5 \cdot 10^{-3}, 0.5)$, *i.e.* autour du centre du pavé. Pour ce faire, nous imposons la vitesse $\mathbf{v} = {}^t(v_x, v_y, v_z)$ suivante (Figure 2.8(b)) :

$$v_x(x, y, z) = -\frac{\pi}{2}\left(z - \frac{1}{2}\right) \quad v_y(x, y, z) = 0 \quad v_z(x, y, z) = \frac{\pi}{2}\left(x - \frac{1}{2}\right) \quad (2.102)$$

Dans la suite nous prenons $dt = |I| = 10^{-2}$, nous utilisons une approximation $P1$ en temps, et nous effectuons successivement 400 incréments de transport du domaine cylindrique afin que celui-ci effectue une révolution complète.

La Figure 2.9 montre la simulation d'une révolution complète effectuée sans adaptation de maillage. Nous avons représenté les isovaleurs du domaine complémentaire au cylindre. Nous constatons que le cylindre est bien transporté en ce sens qu'il effectue une rotation complète en 400 incréments et que son volume est préservé : il occupe $100 - 96.86 = 3.14$ % du volume total comme indiqué sur la Figure 2.9. Cependant la diffusion sur les interfaces est importante.

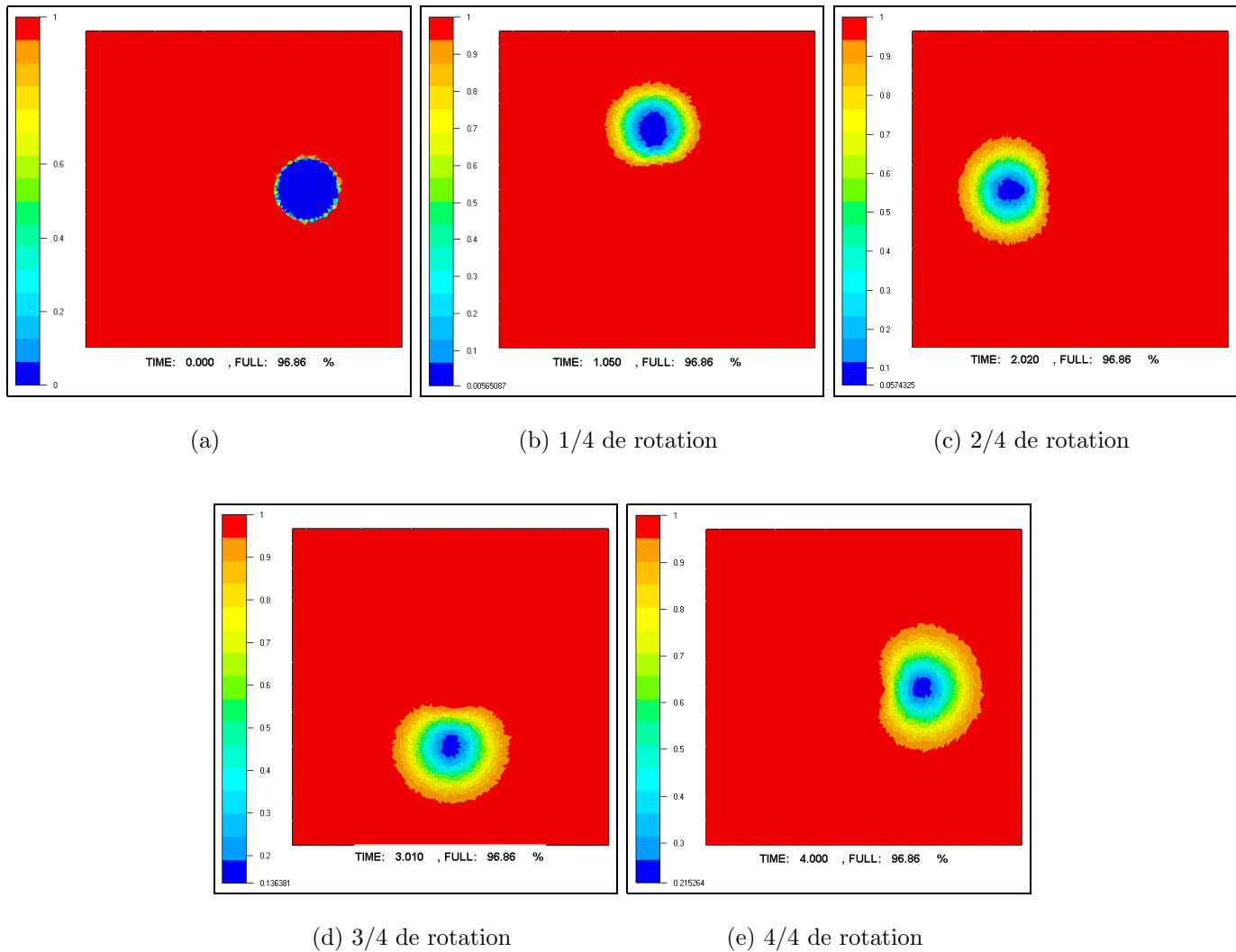
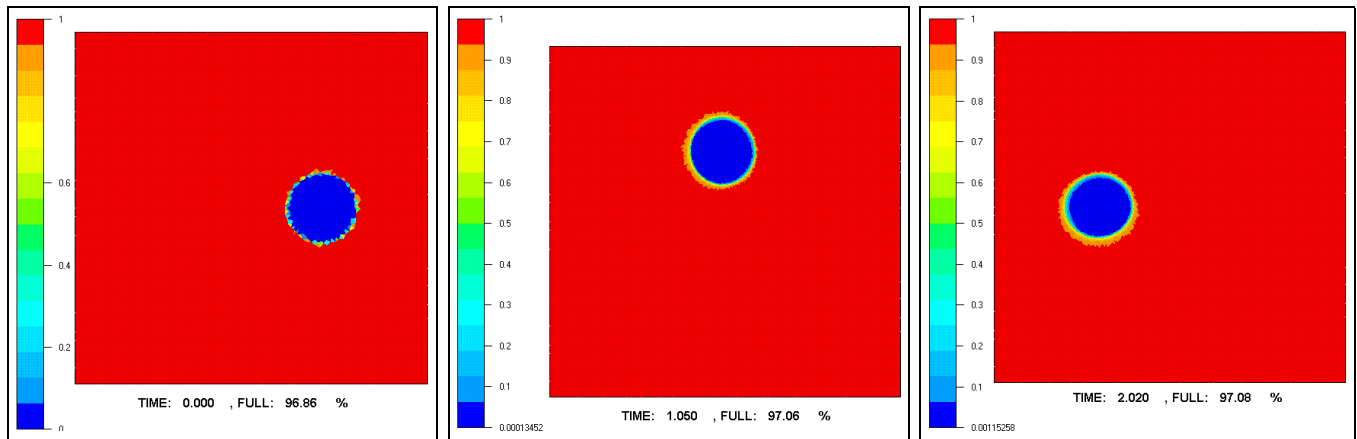


FIG. 2.9 – Rotation sans adaptation de maillage

Pour pallier cette diffusion, nous utilisons la r-adaptation de maillage précédemment décrite (paragraphe 2.4.4). La Figure 2.10 montre les résultats obtenus dans ce cas. La diffusion y est très sensiblement réduite, puisque l'on retrouve la forme du cylindre au bout de 400 incréments. Contrairement au cas passé sans adaptation de maillage, nous constatons sur la Figure 2.10 une diminution de 0.26% du volume du cylindre au cours des 400 incréments. Cette perte de matière a lieu essentiellement au cours des premiers incréments, car le maillage n'est pas pré-adapté à la forme du cylindre. Elle devient faible par la suite (0.06% de perte sur 300 incréments, entre la Figure 2.10(b) et la Figure 2.10(e)). De plus, dans l'étude de l'expansion d'une bulle de gaz, toute diminution du volume de la bulle sera compensée par une augmentation de sa pression. L'état thermodynamique du système reste ainsi inchangé.

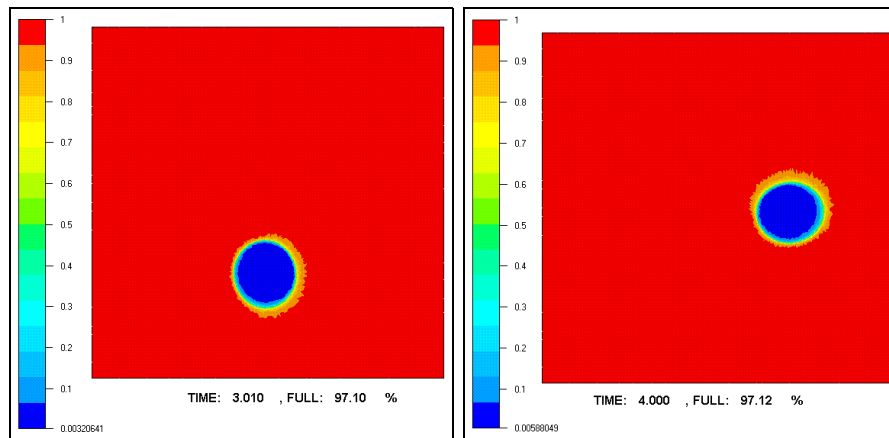
Par contre, due à cette adaptation de maillage, nous constatons 0.26% de perte de matière sur 400 incréments. Afin de visualiser l'effet de la r-adaptation de maillage, la Figure 2.11 montre l'évolution de ce maillage au cours de la rotation. Il est alors possible de suivre le parcours du cylindre en regardant cette évolution, du fait de la



(a)

(b) 1/4 de rotation

(c) 2/4 de rotation



(d) 3/4 de rotation

(e) 4/4 de rotation

FIG. 2.10 – Rotation avec adaptation de maillage

contraction des éléments aux interfaces.

2.4.5.3 Test de Zalesak

Le test de Zalesak consiste à simuler le transport d'un cercle entaillé par le champ stationnaire de vitesse (2.102). Le cercle a, dans nos simulations, un rayon valant les $4/5$ du côté du domaine de calcul, tandis que l'encoche réalisée dans ce cercle a une largeur égale à $1/10$ de ce côté. Différentes étapes de cette rotation sont représentées sur la Figure (2.12). Le maillage est celui présenté sur la Figure 2.8(a), le pas de temps est de 1.10^{-2} , et l'approximation utilisée en temps est du $P1$. Ainsi 400 incréments sont nécessaires pour effectuer une rotation de 2π radians.

Ce test de Zaleska est réputé ardu [65]. Nous constatons sur les Figures (2.12), une diffusion liée à la discrétisation spatiale (l'augmentation de l'approximation en temps ou la diminution du pas de temps ne diminuent pas cette diffusion). Néanmoins, la r-adaptation de maillage nous permet de conserver la forme initiale du domaine

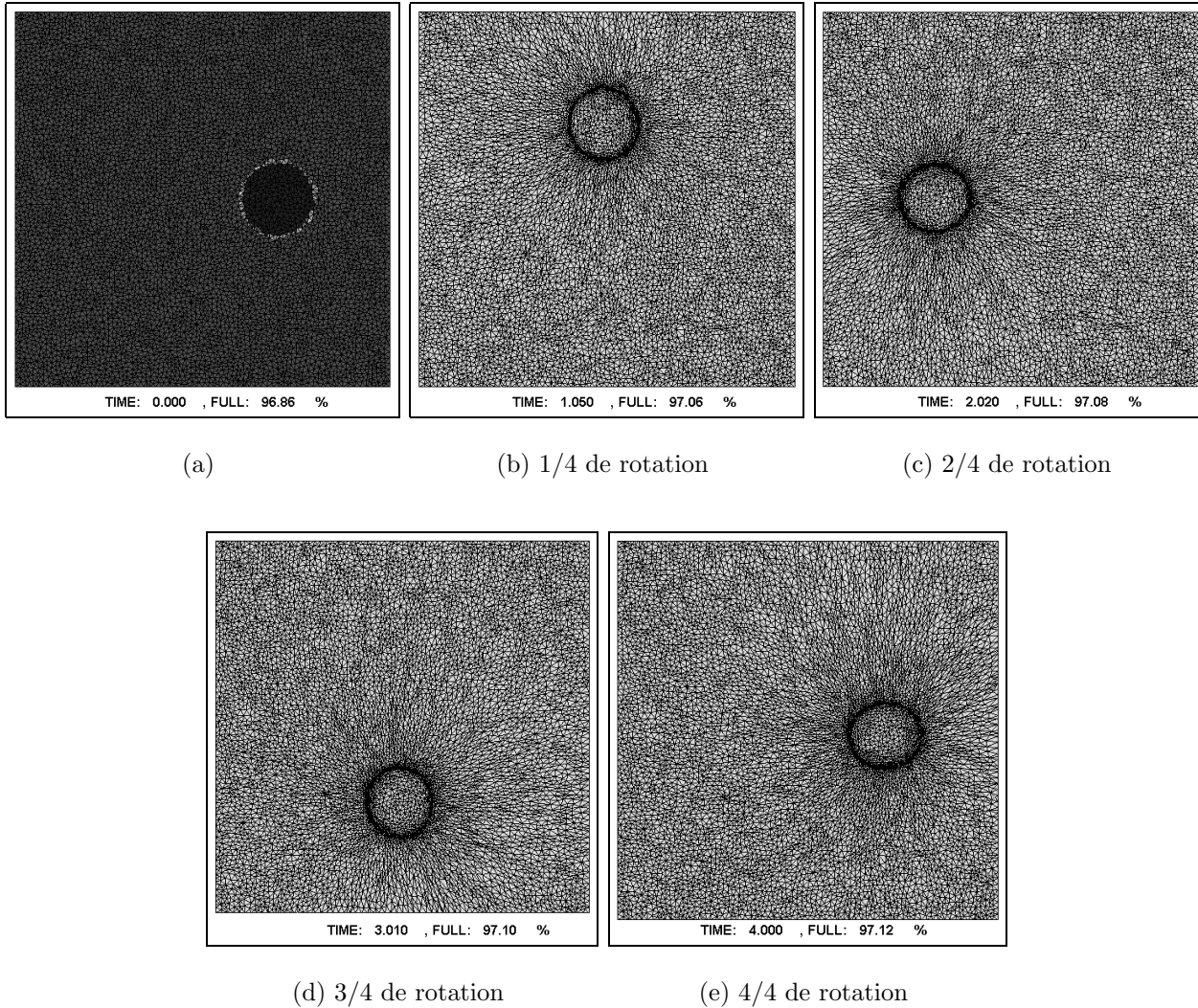


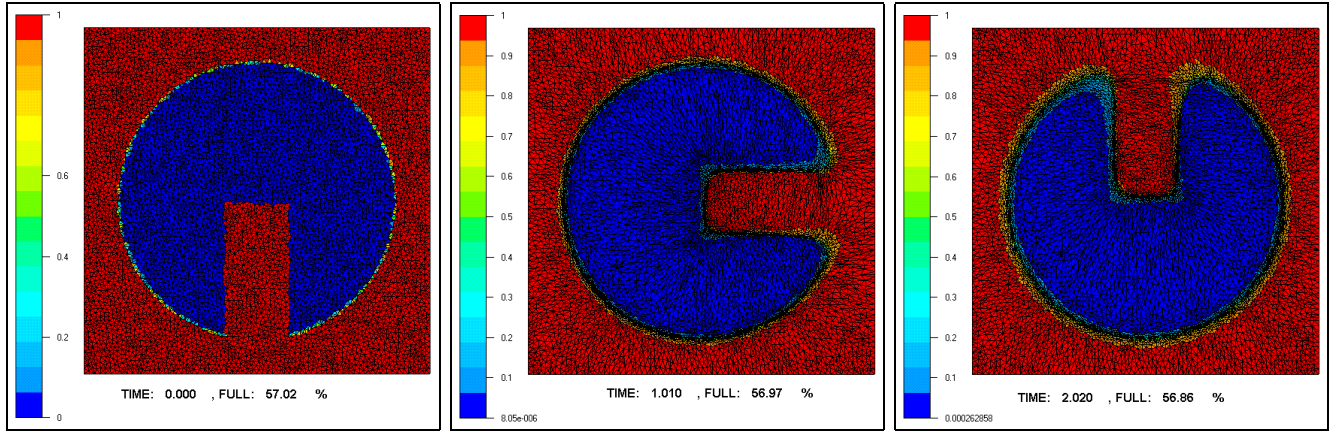
FIG. 2.11 – R-adaptation de maillage : contraction des éléments aux interfaces

transporté, et en particulier la forme de l'encoche. La perte de matière liée à cette technique de r-adaptation est de 0.46% sur 400 incréments.

2.4.5.4 Etude 3D de l'expansion d'une sphère

Dans les paragraphes et les chapitres qui suivent, nous aurons à simuler l'expansion de bulles de gaz dans un liquide. La vitesse d'expansion sera due à la différence entre la pression du gaz et la pression du milieu environnant. A ce stade, nous souhaitons étudier l'aptitude de notre méthode Galerkin discontinu à rendre compte de l'expansion d'une sphère, et ce, indépendamment de tout couplage liquide - gaz. Nous plaçons donc une sphère de rayon initial R_0 au centre du domaine de calcul cubique de côté 10^{-3} , comme montré sur la Figure 2.13. Nous définissons, dans ce cube, le champ de vitesse stationnaire suivant :

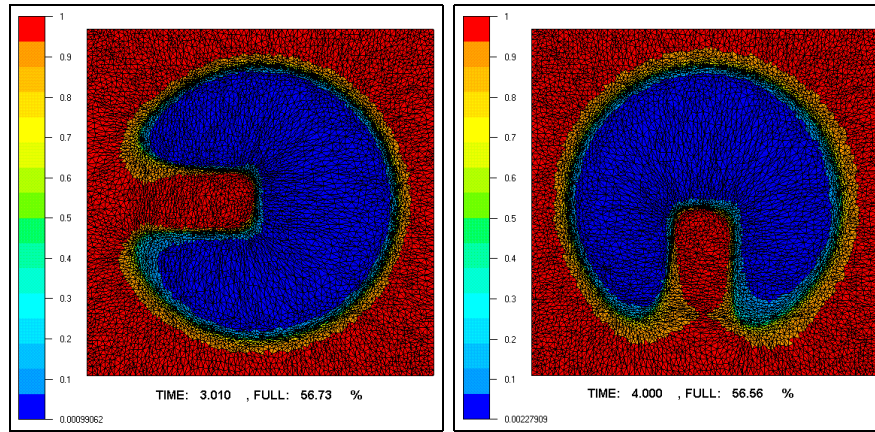
$$v_x(x, y, z) = L(x - c_x) \quad v_y(x, y, z) = L(y - c_y) \quad v_z(x, y, z) = L(z - c_z) \quad (2.103)$$



(a)

(b) 1/4 de rotation

(c) 2/4 de rotation



(d) 3/4 de rotation

(e) 4/4 de rotation

FIG. 2.12 – Test de Zalesak interfaces

\mathbf{v} est donc un homothétie de rapport $L = 1/10$ et de centre $C = {}^t(c_x, c_y, c_z)$ pris comme le centre du cube : $c_x = c_y = c_z = 5 \cdot 10^{-4}$. Le rayon de la sphère R peut être exprimé en fonction du temps comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dt} &= \mathbf{V}|_{Interface} \\ &= LR \end{aligned} \quad (2.104)$$

D'où :

$$\begin{aligned} R(t) &= R_0 e^{Lt} \\ V(t) &= V_0 e^{3Lt} \end{aligned} \quad (2.105)$$

où $V = 4\pi R^3/3$ est le volume de la sphère. Notons que le volume maximal d'une sphère dans un domaine cubique est 0.523 fois le volume de ce cube. Dans notre simulation, avec les données choisies, cette valeur est atteinte au temps $t = 9.77$.

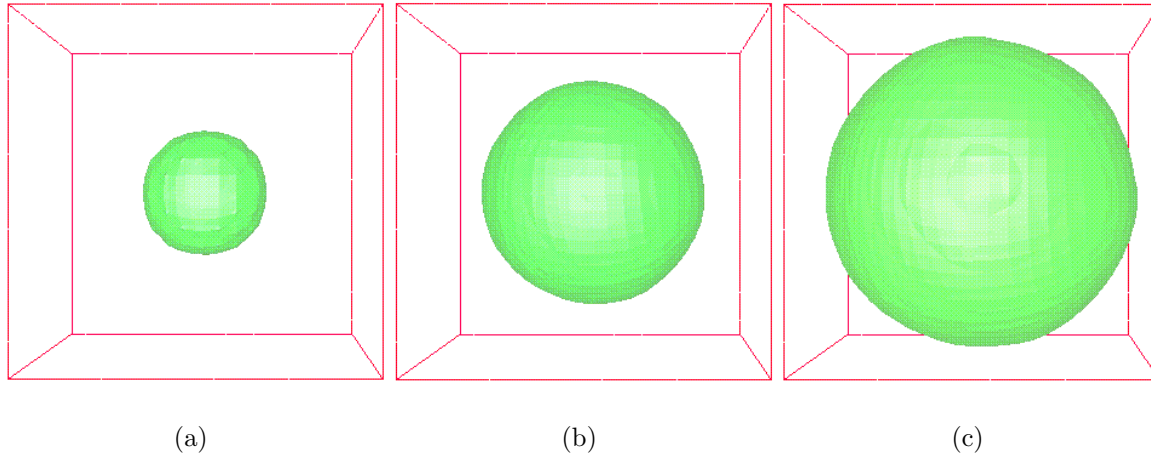


FIG. 2.13 – Expansion d'une sphère

Pour simuler l'expansion de la sphère nous utilisons un maillage structuré à 48 000 éléments et un pas de temps $dt = 2.10^{-2}$.

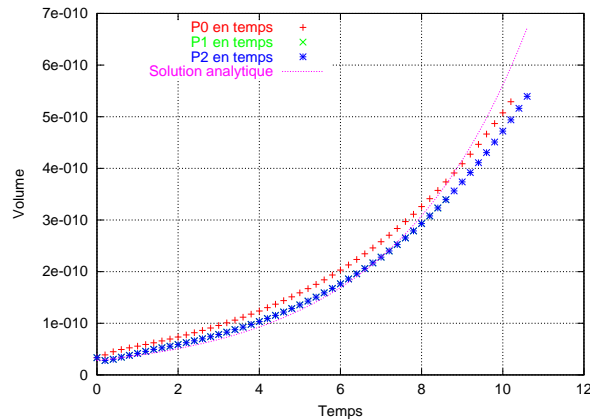


FIG. 2.14 – Expansion d'une sphère : évolution du volume. Comparaison entre solution analytique et simulations utilisant, respectivement, l'approximation $P0$, $P1$ et $P2$ en temps.

Sur la Figure 2.14 nous avons tracé, d'une part la valeur du volume de la sphère donnée par l'expression (2.105), et d'autre part, ce même volume donné par la simulation, pour des approximations temporelles d'ordre $P0$, $P1$ et $P2$ respectivement. Une bonne concordance est trouvée entre simulation et valeurs analytiques. L'écart constaté en fin de simulation ($t > 8$) s'explique par la proximité entre la surface de la bulle et le bord du cube. Du fait de la diffusion, la sphère commence à sortir du cube, d'où une sous-évaluation de son volume. Les volumes simulés en utilisant les approximations en temps $P1$ et $P2$ sont confondus et minimisent l'écart avec la solution analytique par rapport à l'approximation temporelle $P0$.

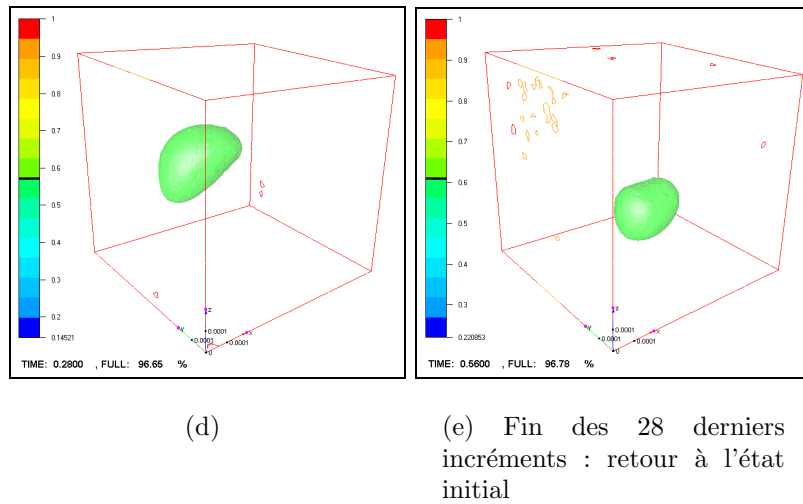
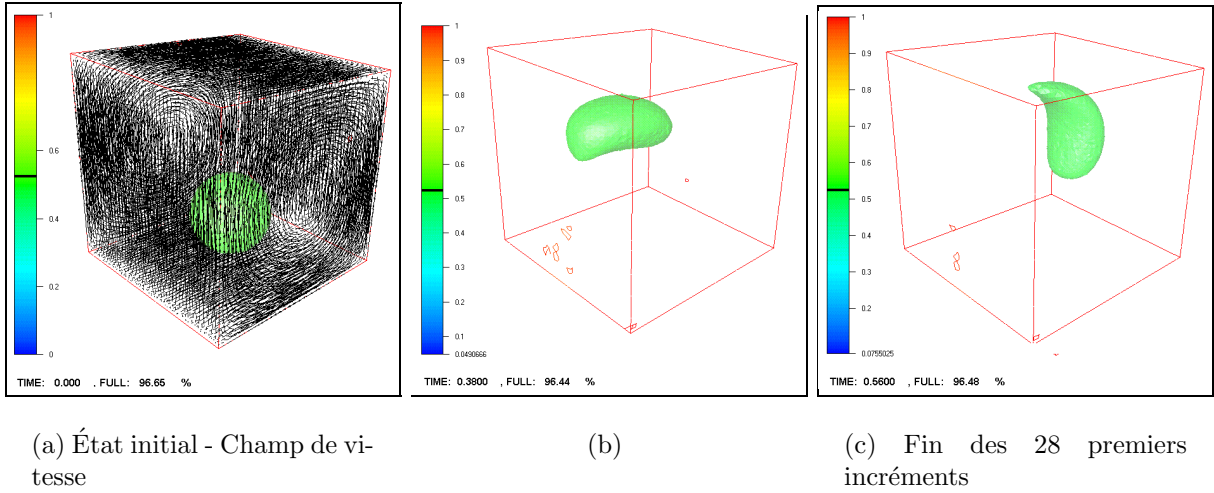


FIG. 2.15 – Déformation d'une bulle soumise à un champ de vitesse stationnaire durant 28 incréments puis au champ opposé durant 28 autres incréments

2.4.5.5 Etude d'un cas de déformation

Considérons la déformation d'une bulle soumise au champ de vitesse stationnaire suivant (voir Figure 2.15(a)) :

$$\begin{aligned}
 v_x(x, y, z) &= K \cos(\pi \cdot 10^3(x - c_x)) \sin(\pi \cdot 10^3(z - c_z)) \\
 v_y(x, y, z) &= 0 \\
 v_z(x, y, z) &= -K \sin(\pi \cdot 10^3(z - c_z)) \cos(\pi \cdot 10^3(x - c_x))
 \end{aligned} \tag{2.106}$$

où $K = \pi \cdot 10^{-3}$ dans nos simulations. Dans (2.106) le facteur 10^3 est du simplement aux dimensions du volume de calcul utilisé. La Figure 2.15(a) montre ce champ de vitesse ainsi que la position initiale de la bulle. Cette bulle est soumise, durant 28 incréments au champ de vitesse (2.106) (Figures 2.15(a), 2.15(b) et 2.15(c)), puis pendant 28 autres incréments au champ opposé $-\mathbf{v}$ (Figures 2.15(d) et 2.15(e)). Idéalement la bulle devrait donc recouvrir sa position et sa forme sphérique initiale.

En dépit du maillage fin utilisé (550 000 éléments), la forme de la Figure 2.15(e) diffère de la forme initiale. On constate notamment une diffusion assez importante de la bulle. Cependant, la déformation subie représente un cas extrême qui ne sera pas rencontré lors de l'étude des mousses.

2.5 Implémentation des méthodes numériques dans le code REM3D

Nous venons de développer une méthodologie nous permettant de simuler, par éléments finis, l'expansion d'une bulle de gaz dans un fluide pseudo-plastique. En synthétisant les paragraphes 2.3 et 2.4, une telle simulation se décompose comme suit.

Données initiales :

- Le maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$ correspondant au domaine de calcul
- La fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_{g0}}^h$ initiale de la bulle
- La pression initiale de la bulle p_{g0}
- Les données rhéologiques du polymère

Tant que critère d'arrêt non atteint

1. Intervalle de temps : I
2. Calcul de la vitesse de r-adaptation de maillage $\mathbf{v}_{a|I}$ en fonction de $\mathbb{1}_{\Omega_l|I}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g|I}^h$
3. Calcul de la vitesse $\mathbf{v}_{h|I}$ et de la pression $p_{h|I}$ en résolvant le système (2.50) et en fonction de $\mathbb{1}_{\Omega_l|I}^h$, $\mathbb{1}_{\Omega_g|I}^h$ et $p_{g|I}$.
4. Calcul de $\mathbb{1}_{\Omega_l|I^+}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g|I^+}^h$ en résolvant le système (2.77) et en fonction de $\mathbb{1}_{\Omega_l|I}^h$, $\mathbb{1}_{\Omega_g|I}^h$, $\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_{h|I} - \mathbf{v}_{a|I}$
5. Mise à jour du maillage : $N_{|I^+} = N_{|I} + |I| \mathbf{v}_{a|I}$ pour chaque noeud N du maillage
6. Calcul de $p_{g|I^+}$ en fonction de $p_{g|I}$, $V_{|I}$ le volume de la bulle sur I et de $V_{|I^+}$
7. $I \leftarrow I^+$

Fin tant que

Le critère d'arrêt peut être de différente nature. Ce peut être un critère sur le taux de gaz : on souhaite atteindre un certain taux de gaz. Ce peut être également un critère sur la variation de volume de gaz : quand l'expansion devient négligeable on s'arrête.

Deux points doivent être précisés. Tout d'abord l'étape numéro 3. Puisque les fonctions caractéristiques sont calculées dans un cadre espace-temps, *i.e.* en les considérant sur un intervalle de temps I et non pas en des instants particuliers, il doit en être de même pour la vitesse et la pression. Ainsi, la formulation variationnelle

(2.50) doit être également envisagée dans un contexte espace-temps. Nous choisissons de plus \mathbf{v}_h et p_h constants sur chaque intervalle de temps. Il en résulte que se placer dans un cadre espace-temps revient simplement à intégrer le système (2.50) sur l'intervalle de temps I . \mathbf{v}_h et p_h étant constants sur I , cela revient à prendre la valeur moyenne sur I de $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ dans (2.50).

Ceci a une conséquence immédiate sur la quantité d'information à stocker pour utiliser les fonctions caractéristiques. En effet, avec une approximation temporelle d'ordre q , il est nécessaire de stocker, en toute généralité $(q+1) \times NbElt$ coefficients $\alpha_{\tilde{K}}^p$ pour évaluer une fonction caractéristique en un instant $t \in I$. De plus, le calcul de ces coefficients par résolution du système (2.77) nécessite d'avoir stocké, sur chaque élément du maillage le second membre $\sum_{p=0}^q \alpha_{\tilde{K}^-}^p |I^-|^p$.

Ainsi, sur chaque intervalle de temps, l'utilisation d'une fonction caractéristique nécessite de stocker $(q+2) \times NbElt$ valeurs. Si, à présent, seule la valeur moyenne de cette fonction est utilisée dans le solveur mécanique, le stockage des $(q+1) \times NbElt$ coefficients $\alpha_{\tilde{K}}^p$ devient superflu. Il est possible de se limiter au stockage des $NbElt$ valeurs moyennes de la fonction sur I . En définitive, le coût mémoire de l'utilisation d'une fonction caractéristique passe à $2 \times NbElt$ valeurs. Considérant qu'une simulation utilise deux fonctions caractéristiques (du liquide et du gaz), le coût mémoire est de $4 \times NbElt$ valeurs.

L'autre point à développer est le numéro 6 concernant le calcul de p_g . Une fois que la fonction caractéristique du gaz $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ est déterminée sur I^+ , on obtient le volume moyen de la bulle sur I^+ par :

$$V_{|I^+} = \frac{1}{|I^+|} \sum_{K \in \mathcal{T}_h(\Omega)} |K| \sum_{p=0}^q \frac{|I^+|^{p+1}}{p+1} \alpha_{\tilde{K}}^p \quad (2.107)$$

La pression $p_{g|I^+}$ est alors donnée par :

$$p_{g|I^+} = \frac{V_I}{V_{|I^+}} p_{g|I} \quad (2.108)$$

Cette méthodologie a été implémentée dans le code de calcul **REM3D**. Ce code, développé initialement pour l'injection de polymère [50] utilise l'élément fini $P1+/P1$ pour la partie mécanique. Nous avons donc ajouté, au niveau des matrices locales, le calcul des termes liés au gaz dans (2.50). De plus, ce logiciel utilisait originalement une méthode de type Taylor - Galerkin discontinu explicite pour résoudre l'équation de transport. Nous avons donc implémenté la méthode espace-temps Galerkin discontinu dans le code **REM3D** en utilisant le langage $C++$.

2.6 Expansion d'une bulle de gaz dans une matrice liquide

Nous considérons l'expansion d'une bulle sphérique de gaz dans un liquide pseudo-plastique. Ce cas représente l'expansion d'une cellule de mousse décrite par les

modèles cellulaires [3]. Dans la suite de cette partie, nous décrivons d'abord un modèle micro-mécanique rendant compte de cette expansion. Ceci nous permettra d'obtenir, sous certaines conditions, des expressions analytiques du volume et de la pression de la bulle. Nous confronterons alors nos simulations d'expansion de bulle à ces résultats analytiques.

2.6.1 Modèle micro-mécanique de l'expansion d'une cellule

Nous considérons l'expansion d'une bulle de gaz dans un milieu liquide infini. La viscosité η_0 de ce liquide est supposée constante.

Nous nous plaçons en coordonnées sphériques : soit un repère sphérique (O, r, ϕ, ψ) , où O est le centre de la bulle. Nous avons une symétrie radiale. Ainsi, les grandeurs physiques ne dépendent que de la première coordonnée r .

Le rayon initial de la bulle est noté R_0 , avec un volume correspondant V_0 et une pression p_{g0} . Notons $\mathbf{v} = {}^t(u, 0, 0)$ et p les champs vitesse et pression définis dans le liquide. L'incompressibilité du polymère s'écrit, en coordonnées sphériques :

$$\frac{du}{dr} + 2\frac{u}{r} = 0 \quad (2.109)$$

Ce qui, compte-tenu de la condition à la surface de la bulle $u(R) = dR/dt = \dot{R}$, conduit à :

$$u(r) = \frac{\dot{R}R^2}{r^2} \quad (2.110)$$

Tenant compte de la symétrie sphérique, la conservation de la quantité de mouvement fournit, en coordonnées sphériques, l'équation scalaire :

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{1}{r}(2\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi}) = 0 \quad (2.111)$$

à laquelle sont adjointes les conditions aux bords suivantes :

$$\begin{cases} \sigma_{rr}(R) & = -p_g \\ \sigma_{rr}(+\infty) & = -p_{ext} \end{cases} \quad (2.112)$$

Le tenseur de Cauchy s'exprime dans le liquide par : $\sigma = 2\eta_0\varepsilon(\mathbf{v}) - pI$. L'expression (2.110) permet de calculer le tenseur des vitesses de déformation :

$$\varepsilon(\mathbf{v}) = \frac{\dot{R}R^2}{r^3} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.113)$$

En conséquence, l'Equation (2.111) devient :

$$\frac{dp}{dr} = 0 \quad (2.114)$$

Sachant, d'après (2.110) et (2.112) que $p(+\infty) = p_{ext}$, nous avons dans le liquide :

$$p(r) = p_{ext} \quad (2.115)$$

Reste à déterminer \dot{R} . Ceci se fait en considérant la première condition de (2.112) exprimant la contrainte en $r = R$:

$$\sigma_{rr}(R) = -4\eta_0 \frac{\dot{R}}{R} - p_{ext} = -p_g \quad (2.116)$$

Ainsi, en résumé, nous venons de démontrer le résultat suivant : la vitesse radiale $u(r)$ et la pression $p(r)$ sont définies, dans le liquide pour $r > R$ par

$$\boxed{\begin{cases} u(r) &= \frac{\dot{R}R^2}{r^2} \\ p(r) &= p_{ext} \\ \frac{\dot{R}}{R} &= \frac{\Delta p}{4\eta_0} \end{cases}} \quad (2.117)$$

où $\Delta p = p_g - p_{ext}$

Ce résultat important sera utilisé par la suite, et appelle quelques commentaires. Tout d'abord remarquons l'absence de cisaillement. Ensuite, l'Equation (2.115) signifie que la pression n'a pas besoin d'être conduite dans le polymère qui voit p_{ext} dans toute l'épaisseur du fluide. L'interface liquide - gaz est donc une surface de discontinuité de la pression. Néanmoins, la contrainte normale est, elle, continue sur cette interface. Ceci est valide parce que le problème est purement radial.

La vitesse d'expansion locale ne dépend donc que de la différence de pression locale, qui est aussi la différence de pression globale. L'échelle des calculs peut ainsi être fixée par les fluctuations de pression Δp .

Pour déterminer complètement le rayon R , nous devons exprimer p_g en fonction de ce rayon. Nous distinguons deux cas : soit la pression de la bulle p_g est constante, soit elle obéit à la loi des gaz parfaits.

2.6.1.1 Pression du gaz constante

Si $p_g(t) = p_{g0}$, le rayon défini dans (2.117) s'écrit :

$$\boxed{R(t) = R_0 \exp\left[\frac{\Delta p}{4\eta_0} t\right]} \quad (2.118)$$

2.6.1.2 Loi des gaz parfaits

Nous avons $p_g V = p_{g0} V_0$, soit $p_g = p_{g0} R_0^3 / R^3$. Ainsi, le rayon vérifie l'équation suivante :

$$4\eta_0 \dot{R} R^2 + p_{ext} R^3 = p_g^0 R_0^3 \quad (2.119)$$

En considérant p_{ext} non nulle, R s'exprime par :

$$R(t) = R_0 \left(\left(1 - \frac{p_{g0}}{p_{ext}}\right) \exp\left[\frac{-3p_{ext}}{4\eta_0} t\right] + \frac{p_{g0}}{p_{ext}} \right)^{1/3} \quad (2.120)$$

Lorsque p_{ext} s'annule, R s'exprime par :

$$R(t) = R_0 \left(1 + \frac{3p_{g0}}{4\eta_0} t\right)^{1/3} \quad (2.121)$$

2.6.2 Simulation de l'expansion d'une cellule

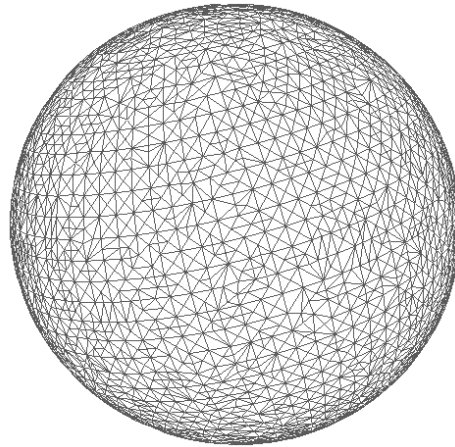


FIG. 2.16 – Domaine de calcul sphérique utilisé lors de la simulation de l'expansion d'une bulle de gaz. 40000 noeuds, 210000 tétraèdres

Nous simulons à présent l'expansion isotherme d'une bulle de gaz dans une matrice polymère en utilisant la méthodologie développée au paragraphe 2.2. Nous choisissons un volume de calcul Ω sphérique de diamètre 1.10^{-3} m. Nous le discrétisons par un maillage composé d'éléments tétraédriques (Figure 2.16). Nous définissons deux domaines : un domaine liquide Ω_l et une bulle de gaz Ω_g placée au centre de Ω . Les simulations présentées sur la Figure 2.17 ont été réalisées avec les données suivantes :

- $R_0 = 10^{-4}$ m
- $p_{g0} = 200$ Pa
- $p_{ext} = 0$ Pa

- $\eta_0 = 1000$ Pa.s

auxquelles s'ajoutent, dans le cas où la viscosité η du liquide suit une loi de Carreau (2.24), le temps caractéristique λ et l'indice de pseudo-plasticité m suivants :

- $\lambda = 3,1489 \cdot 10^{-3}$ s
- $m = 0,7$

Rappelons que la bulle croît par différence de pression $p_g - p_{ext}$, et que la matière s'écoule librement à travers la frontière $\partial\Omega$ du domaine de calcul. Avant de présenter les résultats, nous précisons deux points : l'échelle du domaine Ω , et le calcul du pas de temps.

2.6.2.1 Échelle spatiale - Échelle temporelle

Le modèle analytique développé au paragraphe 2.6.1 établit une relation entre la vitesse d'expansion \dot{R} d'une bulle, donc le temps d'expansion, et les fluctuations $\Delta p = p_g - p_{ext}$. Ces fluctuations dépendent de la position considérée au sein de la mousse (plus ou moins loin du front de matière, par exemple). $p_g - p_{ext}$ est donc une donnée mesurable extérieure à notre modèle (en ce sens qu'elle relève d'une approche macroscopique de la mousse) qui fixe l'échelle temporelle de nos simulations.

Pour fixer l'échelle spatiale nous pouvons utiliser un argument physique en considérant une densité de bulle dans une mousse réelle. Cette densité fournit un nombre de bulles par mètre cube. Notre volume de calcul ne contenant qu'une bulle, nous en déduisons ses dimensions. Utilisant cet argument, l'échelle du volume de calcul dépend du nombre de bulles qu'il contient : plus ce nombre est élevé, et plus l'échelle est grande.

Cependant, le raisonnement reste valide si la densité de bulles fournit un nombre de bulles par unité de volume. La dimension des bulles et de l'espace les séparant n'est alors pas fixé. Dans nos calculs, et tant que nous considérons des cas isothermes, la dimension d'espace, même avec une densité de bulles, n'est définie qu'à un facteur près. Ceci revient à considérer l'invariance de la structure par changement d'échelle.

2.6.2.2 Calcul du pas de temps

La méthode Galerkin discontinu développée au paragraphe 2.4 étant implicite, le choix du pas de temps n'est pas lié à une condition de stabilité, mais dépend de la précision souhaitée sur les résultats et des phénomènes physiques mis en jeu. Il se peut également que le temps caractéristique des phénomènes simulés varie entre le début et la fin d'une simulation. Une telle simulation nécessite alors une variation du pas de temps pour s'effectuer en un temps optimal. Ainsi, lors de la croissance d'une bulle, la vitesse d'expansion est beaucoup plus importante dans les premiers instants, lorsque la différence $p_g - p_{ext}$ est importante, qu'à la fin, lorsque cette différence tend à s'annuler. Nous souhaiterions donc avoir des petits pas de temps en début d'expansion, afin d'être précis lors du calcul de l'évolution de la bulle. Par contre, en fin d'expansion, la même précision peut être obtenue avec des pas de temps plus grands, puisque l'expansion est plus lente.

Soit un intervalle de temps I . Nous connaissons la vitesse \mathbf{v} et le volume $|\Omega_g|$ de la bulle sur cet intervalle. Considérons l'intervalle de temps suivant, I^+ . Nous voulons déterminer la longueur de cet intervalle de façon à contrôler la variation du volume $|\Omega_g|$, *i.e.* à avoir :

$$||\Omega_g|_{|I^+} - |\Omega_g|_{|I}| = \varepsilon_V |\Omega_g|_{|I} \quad (2.122)$$

où ε_V est un paramètre donné.

Nous ne connaissons pas explicitement le volume de la bulle sur I^+ . Ce volume est en effet déduit de la fonction caractéristique de la bulle, dont les valeurs sur I^+ dépendent du pas de temps $|I^+|$!

Il est par contre possible de prévoir le volume de la bulle sur I^+ . En se référant à l'Annexe B nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{d|\Omega_g|}{dt} &= \int_{\partial\Omega_g} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \\ &= \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v} \end{aligned} \quad (2.123)$$

Nous basant sur (2.123), nous obtenons :

$$|\Omega_g|_{|I^+} \approx |\Omega_g|_{|I} + |I^+| \int_{\Omega_{g|I}} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.124)$$

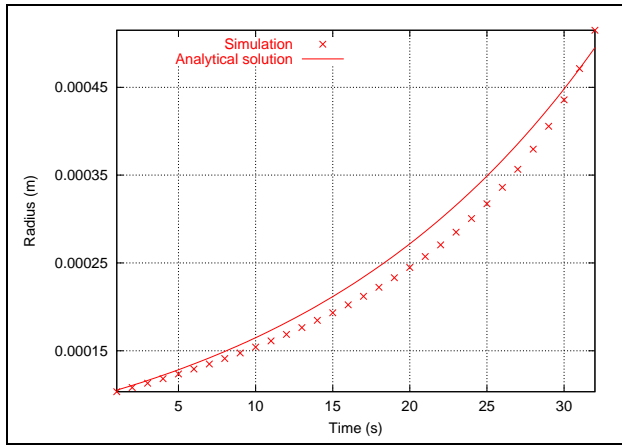
En tenant compte de l'expression (2.124) dans (2.122), nous avons la formule suivante nous donnant le pas de temps $|I^+|$:

$$\boxed{|I^+| = \frac{|\Omega_g|_{|I}}{\int_{\Omega_{g|I}} \nabla \cdot \mathbf{v}}} \varepsilon_V \quad (2.125)$$

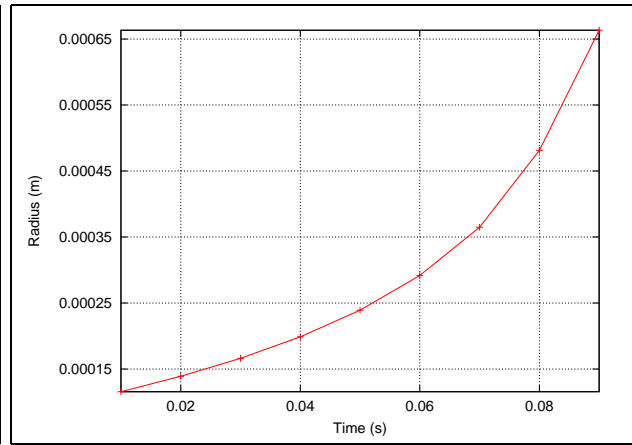
Cette approche fournit un pas de temps croissant au fur et à mesure que l'expansion ralentit. Dans la pratique nous limitons, à chaque incrément, l'augmentation du pas de temps afin que celui-ci ne prennent pas des valeurs inconsidérées en fin d'expansion. En effet, en fin d'expansion, le raisonnement ci-dessus ne peut plus être appliqué, vu que le volume $|\Omega_g|$ ne peut pas augmenter de la façon exprimée par l'Equation (2.122).

2.6.2.3 Résultats

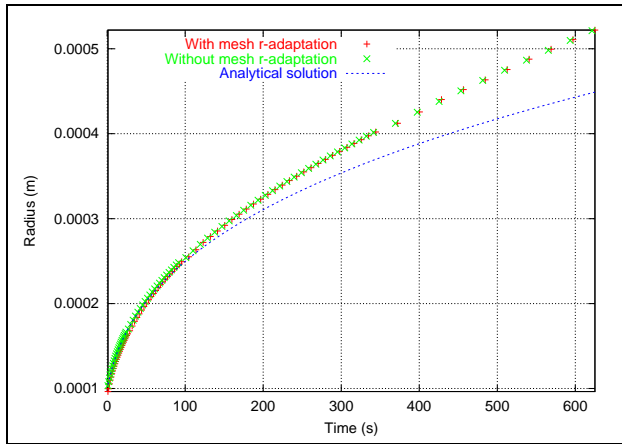
Nous avons tracé, sur la Figure 2.17 l'évolution du rayon de la bulle lors de son expansion. Quatre simulations ont été réalisées : deux considérant une pression du gaz constante et, successivement, un liquide newtonien (c.f. Figure 2.17(a)) et un liquide dont la viscosité suit une loi de Carreau (Figure 2.17(b)) ; deux considérant



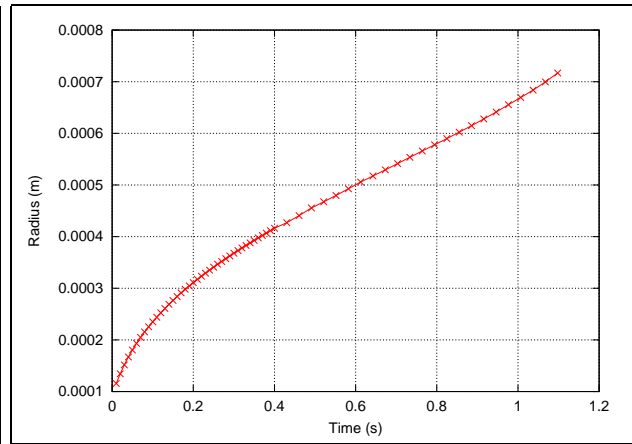
(a) Pression du gaz constante et liquide newtonien



(b) Pression du gaz constante et loi de Carreau



(c) Loi des gaz parfaits et liquide newtonien



(d) Loi des gaz parfaits et loi de Carreau

FIG. 2.17 – Simulation de l'expansion d'une bulle : rayon en fonction du temps. Courbes du haut : pression du gaz constante, liquide newtonien (gauche, avec comparaison à l'expression (2.118)) et liquide pseudo-plastique (droit). Bas : pression du gaz suivant la loi des gaz parfaits, liquide newtonien (gauche, avec comparaison à l'expression (2.121)) et liquide pseudo-plastique (droit)

un gaz parfait et faisant les mêmes distinctions pour le liquide (Figures 2.17(c) et 2.17(d)).

Remarquons que le rayon final de la bulle excède celui du domaine de calcul. Ceci vient du fait que nous utilisons une technique d'expansion du domaine de calcul que nous décrirons au prochain chapitre. Disons seulement que le domaine de calcul croît en même temps que la bulle de manière à préserver la quantité de liquide qu'il contient.

Les simulations à pression du gaz constante (Figures 2.17(a) et 2.17(b)) fournissent un rayon de la bulle dépendant du temps de façon exponentielle comme prévu par

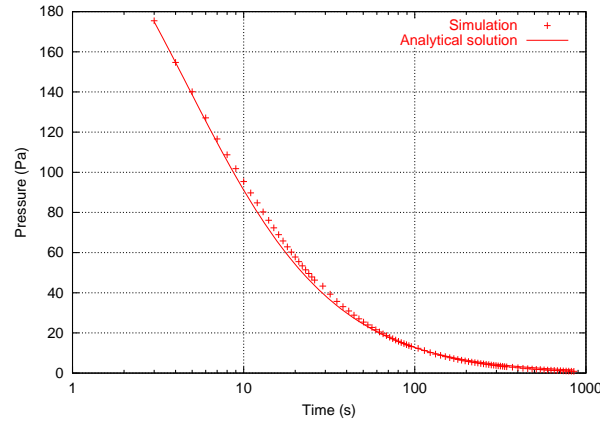


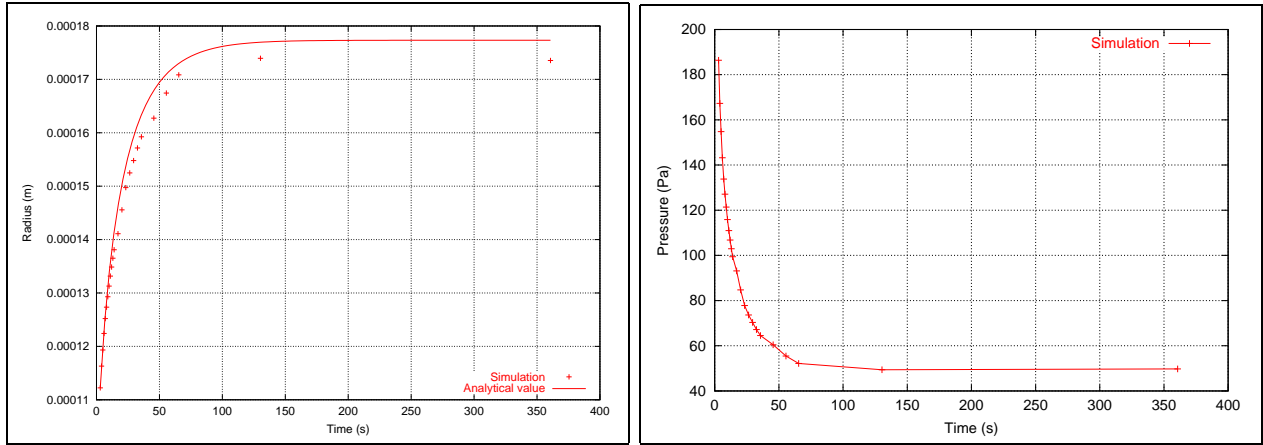
FIG. 2.18 – Simulation de l’expansion d’une bulle dans un liquide newtonien : pression du gaz en fonction du temps, avec échelle logarithmique en temps. Comparaison entre modèle analytique et simulation

le modèle analytique (Equation 2.118). De plus, lorsque le liquide est newtonien, une bonne concordance est obtenue entre le rayon prédit par la simulation (Figure 2.17(b)) et le rayon du modèle analytique (Equation 2.118).

Les simulations où la pression de la bulle obéit à une loi des gaz parfaits (Figures 2.17(c) et 2.17(d)) montrent un rayon de la bulle dépendant du temps à l’exposant $1/3$, conformément au modèle analytique (2.121). Dans le cas newtonien, une bonne concordance est trouvée entre valeurs simulées et valeurs du modèle analytique, comme indiqué sur la Figure 2.17(c). Cette Figure montre également que l’adaptation de maillage ne perturbe pas l’expansion de la bulle. La différence trouvée en fin de simulation avec le modèle analytique est due à la présence de la frontière $\partial\Omega$ du domaine de calcul. L’évolution de la pression de la bulle durant cette expansion est présentée sur la Figure 2.18.

Remarquons enfin que dans les simulations 2.17(b) et 2.17(d), la dépendance de la viscosité du liquide au taux de cisaillement entraîne une diminution du temps d’expansion. La viscosité du liquide obéissant à une loi de Carreau est en effet inférieure à la consistance η_0 utilisée dans les cas newtoniens. Le taux d’expansion est maximal durant les premiers instants de la croissance, lorsque la norme du tenseur des vitesses de déformation est maximale et la viscosité du liquide minimale.

Pour conclure, nous présentons sur la Figure 2.19(a) l’évolution du rayon de la bulle, lorsque celle-ci croît dans un liquide newtonien, que sa pression suit une loi des gaz parfaits, et que, contrairement aux cas précédents, p_{ext} est non nulle. Ici $p_{ext} = 50 Pa$. Dans ce cas le rayon atteint une valeur maximale $R_{max} = R_0(p_{g_0}/p_{ext})^{1/3}$. Une bonne concordance est trouvée entre l’évolution du rayon de la bulle simulée et l’expression analytique du rayon (2.120).



(a) Rayon

(b) Pression

FIG. 2.19 – Simulation de l'expansion d'une bulle dans un liquide newtonien avec pression extérieure non nulle : rayon et pression de la bulle en fonction du temps.

2.7 Couplage thermo-mécanique

Afin de parachever notre modèle, nous introduisons le couplage thermo-mécanique lors de l'expansion d'une bulle dans une matrice polymère. L'équation d'évolution de la température sera d'abord établie dans le polymère, la température de la bulle étant vue comme une condition au bord. L'évolution de cette dernière sera alors définie en considérant la conservation de l'énergie dans la bulle. Les équations du problème thermique seront résolues par une méthode éléments finis. Cette méthode est une extension de l'approche espace-temps Galerkin discontinu à un cas de convection - diffusion. Enfin, l'expansion anisotherme d'une bulle sera étudiée.

2.7.1 Construction du modèle physique

Considérons le domaine Ω de la Figure 2.1, contenant une matrice liquide Ω_l et une bulle de gaz Ω_g . Le couplage thermo-mécanique s'effectue, d'une part au niveau de la rhéologie du liquide, en faisant dépendre sa viscosité de la température, et d'autre part en considérant la loi anisotherme des gaz parfaits. Dans nos simulations nous considérons que la masse volumique du polymère ne dépend pas de la température. La viscosité η d'un polymère diminue avec une augmentation de sa température. Pour traduire ce phénomène nous utilisons une loi d'Arrhénius [1] :

$$\eta(T) = \eta_0 \exp\left[\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \quad (2.126)$$

où E est une énergie d'activation, de l'ordre de 10^4 J.mole^{-1} pour les polymères liquides usuels [1], R est la constante des gaz parfaits, et T_0 la température de référence à laquelle est mesurée la consistance η_0 . Afin de tenir compte du caractère pseudo-plastique du polymère, il est possible de combiner l'expression (2.126) avec une loi de Carreau (2.24).

Classiquement [1], en considérant le polymère incompressible, l'équation d'évolution de la température dans Ω_l s'écrit :

$$\boxed{\begin{cases} \rho_l c_l (\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T) &= 2\eta \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(\mathbf{v}) - \nabla \cdot \phi \\ \phi &= -k_l \nabla T \end{cases} \quad \forall (x, t) \in \Omega_l(t) \times [0, \Theta]}$$

(2.127)

où ϕ est le flux thermique, k_l la conductivité thermique (loi de Fourier), c_l la chaleur spécifique (rapport de l'énergie absorbée sur la variation de température).

Ce système est fermé par une condition initiale et des conditions sur la frontière $\partial\Omega_l = \partial\Omega \cup \partial\Omega_g$. Sur le bord du domaine de calcul $\partial\Omega$, deux conditions peuvent être considérées : en température imposée ou en flux imposé. La condition sur $\partial\Omega_g$ traduit le couplage thermique effectué entre le liquide et le gaz.

Le transfert thermique par conduction entre le polymère et le gaz est négligé devant le transfert par convection [1]. En conséquence, la condition sur le bord $\partial\Omega_g$ exprime la proportionnalité du flux thermique entre le liquide et le gaz avec la différence de température entre ces deux milieux. Le coefficient de proportionnalité h_c s'appelle de coefficient de transfert convectif. Ainsi :

$$\boxed{\phi \cdot \mathbf{n}_l = -k_l \nabla T \cdot \mathbf{n}_l = h_c (T - T_g) \quad \forall x \in \partial\Omega_g}$$

(2.128)

où \mathbf{n}_l est la normale à Ω_g extérieure à Ω_l . La température T_g de la bulle de gaz est homogène dans cette bulle, et dépend du volume et de la pression de la bulle, ainsi que de la température du polymère qui l'entoure.

2.7.1.1 Comportement anisotherme d'une bulle de gaz

Nous supposons que le nombre de moles n_g contenu dans la bulle Ω_g est constant. La loi des gaz parfaits exprime la masse volumique de Ω_g comme : $\rho_g = \mathcal{M} p_g / RT_g$ (voir Equation (1.1)).

La conservation de la masse dans la bulle Ω_g , s'écrit : $d/dt \int_{\Omega_g} \rho_g = 0$, ce qui, en développant la dérivée donne : $\int_{\Omega_g} d\rho_g/dt + \int_{\partial\Omega_g} \rho_g \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$. En considérant les grandeurs ρ_g , p_g et T_g homogènes sur Ω_g , et en considérant la décomposition $d\rho_g/dt = \frac{d\rho_g}{dp_g} \frac{dp_g}{dt} + \frac{d\rho_g}{dT_g} \frac{dT_g}{dt}$, la conservation de la masse dans Ω_g s'écrit :

$$\frac{1}{p_g} \frac{dp_g}{dt} + \frac{1}{|\Omega_g|} \int_{\partial\Omega_g} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{T_g} \frac{dT_g}{dt}$$

(2.129)

Tenant compte de la proposition B.1 de l'Annexe B, l'expression (2.129) est équivalente à :

$$\frac{1}{p_g} \frac{dp_g}{dt} + \frac{1}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} = \frac{1}{T_g} \frac{dT_g}{dt}$$

(2.130)

Il est aisé de voir que p_g , $|\Omega_g|$ et T_g vérifient alors $p_g|\Omega_g| = C_0T_g$ où C_0 est une constante. Ainsi, partant de la conservation de la masse dans la bulle Ω_g , et considérant les grandeurs homogènes dans Ω_g (ou prenant les grandeurs en moyenne dans Ω_g), nous aboutissons à l'expression "classique" de la loi des gaz parfaits :

$$p_g|\Omega_g| = n_gRT_g \quad (2.131)$$

La relation (2.131) exprime la pression p_g de la bulle en fonction de son volume et de sa température. La variation du volume $|\Omega_g|$ dépend du mouvement du polymère. Pour fermer l'Equation (2.131) il est donc nécessaire d'exprimer l'évolution de T_g .

Pour ce faire, nous considérons le principe de conservation de l'énergie. Ce principe, également connu comme 1^{er} principe de la thermodynamique, postule que [26] *pour tout système matériel, la dérivée par rapport au temps de l'énergie totale (énergie cinétique plus énergie interne) est égale à la somme de la puissance des forces extérieures appliquées au système et des apports de chaleur.*

Appliqué à la bulle Ω_g , l'énoncé ci-dessus est traduit mathématiquement par :

$$\rho_g \int_{\Omega_g} \frac{de_g}{dt} = \int_{\partial\Omega_g} (\sigma_g \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} - \int_{\partial\Omega_g} \phi \cdot \mathbf{n} \quad (2.132)$$

e_g est l'énergie interne du gaz, qui ne dépend que de sa température absolue T_g (gaz parfait). ϕ est le flux de chaleur sur $\partial\Omega_g$, dû au transfert thermique entre le gaz et le polymère, donné par l'expression (2.128). Enfin, $\sigma_g \mathbf{n} = -p_g \mathbf{n}$. Ainsi, l'Equation (2.132) se réécrit donc en :

$$\rho_g \frac{de_g}{dt} = -\frac{p_g}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} + \frac{1}{|\Omega_g|} \int_{\partial\Omega_g} h_c(T - T_g) \quad (2.133)$$

Ω_g étant un gaz parfait, son énergie s'exprime par :

$$de_g = n_g c_V dT_g \quad (2.134)$$

où c_V est la chaleur spécifique molaire à volume constant. Pour un gaz monoatomique parfait $c_V = 3R/2$, tandis que pour un gaz diatomique parfait, $c_V = 5R/2$.

La forme finale de la conservation de l'énergie dans Ω_g s'écrit :

$$\boxed{\rho_g n_g c_V \frac{dT_g}{dt} = -\frac{p_g}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} + \frac{1}{|\Omega_g|} \int_{\partial\Omega_g} h_c(T - T_g)} \quad (2.135)$$

Remarquons dans (2.135) le terme de puissance $-p_g \frac{d|\Omega_g|}{dt}$, dû au travail de la pression et traduisant la compressibilité du gaz.

En définitive, lors de l'expansion anisotherme d'une bulle de gaz dans une matrice polymère, le couplage thermo-mécanique s'effectue, d'une part, via la thermo-dépendance de la viscosité du polymère (2.126), et d'autre part via la loi des gaz parfaits (2.131). Conjointement au problème mécanique, le problème thermique (2.127), (2.128), (2.135) doit être résolu.

2.7.2 Résolution du problème thermique

Le problème thermique tel qu'il est formulé en (2.127), (2.128) et (2.135) ne peut être directement résolu par une méthode éléments finis avec l'approche eulérienne développée ici. Il n'est en effet pas possible de sommer le terme $h_c(T - T_g)$ sur $\partial\Omega_g$, puisque les interfaces liquide - gaz ne sont pas précisément définies. Nous devons donc reformuler le problème thermique de manière à prendre en compte implicitement l'échange de chaleur entre le liquide et le gaz. Pour ce faire, nous utilisons la méthode multidomaine de résolution du problème thermique élaborée par S. Batkam au cours de sa thèse [12] (voir également [13]).

2.7.2.1 Prolongement du problème thermique dans le gaz

Dans un premier temps nous considérons les champs température T et flux de chaleur ϕ définis dans Ω_l par (2.127), et les prolongeons dans la partie gazeuse. Ainsi, en nous basant sur l'Equation (2.135), T et ϕ sont définis dans Ω_g par :

$$\begin{cases} \rho_g n_g c_V (\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T) &= -\frac{p_g}{|\Omega_g|} \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \phi \\ \phi &= -k_g \nabla T \\ &+ \text{conditions sur } \partial\Omega_g \end{cases} \quad \forall (x, t) \in \Omega_g \times]0, \Theta[\quad (2.136)$$

où k_g est la conductivité thermique du gaz que l'on introduit ici. La seconde étape consiste à sommer les systèmes (2.127) et (2.136) au moyen des fonctions caractéristiques $\mathbb{1}_{\Omega_l}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}$. Nous obtenons alors l'équation de la chaleur globale suivante :

$$\begin{cases} \rho c (\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T) &= \nabla \cdot \phi + \dot{w} \\ \phi &= -k \nabla T \\ &+ \text{conditions sur } \partial\Omega \end{cases} \quad \forall (x, t) \in \Omega \times]0, \Theta[\quad (2.137)$$

avec :

$$\begin{cases} k &= k_g \mathbb{1}_{\Omega_g} + k_l \mathbb{1}_{\Omega_l} \\ \rho c &= \rho_g n_g c_V \mathbb{1}_{\Omega_g} + \rho_l c_l \mathbb{1}_{\Omega_l} = c_V \mathbb{1}_{\Omega_g} \frac{n_g^2 \mathcal{M}}{|\Omega_g|} + \mathbb{1}_{\Omega_l} \rho_l c_l \end{cases} \quad (2.138)$$

et

$$\dot{w} = -\mathbb{1}_{\Omega_g} \frac{p_g}{|\Omega_g|} \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbb{1}_{\Omega_l} 2\eta \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(\mathbf{v}) \quad (2.139)$$

L'équation (2.137) contient deux types de discontinuités : d'une part les températures initiales du gaz et de la matrice liquide qui peuvent être différentes, et d'autre part les grandeurs physiques (k, ρ, c). La méthode éléments finis développée dans [12] et [13] considère des grandeurs physiques continues au passage des différents domaines (gaz et liquide). Cet artifice mathématique permet alors de faire apparaître un saut de température. La température et le flux de chaleur sont ensuite approchés par des fonctions discontinues.

Nous remplaçons donc le modèle précédent considérant une température homogène dans Ω_g et un coefficient de transfert thermique h_c , par un modèle où le transfert thermique entre le liquide et le gaz est contrôlé par une conductivité k continue à l'interface.

De plus, la température T_g de Ω_g est définie comme la moyenne de T sur Ω_g .

2.7.2.2 Discrétisation du problème thermique

Nous nous bornerons par la suite à décrire les espaces d'approximation de T et de ϕ utilisés, et à donner l'équation permettant de calculer T_h , approximation de T solution de (2.137). Pour plus de détails nous renvoyons aux références déjà mentionnées.

Soit K un élément du maillage $\mathcal{T}_h(\Omega)$. Nous notons F une face de K . K est divisé en $d + 1$ sous-éléments. Nous notons K^F le sous-élément de K partageant la face F (voir la Figure 2.20).

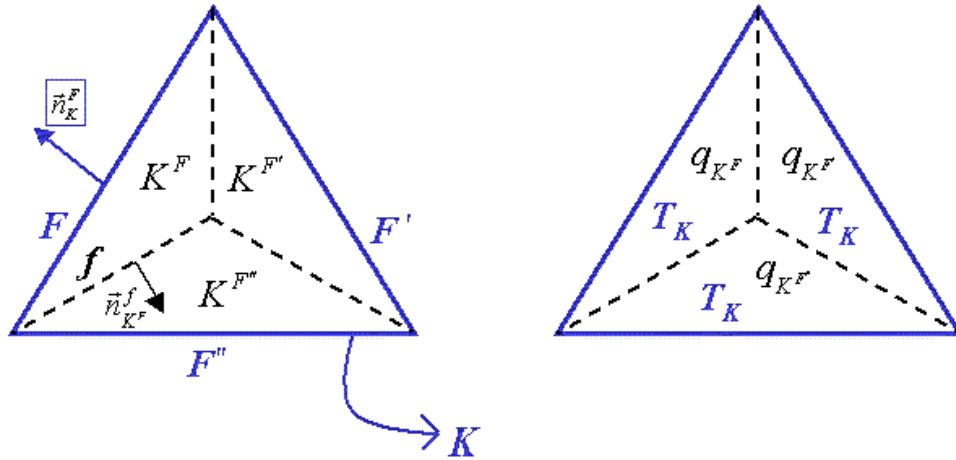


FIG. 2.20 – Décomposition d'un élément en $d + 1$ sous-éléments : notations sur l'éléments K (Figure issue de [12])

La température T est approchée par T_h qui est discontinue sur Ω_h et constante par élément : $T_h \in \mathcal{P}^{0,q}$ (voir section 2.4).

Le flux de chaleur ϕ est approché par ϕ_h , discontinu sur Ω_h et constant par sous-élément : $\phi_h \in \mathcal{Q}_h^+(\Omega_h)$, avec

$$\mathcal{Q}_h^+(\Omega_h) = \{q_h \in L^2(\Omega_h)^3; q_h|_{K^F} \in P_0(K^F), F = 1, \dots, d+1, \forall K \in \mathcal{T}_h(\Omega)\} \quad (2.140)$$

De plus, ϕ_h doit satisfaire la propriété suivante : le saut de ϕ_h à travers les faces F d'un élément K est nul (Figure 2.21). Cette propriété permet à la méthode d'être locale. Nous verrons ainsi que $T_{h|K}$ s'exprime uniquement fonction des $T_{h|K(F)}$, $F = 1, \dots, d+1$ où $K(F)$ désigne l'élément voisin de K partageant la face F . Le choix du couple $\mathcal{T}_h/\mathcal{Q}_h^+$ conduit à l'élément fini appelé $P0/P0^+$ [12].

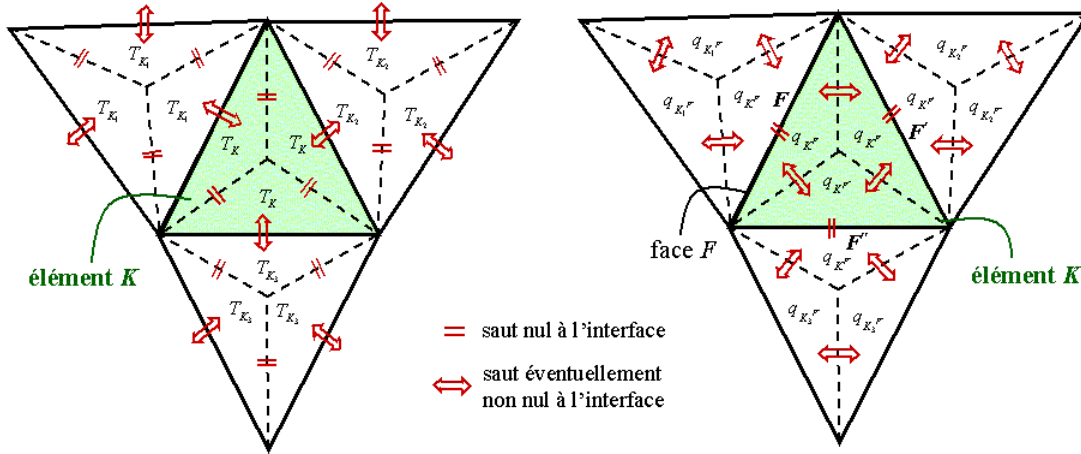


FIG. 2.21 – L'élément $P0/P0^+$: sauts de température nuls à travers les faces "internes" (à gauche) et sauts de flux nuls à travers les faces "externes" (à droite) de l'élément (Figure issue de [12])

Les propriétés énoncées permettent d'écrire le système ci-dessus :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_K c_K \frac{\partial T_{h|K}}{\partial t} = \frac{1}{|K|} \rho_K c_K \sum_{F \in \partial K} (T_{h|K} - T_{h|K(F)}) \int_F (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^- d\Gamma \\ \quad - \sum_{F \in \partial K} \omega \phi_{|KF} \cdot \mathbf{n}_K^F |F| + \dot{w}_{h|K} \\ \phi_{|KF} = k(F) (T_{h|K} - T_{h|K(F)}) \frac{(d+1)|F| \mathbf{n}_K^F}{|K| + |K(F)|} \end{array} \right. \quad (2.141)$$

où $|K|$ désigne le volume de l'élément K , $|F|$ l'aire de la face F , et \mathbf{n}_K^F la normale à la face F de K extérieure à K . Remarquons aussi que, d'après la définition de \dot{w} (2.139) et l'approximation locale $P1$ de \mathbf{v} , \dot{w}_h apparaît naturellement comme une fonction constante par élément. La compréhension du système (2.141) nécessite de plus les remarques suivantes :

- Le paramètre ω est un paramètre numérique servant à tenir compte de la forme des éléments du maillage. Dans notre cas $\omega = 1$.
- Le terme $\sum_{F \in \partial K} (T_{h|K} - T_{h|K(F)}) \int_F (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^-$ correspond à la discrétisation de la partie convective $\mathbf{v} \cdot \nabla T_h$. Nous renvoyons à la section 2.4 pour plus de détails : la méthode est analogue à celle utilisée pour le transport des fonctions caractéristiques.
- La discrétisation temporelle s'effectue également comme à la section 2.4. Dans la pratique la température est choisie discontinue en temps et constante par intervalle de temps.

Enfin, $k(F)$ est appelée conductivité d'interface et résulte de la continuité de la conductivité. Considérons deux éléments K et $K(F)$ adjacents par la face F (Figure 2.22), sur lesquels la conductivité est k_K et $k_{K(F)}$ respectivement. Ces conductivités sont définies par l'analogie discret de (2.138). La méthode multidomaine employée nécessite la définition de la conductivité sur la face F . Cette conductivité, notée $k(F)$, dépend uniquement des caractéristiques des matériaux en présence. $k(F)$ permet de gérer naturellement dans les simulations éléments finis les échanges thermiques entre la partie liquide et le gaz, jouant le rôle du coefficient d'échange h_c spécifié à l'interface.

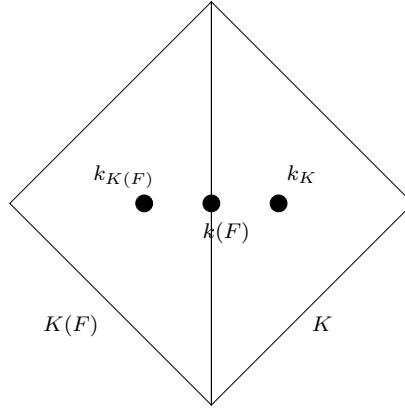


FIG. 2.22 – Conductivité d'interface entre 2 éléments adjacents

Dans le contexte de la Figure 2.22 le coefficient $k(F)$ s'écrit :

$$k(F) = \bar{w}k_K + (1 - \bar{w})k_{K(F)} \quad (2.142)$$

où \bar{w} est un paramètre compris en 0 et 1. Nous faisons ici le choix suivant :

$$\bar{w} = \frac{\max(b_K, b_{K(F)})}{b_K + b_{K(F)}} \quad (2.143)$$

où l'effusivité $b_K = \sqrt{k_K \rho_K c_K}$.

Ce choix du paramètre \bar{w} permet d'approcher au mieux la température d'interface entre deux milieux [12].

Lors de la résolution du système (2.141) $\phi_{h|K^F}$ est remplacé dans la première équation par son expression. Ainsi on obtient un système avec les valeurs de $T_{h|K}$ comme seules inconnues.

La méthode $P0/P0^+$ a prouvé sa robustesse, que ce soit en injection, en co-injection, ou dans diverses applications. En particulier, les chocs thermiques sont correctement captés, et la température approchée ne présente pas d'oscillation.

2.7.3 Expansion anisotherme d'une bulle dans une matrice polymère

Les simulations que nous présentons par la suite sont réalisées avec la condition en flux imposé $\phi_{ext} = 0$. Nous considérons donc le domaine de calcul comme étant adiabatique.

Les paramètres thermiques choisis sont, sauf mention contraire :

Pour le polymère :

- Température de référence : $T_0 = 573.15K$
- Masse volumique : $\rho_l = 1000kg.m^{-3}$
- Chaleur massique : $c_l = 1,7.10^3 J.kg^{-1}.K^{-1}$
- Conductivité thermique : $k_l = 0.22W.m^{-1}.K^{-1}$
- Energie d'activation : $E = 4450J.mol^{-1}$

Pour le gaz (CO_2) :

- Masse volumique : $\rho_g < 1$
- Chaleur massique : $n_g c_v = 10^3 J.kg^{-1}.K^{-1}$
- Conductivité thermique : $k_g = 0.042$ ou $1.42W.m^{-1}.K^{-1}$ (pour comparaison)
- Masse molaire : $\mathcal{M} = 12.10^{-3}kg.mol^{-1}$

La température initiale est de 573.15 K, la surpression initiale du gaz est de 200 Pa. Le polymère est considéré newtonien de consistance $\eta_0 = 1000Pa.s$.

Nous étudions d'abord l'expansion d'une bulle dans un liquide sans échange de chaleur entre les deux milieux. Ceci nous permet de comparer l'évolution de la température du gaz avec un modèle analytique. Puis nous nous intéresserons à l'expansion de cette même bulle, mais cette fois avec un couplage thermo-mécanique complet.

2.7.3.1 Expansion adiabatique d'une bulle de gaz

L'expansion adiabatique d'une bulle de gaz signifie qu'il n'y pas d'échange de chaleur entre la bulle et le polymère ($k_l = k_g = 0$ dans (2.138)). Dans ce cas, nous pouvons exprimer la température $T_g(t)$ d'une bulle sphérique Ω_g en fonction de son volume. En considérant un échange thermique nul entre le gaz et le liquide, l'équation de la chaleur dans Ω_g (2.135) se simplifie en :

$$\frac{\mathcal{M}p_g n_g c_v}{RT_g} \frac{dT_g}{dt} = - \frac{p_g}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} \quad (2.144)$$

Soit encore :

$$\frac{d \ln T_g}{dt} = - \frac{R}{\mathcal{M}n_g c_v} \frac{d \ln |\Omega_g|}{dt} \quad (2.145)$$

Finalement, la relation entre T_g et $|\Omega_g|$ s'écrit :

$$T_g = T_{g0} \left(\frac{|\Omega_g^0|}{|\Omega_g|} \right)^\gamma \quad \text{avec } \gamma = \frac{R}{\mathcal{M}n_g c_V} \quad (2.146)$$

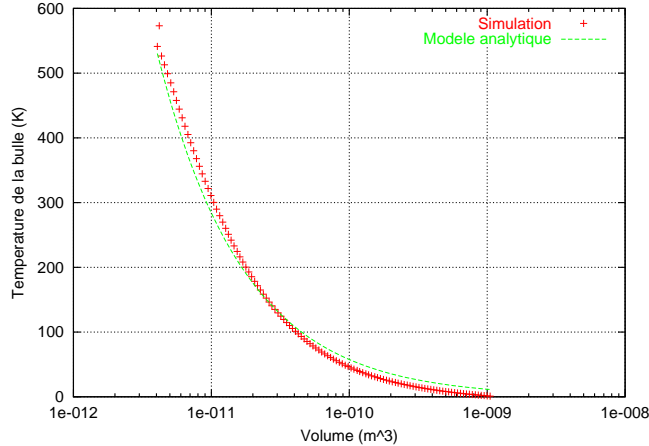


FIG. 2.23 – Expansion adiabatique d’une bulle de gaz : évolution de sa température interne en fonction de son volume

Nous retrouvons ainsi la relation classique reliant la température et le volume lors d’un processus adiabatique dans un gaz parfait [53]. La Figure 2.23 compare la valeur analytique de T_g avec la simulation effectuée en prenant $k_l = k_g = 0$. Une surpression initiale de 200 bars dans le gaz provoque l’expansion. Les valeurs ne sont évidemment pas toutes physiques mais montrent néanmoins une bonne concordance entre simulation et modèle analytique. Ceci valide le couplage thermo-mécanique dans le gaz, et met en avant le rôle joué par le terme de dissipation $-p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v}$.

2.7.3.2 Expansion anisotherme d’une bulle

Considérons maintenant le système liquide gaz couplé, avec la condition de flux nul sur $\partial\Omega$. Nous présentons alors deux cas d’expansion se différenciant par leurs conditions initiales.

- Dans la première étude, le liquide est initialement plus chaud que la bulle tandis que la différence de pression entre la pression du gaz et la pression ambiante est nulle. Cette situation pourrait être rencontrée dans les mousses thermodurcissables avec réaction chimique exothermique dans le mélange. Le gaz chauffe par transfert thermique avec le polymère, entraînant une hausse de sa pression, conformément à la loi des gaz parfaits (voir Figure 2.24(a)). La pression du gaz atteint son maximum très rapidement (lors des deux premiers incréments de calcul, pour un temps de $10^{-8} s$), puis décroît par expansion de la bulle (voir Figure 2.24(b)). Le temps mis pour atteindre l’équilibre thermique est très court, de l’ordre de 10^{-4} . Lorsque l’équilibre thermo-mécanique est atteint, nous constatons de petites oscillations de la pression et du volume du gaz autour de leurs valeurs d’équilibre (pour un temps $t > 10^{-2} s$).

De plus, nous constatons que le passage d'une conductivité thermique du gaz de 1.42 à 0.042 n'affecte ni l'expansion de la bulle (Figure 2.24(b)) ni le temps de retour à l'équilibre thermique (Figure 2.24(a)). Ceci s'explique par le modèle utilisé pour définir la conductivité à l'interface (2.142) : l'effusivité du polymère est bien supérieure à celle du gaz, ce qui entraîne qu'à l'interface liquide - gaz le paramètre \bar{w} défini par (2.143) est proche de 1. En conséquence, le transfert thermique est essentiellement gouverné par la conductivité du polymère.

- La seconde étude considère le gaz et le liquide à la même température initiale. Une surpression est alors imposée dans la bulle. Remarquons d'abord qu'en deçà d'une certaine valeur de p_g , le terme $-p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v}$ n'a pas une influence suffisante pour faire varier la température de la bulle lors de son expansion. Ainsi, la température d'une bulle ayant une pression initiale de $2 \cdot 10^5$ Pa varie peu, comme le montre la Figure 2.25.

Considérons maintenant un cas où la pression p_g est suffisamment élevée pour que le terme $-p_g \int_{\Omega_g} \nabla \cdot \mathbf{v}$ intervenant dans (2.135) ne soit pas négligeable. Durant les premiers instants de l'expansion, la température de la bulle chute par détente du gaz (Figure 2.26). Ce régime transitoire est court, et, l'expansion devenant plus lente, la température de la bulle se stabilise, à la température du polymère, inférieure à la température initiale du fait de l'expansion.

Nous avons tracé sur la Figure 2.26 la température et le rayon de la bulle durant son expansion, ainsi que le rayon obtenu par le modèle analytique isotherme de l'Equation (2.6.1). Nous constatons que le rayon simulé est légèrement inférieur à la solution analytique isotherme, ce qui indique l'effet du refroidissement du polymère autour de la bulle, et donc de l'augmentation locale de la viscosité. Pour nous convaincre qu'il ne s'agit pas d'une coïncidence (un effet "numérique"), nous renvoyons au cas purement isotherme de la Figure 2.17(d), où le rayon simulé est trouvé légèrement supérieur à la valeur analytique.

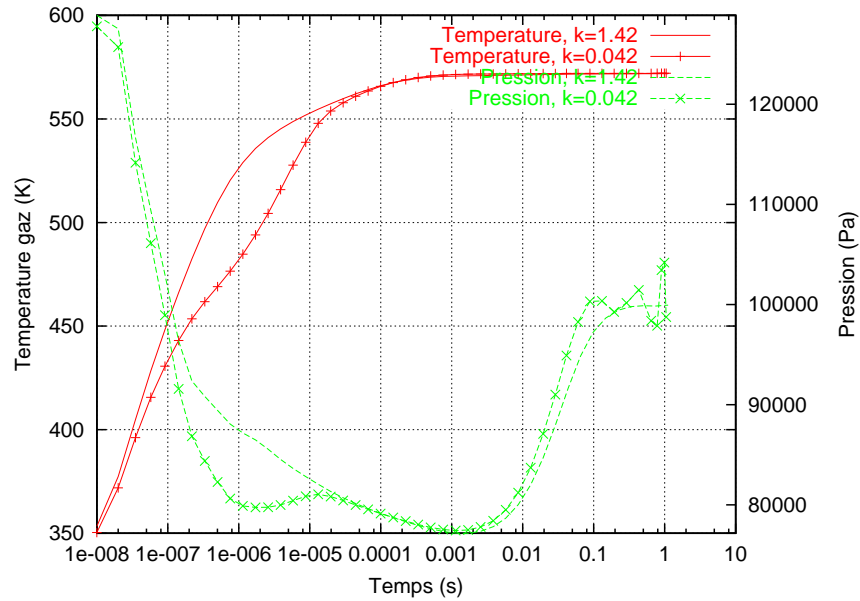
Soulignons qu'une étude plus complète sur le couplage thermo-mécanique durant l'expansion de bulles reste à faire. En effet, dans les simulations proposées, la valeur de p_g est la valeur réelle du gaz, de l'ordre de $10^6 Pa$, tandis que la valeur de p_{ext} a été prise à zéro. Ceci est non physique et entraîne des taux d'expansion (valeurs de la divergence $\nabla \cdot \mathbf{v}$) et des temps d'expansion très élevés. D'où, également la baisse trop marquée de la température sur la Figure 2.26. Ainsi, afin d'améliorer les calculs, il serait nécessaire d'avoir une pression p_{ext} décroissante avec le temps, telle que l'écart $p_g - p_{ext}$ soit physique et tende également vers zéro.

2.8 Conclusion

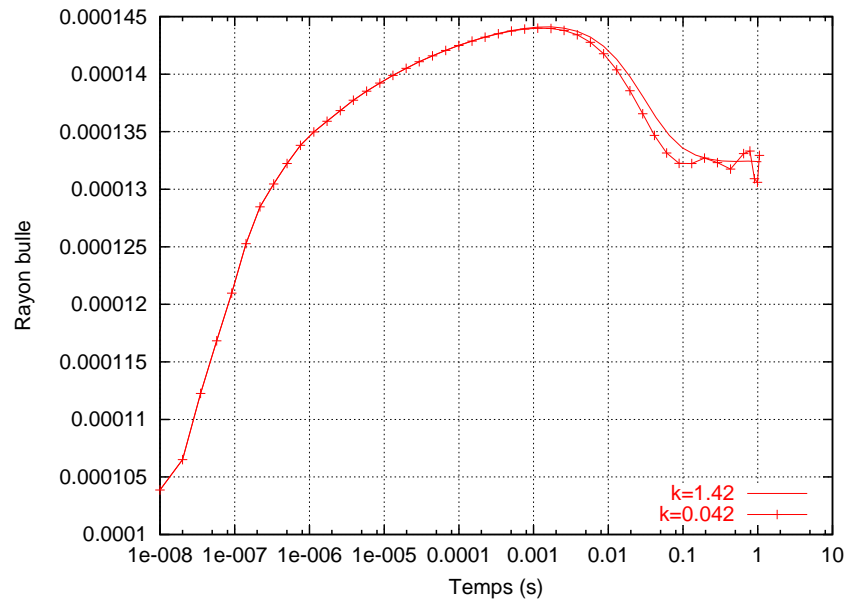
Nous avons exposé, dans le présent chapitre, la méthodologie développée pour simuler l'expansion d'une bulle de gaz dans un fluide pseudo-plastique.

Nous avons d'abord présenté les équations en vitesse - pression décrivant l'écoulement du liquide dû à l'expansion de la bulle. Cette expansion se fait par différence entre la pression de la bulle et la pression extérieure.

Le choix d'une approche eulérienne (maillage fixe) pour une résolution par éléments finis nous a conduit à prolonger les champs vitesse et pression dans le gaz. Ainsi,



(a)



(b)

FIG. 2.24 – Expansion d’une bulle provoquée par une hétérogénéité initiale de température : initialement le liquide est à 300 °C , le gaz à 50 °C , et $p_g = p_{ext} = 10^5\text{ Pa}$. Deux cas sont envisagés : un premier où la conductivité du gaz est de $k = 1.42$ (ligne continue) ; un deuxième où $k = 0.042$ (ligne continue et points). Haut : température de la bulle (rouge) et pression de la bulle (vert). Bas : rayon de la bulle. Echelle logarithmique

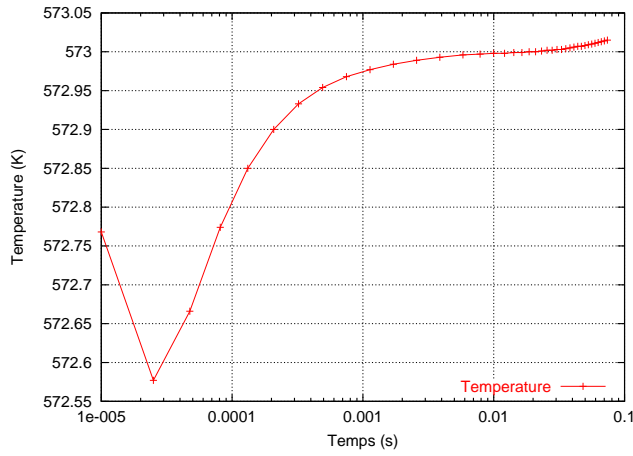


FIG. 2.25 – Variation de la température d’une bulle lors de son expansion. Initialement le polymère et le gaz sont à la même température, $p_g = 2 \cdot 10^5 Pa$, $p_{ext} = 0$, et $k_g = 0.042$. Echelle logarithmique

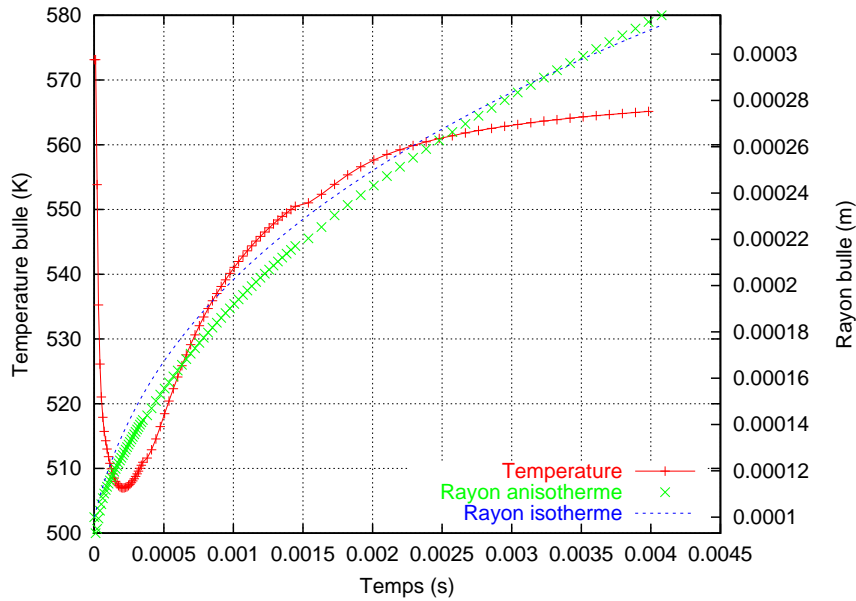


FIG. 2.26 – Expansion anisotherme d’une bulle provoquée par une surpression initiale. Initialement le liquide et le gaz sont à $300\text{ }^\circ\text{C}$, $p_{ext} = 0$ et $p_g = 10^7 Pa$.

nous obtenons un système définissant la vitesse et la pression dans le liquide comme dans le gaz. La formulation variationnelle de ce système est discrétisée par l’élément fini $P1 + /P1$.

Afin de suivre l’évolution de la bulle, nous lui associons une fonction caractéristique. Cette fonction est solution d’une équation de transport purement convective. Une méthode espace-temps Galerkin discontinu a été développée afin de résoudre cette équation. Une technique de r-adaptation de maillage est utilisée pour augmenter la précision sur la position des interfaces. Nous avons présenté des cas test 1D, 2D et 3D montrant l’efficacité de cette approche.

Enfin, l'expansion d'une bulle de gaz dans une matrice polymère a été étudiée. Dans le cas isotherme, un modèle analytique a d'abord été développé. Ce modèle montre que l'échelle de temps des simulations est fixée par les fluctuations de pression $p_g - p_{ext}$, qui sont des grandeurs mesurables dans la mousse. Les résultats de simulations d'expansion d'une bulle ont été confrontés favorablement au modèle analytique. Ainsi, notre approche (couplage liquide - gaz et transport de la fonction caractéristique) se trouve validée.

Le couplage thermo-mécanique a ensuite été envisagé. La résolution des équations de la thermique s'effectue par une extension de la méthode espace-temps Galerkin discontinu au cas de convection diffusion. Deux études ont principalement été faites. La première consiste à simuler la croissance d'une bulle provoquée par une augmentation de sa température. La deuxième considère la diminution de température du gaz due à sa détente. Les simulations effectuées montrent que les temps mis en jeu pour le retour à l'équilibre thermique sont courts devant le temps d'expansion.

Arrivé à ce stade de notre étude, nous disposons d'un outil susceptible de fournir les mêmes résultats que les modèles cellulaires. De plus, grâce à la méthodologie numérique mise en place, les hypothèses (forme de bulle, etc.) dont sont habituellement tributaires ces modèles n'ont plus lieu d'être. Le chapitre suivant exploite la souplesse de notre approche en l'étendant à la simulation d'un échantillon de mousse, mettant en jeu l'expansion et l'interaction de plusieurs bulles.

Chapitre 3

De l'expansion d'un système de bulles à l'expansion d'une structure de mousse

3.1 Introduction

L'objet de notre travail est, rappelons le, de construire un outil numérique permettant prédire l'évolution d'une structure de mousse polymère en expansion. Nous nous plaçons donc à une échelle dite microscopique, à savoir que nous considérons la mousse comme un ensemble de bulles de gaz évoluant dans une matrice liquide. Dans le précédent chapitre, nous avons exposé une méthodologie permettant de simuler par éléments finis l'expansion d'une bulle de gaz dans un fluide pseudo-plastique. Nous souhaitons à présent étendre cette méthodologie à la simulation de l'expansion d'un échantillon de mousse, comportant un "grand" nombre de bulles. La première partie de ce chapitre sera donc consacrée à la prise en compte d'un nombre quelconque de bulles. Nous introduirons ensuite le concept de volume représentatif d'une structure de mousse. Nous verrons alors que pour modéliser et simuler l'expansion d'un volume représentatif, nous devons prendre en compte le changement d'échelle qu'induit cette expansion. Nous montrerons alors des exemples de simulations d'expansions de structure de mousse réalisées suivant notre approche, dans des cas 2D et 3D, et avec différentes distributions initiales de germes. Nous concluons par l'expansion anisotherme d'une structure de mousse.

3.2 Expansion d'un système de bulles dans une matrice liquide

Nous nous plaçons dans le contexte du paragraphe 2.2. Soit Ω le volume de calcul contenant une matrice polymère Ω_l et un système de n bulles de gaz Ω_{g_i} . Nous

notons également Ω_g le domaine gazeux, réunion des n bulles, de sorte que nous avons (Figure 3.1) :

$$\Omega = \Omega_l \cup \left(\bigcup_{i=1}^n \Omega_{g_i} \right) = \Omega_l \cup \Omega_g \quad (3.1)$$

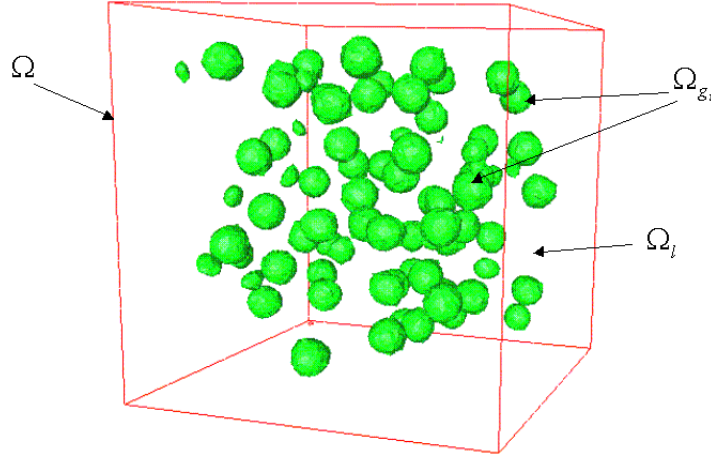


FIG. 3.1 – Le domaine de calcul Ω , la matrice liquide Ω_l , les bulles de gaz Ω_{g_i}

Les hypothèses faites au chapitre précédent restent valables. En particulier, chaque bulle suit une loi des gaz parfaits, et la frontière du volume de calcul est occupée uniquement par le liquide.

Nous souhaitons garder le couplage liquide - gaz effectué au chapitre précédent. Le problème à résoudre est donc :

Trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{C}^2(\Omega)^3 \times \mathcal{C}^1(\Omega)$ tels que, dans Ω_l ces champs vérifient

$$\begin{cases} \nabla \cdot [2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p & = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} & = 0 \\ \sigma \mathbf{n} & = -p_{g_i} \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega_{g_i} \\ \sigma \mathbf{n} & = -p_{ext} \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.2)$$

et dans Ω_{g_i} , les champs \mathbf{v} et p sont prolongés de manière à vérifier :

$$\begin{cases} 2\eta_g \nabla \cdot [\varepsilon(\mathbf{v})] & = \nabla p_{g_i} = 0 \\ p & = p_{g_i} \end{cases} \quad (3.3)$$

où p_{g_i} est la pression de i ème bulle, définie par :

$$p_{g_i} |\Omega_{g_i}| = p_{g_i}^0 |\Omega_{g_i}^0| = \text{constante}_i \quad (3.4)$$

Suivant la démarche adoptée au paragraphe 2.3 du chapitre précédent, nous obtenons l'analogie de la forme variationnelle (3.5) généralisée à n bulles :

A chaque instant t , connaissant $\Omega_l(t)$ et $\Omega_{g_i}(t)$, $i = 1, \dots, n$, trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$ tels que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_l} 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega_{g_i}} 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) - \int_{\Omega_l} p \nabla \cdot w \\ = - \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} p_{ext} w \cdot \mathbf{n} + \sum_{i=1}^n p_{g_i} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot w \\ - \int_{\Omega_l} q \nabla \cdot \mathbf{v} - \alpha_p \sum_{i=1}^n \int_{\Omega_{g_i}} p q = -\alpha_p \sum_{i=1}^n p_{g_i} \int_{\Omega_{g_i}} q \end{array} \right. \quad (3.5)$$

$$\forall (w, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$$

Remarquons que l'Equation (3.5) peut se réécrire sous la forme (2.37) où l'on définit p_g comme le champ pression du gaz vérifiant $p_g|_{\Omega_{g_i}} = p_{g_i}$ et où $\Omega_g = \bigcup_{i=1}^n \Omega_{g_i}$.

Pour résoudre le système (3.5) couplé avec n équations scalaires du type (3.4) on doit être capable de déterminer précisément la position de chaque bulle de gaz Ω_{g_i} . Pour cette raison, notre méthode est qualifiée de multidomaine, chaque bulle étant considérée comme un domaine à part entière. Pour ce faire, nous allons envisager deux approches. La première consiste à définir réellement une fonction caractéristique par bulle, et donc à résoudre une équation de transport par bulle. La deuxième approche consiste à définir une seule fonction caractéristique pour toute la partie gazeuse, puis à retrouver la position des bulles à partir de cette fonction.

3.2.1 Approche pleinement multidomaine

Nous associons, à toute bulle Ω_{g_i} sa fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}$. Suivant la démarche exposée dans le précédent chapitre, l'analogie discret du système (3.5) s'écrit alors :

Connaissant $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h$, $i = 1, \dots, n$ trouver $(\mathbf{v}_h, p_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$ tels que

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v}_h)|)\varepsilon(\mathbf{v}_h) : \varepsilon(w_h) + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}_h) : \varepsilon(w_h) \\ - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_h \nabla \cdot w_h = - \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h p_{ext} w_h \cdot \mathbf{n} + \sum_{i=1}^n p_{g_i} \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h \nabla \cdot w_h \\ - \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h q_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h - \alpha_p \sum_{i=1}^n \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h p_h q_h = -\alpha_p \sum_{i=1}^n p_{g_i} \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h q_h \end{array} \right. \quad (3.6)$$

$$\forall (w_h, q_h) \in \mathcal{V}_h \times \mathcal{P}_h$$

Le système (3.6) est couplé avec la résolution de n équations de transport de type (2.48) fournissant les n $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h$. On a alors : $\mathbb{1}_{\Omega_l}^h = 1 - \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^h$. Ces équations de transport sont résolues indépendamment les unes des autres par la méthode espace-temps Galerkin discontinu développée au paragraphe 2.4. Les pressions p_{g_i} sont alors calculées avec la formule (2.108) donnée au paragraphe 2.5.

Cette approche présente l'avantage d'être une généralisation directe de la méthodologie développée pour l'expansion d'une bulle. Elle est donc simple à implémenter. De plus, les bulles étant transportées individuellement, leurs positions sont toujours bien définies, même lorsque ces bulles se trouvent très "proches". En particulier, un élément K peut être partagé par plusieurs bulles ($\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}|K}^h \neq 0$ et $\mathbb{1}_{\Omega_{g_j}|K}^h \neq 0$) sans que cela ne pose problème.

Le fait de suivre chaque bulle individuellement à travers sa fonction caractéristique induit un coût mémoire et un temps CPU de calcul importants, voir même trop importants ! Ainsi, en reprenant le raisonnement du paragraphe 2.5, le calcul et l'utilisation de n fonctions caractéristiques dans une simulation implique le stockage permanent de $2n \times NbElt$. La valeur de n est typiquement supérieure à 60 dans nos simulations. De plus, plus le nombre de bulles n est élevé, plus le maillage doit être fin pour décrire correctement les interfaces, et donc plus le nombre d'éléments $NbElt$ est important. En pratique, cela limite à 80 le nombre de bulles que nous pouvons utiliser sur un maillage à 250 000 éléments, se servant d'un Pentium III à 2Go de RAM. Du fait de la résolution de n équations de transport à chaque incrément de temps, ce genre de calcul prend au moins 2 jours.

Ces considérations nous ont mené à envisager l'utilisation d'une seule fonction caractéristique pour décrire tout le gaz, tout en restant dans une approche formellement multidomaine.

3.2.2 Approche formellement multidomaine

Nous considérons à présent uniquement la fonction caractéristique du gaz $\mathbb{1}_{\Omega_g}$. Le gaz Ω_g est toujours vu comme un ensemble de n bulles Ω_{g_i} , mais, contrairement au paragraphe précédent, nous ne leur associons pas leurs fonctions caractéristiques. De plus nous introduisons le champ pression du gaz p_g , défini formellement dans Ω par :

$$p_g(x, t) = \begin{cases} p_{g_i}(t) & \text{si } x \in \Omega_{g_i} \\ 0 & \text{si } x \in \Omega_l \end{cases} \quad (3.7)$$

Avec ces notations, et comme cela a été dit au paragraphe 3.2, le système (3.5) se réécrit en :

Connaissant $\mathbb{1}_{\Omega_i}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_g}$, trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_i} 2\eta(|\varepsilon(\mathbf{v})|)\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) + \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} 2\eta_g \varepsilon(\mathbf{v}_h) : \varepsilon(w) \\ - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_i} p \nabla \cdot w = - \int_{\partial\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_i} p_{ext} w \cdot \mathbf{n} + \int_{\Omega} p_g \nabla \cdot w \\ - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_i} q \nabla \cdot \mathbf{v} - \alpha_p \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_g} p q = -\alpha_p \int_{\Omega} p_g q \end{cases} \quad (3.8)$$

$$\forall (w, q) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$$

Remarquons que le système (3.8) a été obtenu en supposant que p_g est constant par bulle et s'annule dans la partie liquide. Afin d'avoir équivalence avec l'approche multidomaine du paragraphe 3.2.1, le champ discrétisé p_g^h doit être de la forme : $p_g^h|_{\Omega_{g_i}^h} = p_{g_i} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}^h}$ où $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}^h}$ et p_{g_i} sont la fonction caractéristique et la pression de la i ème bulle telles qu'elles étaient calculées précédemment. Pour ce faire nous procédons comme suit.

Dans une bulle Ω_{g_i} le champ p_g suit la loi des gaz parfaits :

$$p_g|_{\Omega_{g_i}} |\Omega_{g_i}| = \text{constante} \quad (3.9)$$

En dérivant (3.9) par rapport au temps nous avons :

$$\frac{dp_g|_{\Omega_{g_i}}}{dt} |\Omega_{g_i}| + p_g|_{\Omega_{g_i}} \frac{d|\Omega_{g_i}|}{dt} = 0 \quad (3.10)$$

Comme on suit la bulle dans son mouvement, l'Equation (3.10) se développe en :

$$\frac{\partial p_g|_{\Omega_{g_i}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p_g|_{\Omega_{g_i}} = -\frac{1}{|\Omega_{g_i}|} p_g|_{\Omega_{g_i}} \frac{d|\Omega_{g_i}|}{dt} \quad (3.11)$$

En se servant de la proposition B.1 de l'Annexe B l'Equation (3.11) équivaut à :

$$\frac{\partial p_g|_{\Omega_{g_i}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p_g|_{\Omega_{g_i}} = -\frac{1}{|\Omega_{g_i}|} p_g|_{\Omega_{g_i}} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3.12)$$

En définitive, le champ p_g est défini sur tout le volume de calcul Ω par l'équation suivante :

$$\boxed{\begin{cases} \frac{\partial p_g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p_g = -p_g E(\nabla \cdot \mathbf{v}) \\ \text{saut de } p_g \text{ nul sur } \partial\Omega \\ p_g(x, 0) = \sum_{i=1}^n p_{g_i}^0 \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}^0}(x) \end{cases}} \quad (3.13)$$

où E est l'opérateur de moyenne défini par :

$$E(\nabla \cdot \mathbf{v})(x) = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_{g_i}|} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot \mathbf{v} & \text{si } x \in \Omega_{g_i} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.14)$$

$p_{g_i}^0$ est la pression initiale de la i ème bulle, tandis que $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0$ est sa fonction caractéristique initiale. Remarquons que cette fonction est nécessaire uniquement pour initialiser le calcul. Il est donc nécessaire de la stocker seulement en vue d'initialiser le calcul, la mémoire allouée étant libérée dès que celui-ci commence. De plus, on se contente de stocker les éléments du maillage sur lesquels $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0$ n'est pas nulle, ainsi que la valeur de $\mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0$ sur ces éléments. Étant donné que chaque bulle de gaz occupe initialement une petite fraction du volume de Ω , le coût mémoire est très réduit.

3.2.2.1 Discrétisation

La discrétisation du système (3.8) se déroule exactement comme celle du système (2.50) au chapitre précédent.

Supposons que nous disposions d'un algorithme capable de subdiviser le domaine gazeux Ω_g^h en n bulles $\Omega_{g_i}^h$ en se basant sur les valeurs de $\mathbb{1}_{\Omega_g^h}$. Ceci ne signifie pas reconstituer n fonctions caractéristiques, mais déterminer à quelle bulle $\Omega_{g_i}^h$ appartient chaque élément K du maillage pour lequel $\mathbb{1}_{\Omega_g^h|K} \neq 0$.

L'opérateur de moyenne discrétisé est alors :

$$E_h(\nabla \cdot \mathbf{v}_h)|_K = \begin{cases} \frac{1}{\int_{\Omega_{g_i}^h} \mathbb{1}_{\Omega_g^h}} \int_{\Omega_{g_i}^h} \mathbb{1}_{\Omega_g^h} \nabla \cdot \mathbf{v}_h & \text{si } K \in \Omega_{g_i}^h \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.15)$$

Le champ p_g^h vérifie l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial p_g^h}{\partial t} + \mathbf{v}_h \cdot \nabla p_g^h = -p_g^h E_h(\nabla \cdot \mathbf{v}_h) \quad (3.16)$$

Nous supposons que le second membre de (3.16) est connu (pris au temps précédent). Nous résolvons alors cette équation par la méthode espace-temps Galerkin discontinu développée au paragraphe 2.4. p_g^h est donc constant par élément spatial du maillage et polynômial en temps, avec le même ordre que celui choisi pour $\mathbb{1}_{\Omega_g^h}$.

Montrons à présent l'équivalence avec l'approche multidomaine proposée au paragraphe 3.2.1. Posons :

$$p_g(x, t)|_{\Omega_{g_i}} = P_i(t) \alpha_i(x, t) \quad (3.17)$$

où P_i ne dépend que du temps et α_i vérifie l'équation de transport homogène : $\partial\alpha_i/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla\alpha_i = 0$. Si nous prenons comme condition initiale $\alpha_i(x, 0) = \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0(x)$, alors α_i est la fonction caractéristique de la i ème bulle. En remplaçant dans (3.13) nous avons :

$$\frac{dP_i}{dt} = -P_i \frac{1}{|\Omega_{g_i}|} \frac{d|\Omega_{g_i}|}{dt} \quad (3.18)$$

$P_i(t)$, solution de (3.18) s'écrit donc : $P_i = A/|\Omega_{g_i}|$ où A est une constante à déterminer. Pour cela nous écrivons la condition initiale. D'un côté, $p_g(x, 0)|_{\Omega_{g_i}} = p_{g_i}^0 \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0$, et de l'autre, d'après la décomposition que nous avons faite, $p_g(x, 0)|_{\Omega_{g_i}} = A \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}^0 / |\Omega_{g_i}^0|$. Nous en déduisons que $A = p_{g_i}^0 |\Omega_{g_i}^0|$. En conséquence, le champ p_g solution de (3.13) s'écrit dans chaque Ω_{g_i} :

$$\begin{aligned} p_{g|\Omega_{g_i}}(x, t) &= \frac{p_{g_i}^0 |\Omega_{g_i}^0|}{|\Omega_{g_i}|} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} \\ &= p_{g_i} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Ce qui prouve l'équivalence avec la méthode pleinement multidomaine. En fait, cette équivalence suppose que l'on connaît exactement la position des Ω_{g_i} tout au long de la simulation. Nous allons voir, et c'est là que se situe la perte d'information par rapport à la méthode précédente, que l'emplacement des bulles de gaz n'est connu qu'à une précision près.

3.2.2.2 Algorithme de reconstruction des bulles

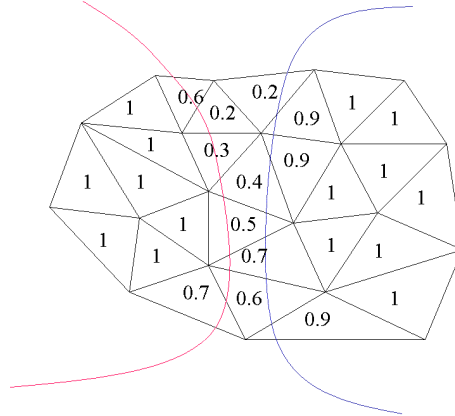


FIG. 3.2 – Fonction caractéristique du gaz sur un maillage 2D

Considérons la fonction caractéristique du gaz $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$, que nous avons représentée sur la Figure 3.2 dans un cas 2D. Visiblement, cette fonction définit deux bulles distinctes, que nous avons, plus ou moins arbitrairement, délimitées par une courbe rouge (Ω_{g1}) et une courbe bleue (Ω_{g2}). Soit un élément K du maillage tel que $\mathbb{1}_{\Omega_g|K}^h \neq 0$. La question que nous nous posons alors est la suivante : K appartient-il à Ω_{g1} ou à Ω_{g2} ?

Nous remarquons d'abord que pour les éléments sur lesquels $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$ est "élevée", il est aisé de répondre à cette question. Supposons ainsi que nous connaissions un élément $K \in \Omega_{g_1}$. Alors si K_v est voisin de K , et si $\mathbb{1}_{\Omega_g|K_v}^h = 1$, nous en déduisons que $K_v \in \Omega_{g_1}$. Plus généralement, nous définissons arbitrairement une précision d_p , et nous considérons que si $\mathbb{1}_{\Omega_g|K_v}^h \geq d_p$ alors $K_v \in \Omega_{g_1}$. Ceci définit ce que nous appelons les éléments intérieurs de chaque bulle. Nous avons représenté en rouge et en bleu les éléments intérieurs de Ω_{g_1} et Ω_{g_2} sur la Figure 3.3 pour $d_p = 0,9$.

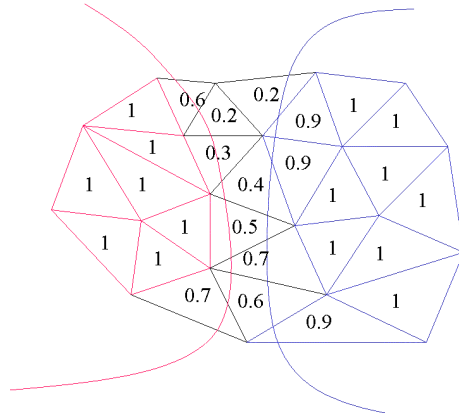


FIG. 3.3 – Éléments intérieurs aux bulles

L'étape délicate est donc de déterminer l'appartenance des éléments frontière K sur lesquels on a : $0 < \mathbb{1}_{\Omega_g|K}^h < d_p$. C'est là aussi que se situe l'approximation par rapport à la méthode pleinement multidomaine. En effet, le même élément ne peut plus contenir, à présent, deux bulles distinctes. Nous procédons comme suit.

Nous calculons d'abord le barycentre de chacun des intérieurs de bulle précédemment construit. Le barycentre d'un intérieur est la moyenne des barycentres des éléments le composant, éventuellement pondérée par le volume de ces éléments et par $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$. Ainsi, sur la Figure 3.4, b_1 et b_2 sont les barycentres des intérieurs de Ω_{g_1} et Ω_{g_2} .

Un élément frontière K ($0 < \mathbb{1}_{\Omega_g|K}^h < d_p$) appartient alors à la bulle "la plus proche", *i.e.* à la bulle dont le barycentre précédemment calculé est le plus proche du barycentre de cet élément. La Figure 3.4 montre la partition du maillage en deux bulles effectuée par cet algorithme.

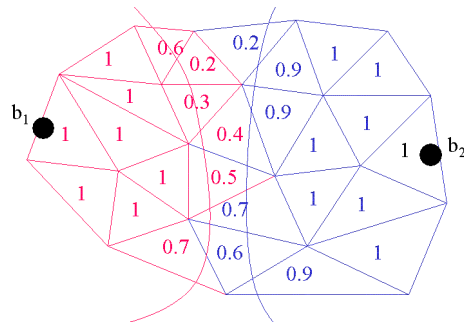


FIG. 3.4 – Partition finale du maillage en deux bulles distinctes

Nous donnons l'algorithme général de reconstruction des bulles. Soit *NumeroBulle* un tableau d'entiers de longueur le nombre d'éléments du maillage *NbElt*, et initialisé à 0. La *k* ième valeur de ce tableau, *NumeroBulle*[*k*] est destinée à être le numéro de la bulle présente sur le *k* ième élément de maillage. Par convention, si cet élément ne contient pas de gaz, alors *NumeroBulle*[*k*] = 0. L'objectif est donc de trouver les valeurs de *NumeroBulle*.

Nous appelons *fncarg* le tableau contenant les valeurs moyenne de $\mathbb{1}_{\Omega_g}$ sur l'intervalle de temps présent. L'entier *bulle* compte le nombre de bulles détectées.

Construction de l'intérieur

```

k ← 0
bulle ← 0
Tant que ( k < NbElt )
  Si ( (NumeroBulle[k] = 0) ET (fncarg[k] >= dp) )
    bulle ← bulle + 1
    CreerNouvelleBulle(k, bulle, NumeroBulle)
  Fin Si
  k ← k + 1
Fin Tant que

```

La fonction *CreerNouvelleBulle* qui prend en argument deux entiers et un tableau d'entiers se définit par :

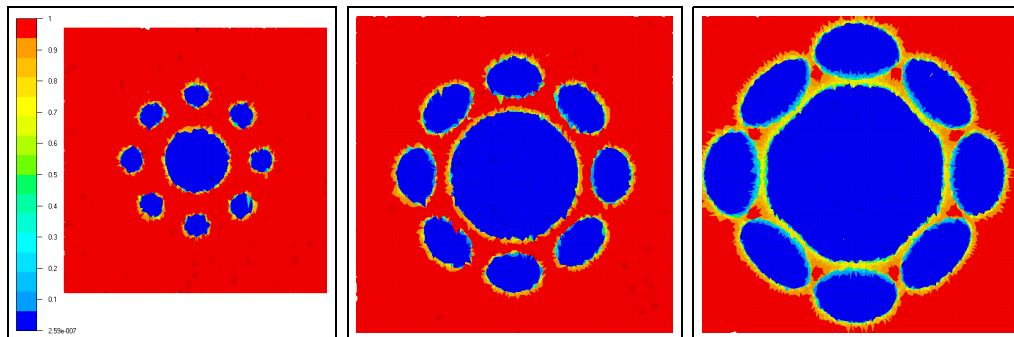
```

void CreerNouvelleBulle(int k, int bulle, int * NumeroBulle)
debut
  Définir un tableau d'entiers Pile, de longueur NbElt, initialisé à 0 partout
  longueur ← 0
  position ← 0
  NumeroBulle[k] ← bulle
  Pile[position] ← k
  Tant que (position <= longueur)
    EltLoc ← Pile[position]
    Pour chaque voisin de EltLoc
      Si ( (NumeroBulle[voisin] = 0) ET (fncarg[voisin] >= dp) )
        longueur ← longueur + 1
        Pile[longueur] ← voisin
        NumeroBulle[voisin] ← bulle
      Fin Si
    Fin Pour
    position ← position + 1
  Fin Tant que
Fin

```

L'algorithme présenté détecte la présence de chaque bulle et construit son intérieur. Le calcul des barycentres, ainsi que le traitement des éléments frontière ne présentent

pas de difficulté particulière. La Figure 3.5 montre une application de notre méthode. Huit bulles croissent autour d'une neuvième. Les Figures 3.5(a), 3.5(b) et 3.5(c) montrent la fonction caractéristique du liquide à trois étapes de l'expansion. Les Figures 3.5(d), 3.5(e) et 3.5(f) montrent les domaines $\Omega_{g_i}^h$ reconstitués et intervenant dans l'Equation (3.15).

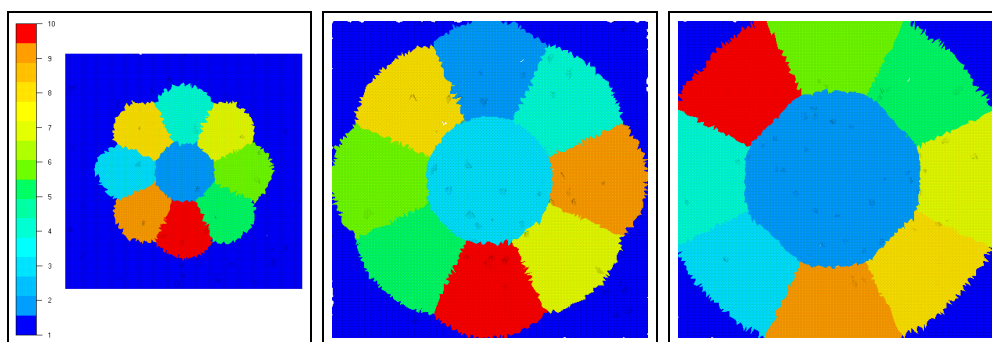


(a)

(b)

(c)

Fonction caractéristique du liquide



(d)

(e)

(f)

Partition comprenant le liquide (numéro 1 sur l'échelle) et neuf bulles

FIG. 3.5 – Expansion de huit bulles autour d'une neuvième. Evolution de la fonction caractéristique du gaz (haut) et partitions correspondantes (bas) indiquant le numéro du domaine auquel appartient chaque élément. Le domaine 1 est le liquide. Les domaines de 2 à 10 sont les neuf bulles

Remarquons que cet algorithme ne nécessite pas d'informations sur la position des bulles au temps précédant. Ainsi, les bulles sont gérées dynamiquement et leur nombre peut évoluer au cours du temps. C'est également la raison pour laquelle le numéro d'une même bulle peut évoluer au cours du temps comme sur la Figure 3.5.

La simulation de l'expansion de n bulles de gaz nécessite l'utilisation de deux fonctions caractéristiques (liquide et gaz) ainsi que d'un champ pression du gaz. Ceci implique, avec les conventions du paragraphes 2.5, le stockage de $6 \times NbElt$ valeurs, au lieu de $2n \times NbElt$ avec l'approche pleinement multidomaine. Le temps CPU est également fortement réduit, passant de plus de 48 heures pour l'expansion de 64

bulles avec la méthode pleinement multidomaine, à 10 heures en utilisant l'approche développée dans cette section, avec un maillage à 250 000 éléments.

Nous allons à présent étudier l'expansion d'un petit nombre de bulles afin de comparer et valider nos deux approches.

3.2.3 Application : simulation de l'expansion d'un système de bulles

Dans les simulations présentées par la suite, le domaine de calcul Ω_h considéré est la sphère déjà présentée sur la Figure 2.16. La contrainte normale imposée sur la surface de cette sphère est nulle : $p_{ext} = 0$. Nous plaçons dans Ω_h un système de bulles et observons leurs interactions.

3.2.3.1 Interaction de deux bulles

Nous plaçons dans Ω_h deux bulles ayant initialement les mêmes pressions internes, 100 Pa. La différence initiale de pression $p_g - p_{ext}$ est donc de 100 Pa. Ce choix est arbitraire et fixe une échelle de temps arbitraire. Ceci signifie que la multiplication par un facteur n de la différence $p_g - p_{ext}$ entraîne la division par un facteur n du temps d'expansion.

Les centres de ces deux bulles sont $(-2.10^{-4}, 0, 0)$ et $(0, 0, 0)$ respectivement, tandis que leurs rayons initiaux sont 5.10^{-5} et 10^{-4} .

Nous allons d'abord détailler l'expansion de ce système simulée à l'aide de la méthode pleinement multidomaine (Figures 3.6, 3.7 et 3.8). Puis, nous comparerons les résultats obtenus par les approches pleinement et formellement multidomaines.

Avec l'approche pleinement multidomaine

La Figure 3.6 montre l'expansion de ce système à deux bulles, avec d'une part, l'isovaleur 1/2 de la fonction caractéristique du gaz (Figures 3.6(a), 3.6(b) et 3.6(c)), et d'autre part les isovaleurs de cette fonction sur un plan de coupe (Figures 3.6(d), 3.6(e) et 3.6(f)). Notons que l'utilisation d'un plan de coupe induit un effet purement visuel de diffusion de la fonction caractéristique. En effet, le post-processeur utilisé pour visualiser les résultats interpole cette fonction sur le plan de coupe, passant au travers des éléments du maillage.

Ceci étant, la méthodologie que nous avons mise en place permet d'étudier l'interaction de deux bulles. La première composante du champ de vitesse calculé au cours de cette expansion est représentée sur la Figure 3.7. Au début de l'expansion, lorsque les deux bulles sont assez "éloignées", la vitesse atteint ses extrema aux interfaces liquide - gaz, et en particulier à la surface de la plus grande bulle, laquelle présente ainsi le taux d'expansion le plus élevé, conformément au modèle analytique du paragraphe 2.6.1. Puis, les bulles interagissant, les extrema se situent aux interfaces liquide - système de bulles.

La Figure 3.8 montre l'évolution du rayon (Figure 3.8(a)) et de la pression interne (Figure 3.8(b)) de ces deux bulles au cours du temps. Remarquons que lors du premier incrément, la r-adaptation de maillage entraîne une perte de volume des bulles de gaz. Ceci explique les pressions des bulles supérieures à la pression initiale

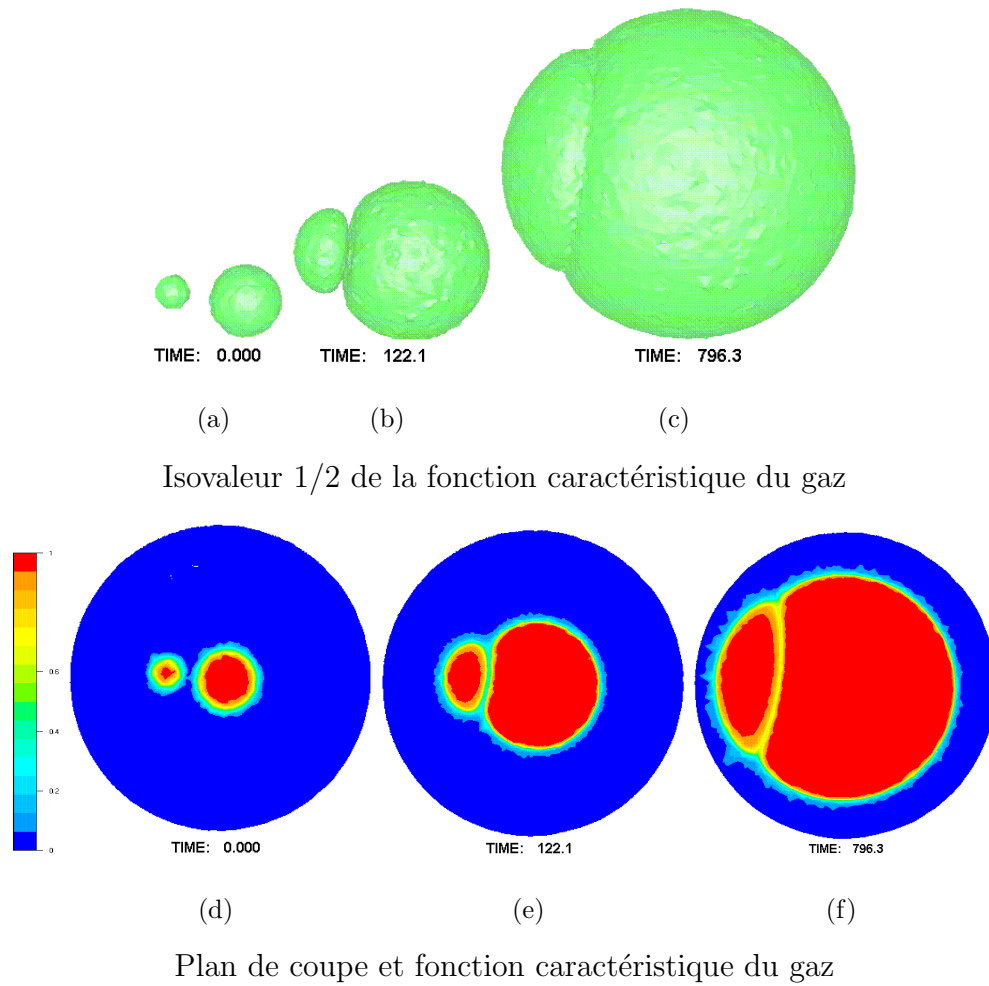


FIG. 3.6 – Expansion de deux bulles (rapport initial des rayons : 2). Approche pleinement multidomaine

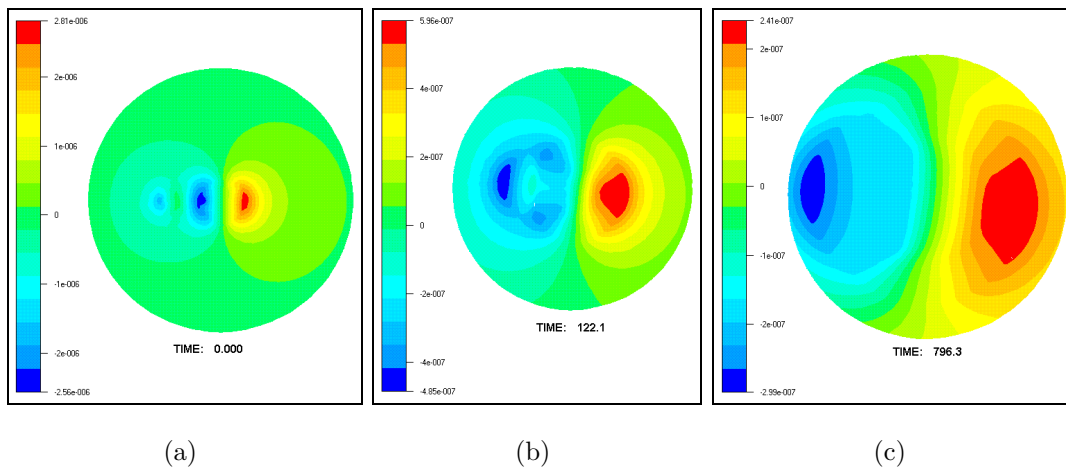


FIG. 3.7 – Isovaleurs de la première composante du champ vitesse \mathbf{v}_h durant l'expansion de deux bulles. Approche pleinement multidomaine

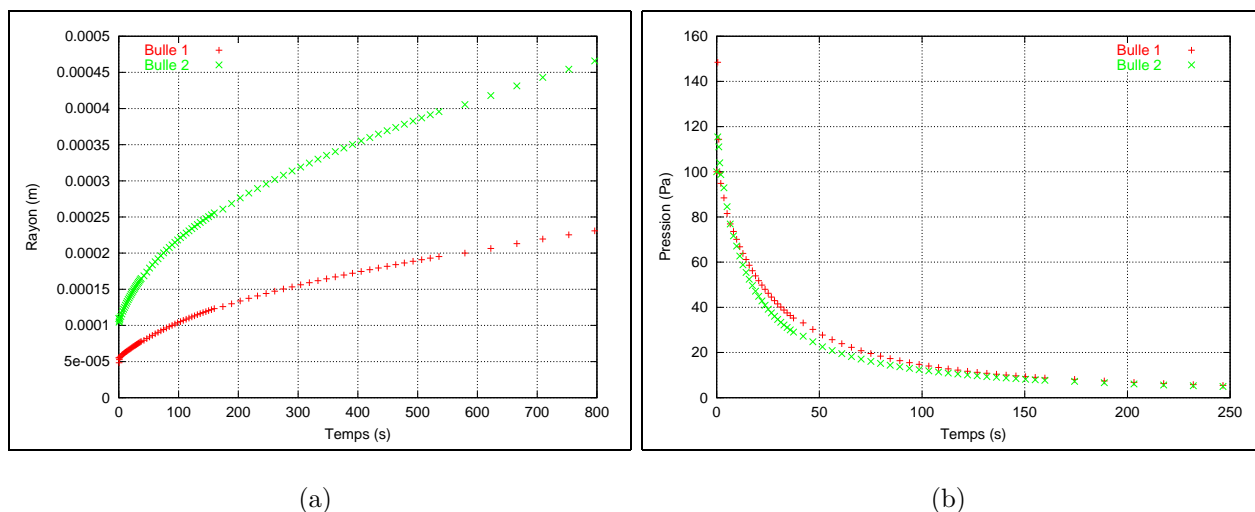


FIG. 3.8 – Evolution du rayon (à gauche) et de la pression interne (à droite) des deux bulles représentées sur la Figure 3.6. Approche pleinement multidomaine

(100 Pa) lors des 2 premiers incréments. L'état thermodynamique du système ne se trouve pas modifié par ces perturbations initiales : on a toujours $pV = \text{constante}$. De plus, lors des incréments suivants, le maillage étant déjà adapté aux contours du système, la r-adaptation de maillage n'occasionne plus de perturbation, mais, au contraire, améliore la précision sur les interfaces liquide - gaz, permettant alors de rendre compte de la forme des bulles.

Nous pouvons conclure qu'avec un rapport de rayons initiaux de 2 et les positions choisies, la plus petite bulle est "absorbée" par la plus grande. En effet, la Figure 3.8(a) montre que l'écart entre les deux rayons augmente au cours de l'expansion. Dans le même temps, la pression de la plus petite bulle devient d'abord supérieure à celle de la plus grande, avant de tendre avec cette dernière vers la pression extérieure (qui, ici, est nulle).

Considérons à présent la zone liquide située entre les deux bulles. Avec l'expansion, les deux bulles se rapprochent. Cette zone devient donc de plus en plus fine, si bien qu'il est difficile de la décrire correctement. Les fonctions caractéristiques du liquide et du gaz diffusent : en-deçà d'une certaine épaisseur de la zone inter-bulles, la fonction liquide y prend des valeurs inférieures à $1/2$, tandis que les valeurs de la fonction gaz y sont supérieures à $1/2$ (voir Figure 3.6(f)). Ce phénomène, dû au fait que le maillage n'est plus assez fin pour décrire sans diffusion l'interface liquide - gaz provoque un effet visuel de coalescence lorsque l'on regarde l'isovaleur $1/2$ des fonctions caractéristiques (on considère que l'isovaleur $1/2$ d'un domaine représente la frontière de ce domaine). Cet effet signifie donc simplement que le liquide est représenté de manière diffuse sur les éléments inter-bulles (Figure 3.6(f)). De plus, la Figure 3.8(b) nous montre que dans ce cas la pression des deux bulles s'égalise. Les deux bulles se comportent ainsi comme une seule bulle. Si l'expansion continue, le liquide séparant les deux bulles est repoussé hors de la zone inter-bulle, et il y a réellement coalescence (voir Figure 3.26).

Avec l'approche formellement multidomaine

Nous confrontons maintenant les résultats obtenus par la méthode formellement multidomaine à ceux présentés ci-dessus. Le paramètre de précision d_p est pris à 0,6. Ceci signifie que, si la fonction caractéristique du gaz a des valeurs supérieures à 0,6 dans la zone séparant les deux bulles, alors notre algorithme ne détecte plus qu'une seule bulle dans le domaine gazeux. La Figure 3.9 montre les isovaleurs de $\mathbb{1}_{\Omega_g}$ sur un plan de coupe, au cours de l'expansion. Deux bulles sont détectées et reconstituées jusqu'au temps $t = 461,2$ (Figure 3.9(c)). Au-delà de cet instant, du fait de la diffusion de $\mathbb{1}_{\Omega_g}^h$, le gaz est considéré comme étant constitué d'une seule bulle. Les formes des bulles de la Figure 3.9 sont à rapprocher de celles de la Figure 3.6 pour des temps équivalents : une bonne similarité est observée.

Les isovaleurs du champ de pression du gaz p_g^h sont indiquées sur la Figure 3.10. Nous constatons que ce champ suit bien la fonction caractéristique du gaz : à chaque instant et dans chaque bulle de gaz il est égal à cette fonction multipliée par une constante scalaire, et s'annule dans la partie liquide. Comme avec la version pleinement multidomaine, nous observons que la plus petite bulle se retrouve d'abord en surpression par rapport à la plus grande (Figures 3.10(b) et 3.10(c)), avant que les pressions de ces deux bulles ne s'égalisent (Figure 3.10(d)) pour tendre vers p_{ext} qui, ici, est nulle.

Les isovaleurs de la première composante du champ de vitesse sont représentées sur la Figure 3.11, et sont à comparer avec celles obtenues par la version pleinement multidomaine (Figure 3.7). Les profils de vitesse sont quasiment les mêmes, et les valeurs proches. Nous ne pouvons espérer avoir exactement les mêmes valeurs (mis à part au premier incrément) étant donné que les deux approches sont différentes. Cependant, les évolutions des taux de gaz (rapport entre volume du gaz et volume du domaine de calcul) obtenues avec les deux approches sont très similaires comme le prouve la Figure 3.12, et montrent ainsi l'équivalence entre les deux approches.

3.2.3.2 Interaction de trois à neuf bulles

Nous donnons ici quelques exemples d'expansion de systèmes de bulles. Les observations du paragraphe 3.2.3.1 sont toujours valides. Nous nous intéressons à la description des formes de bulle obtenues. Les bulles ont initialement même volume et même pression. Les différences de taille et de formes apparaissant au cours de l'expansion sont donc uniquement dues à l'interaction entre les bulles, et à leur disposition au sein du système.

Les Figures 3.13 et 3.14 présentent l'expansion d'un système à trois et huit bulles, respectivement. Nous montrons le système initial, le système après expansion, et une des bulles du système après expansion (Figures 3.13(c) et 3.14(c)). Remarquons la préservation de la symétrie au cours de l'expansion du système à huit bulles.

Les systèmes représentés sur les Figures 3.15 et 3.16 sont des exemples où des bulles "pétales" croissent autour d'une bulle centrale. Des études de stabilité de tels systèmes réalisées dans le cadre de mousses savon, et basées sur des critères de minimisation d'énergie, donc de surface, peuvent être trouvées dans [67] et [24]. Remarquons ici la capacité de notre méthode de transport de domaine à décrire des domaines plutôt "cubiques" à parois incurvées (Figures 3.15(c)), ou des domaines

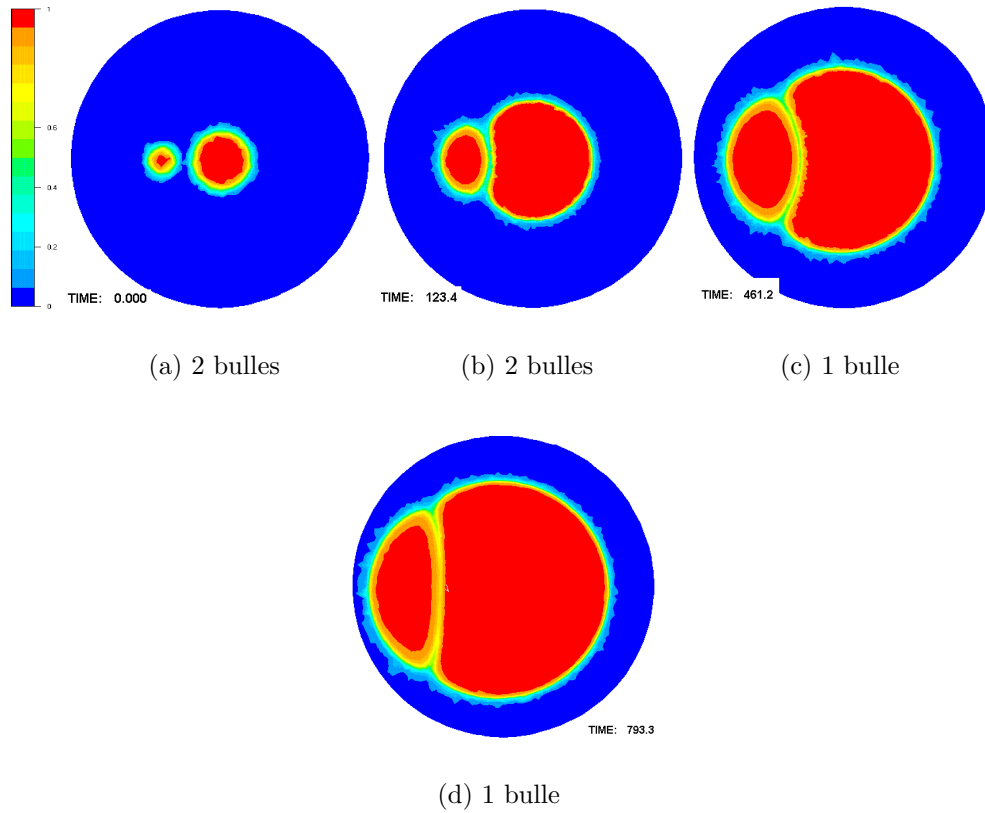


FIG. 3.9 – Expansion de deux bulles. Isovaleurs de la fonction caractéristique du gaz sur un plan de coupe et nombre de bulles détectées avec l'approche formellement multidomaine

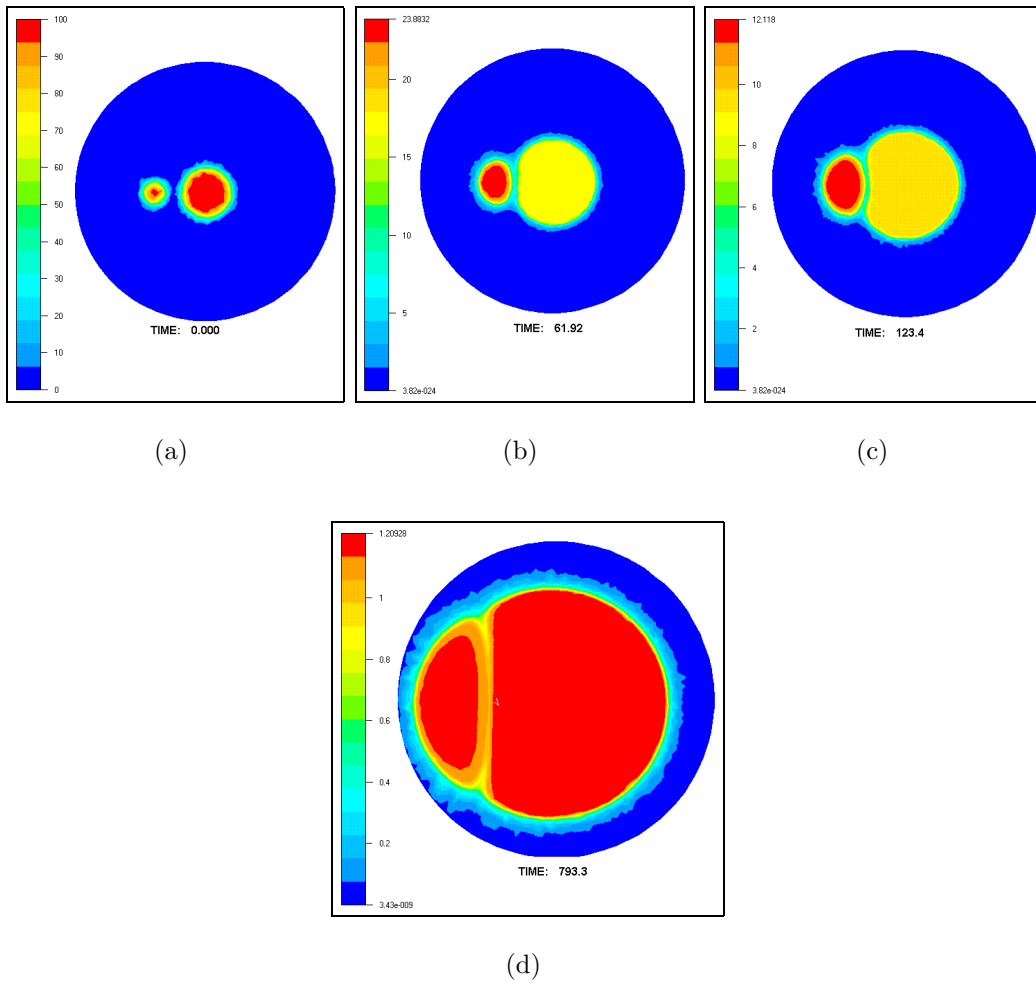


FIG. 3.10 – Isovaleurs du champ pression du gaz p_g^h durant l'expansion de deux bulles. Approche formellement multidomaine

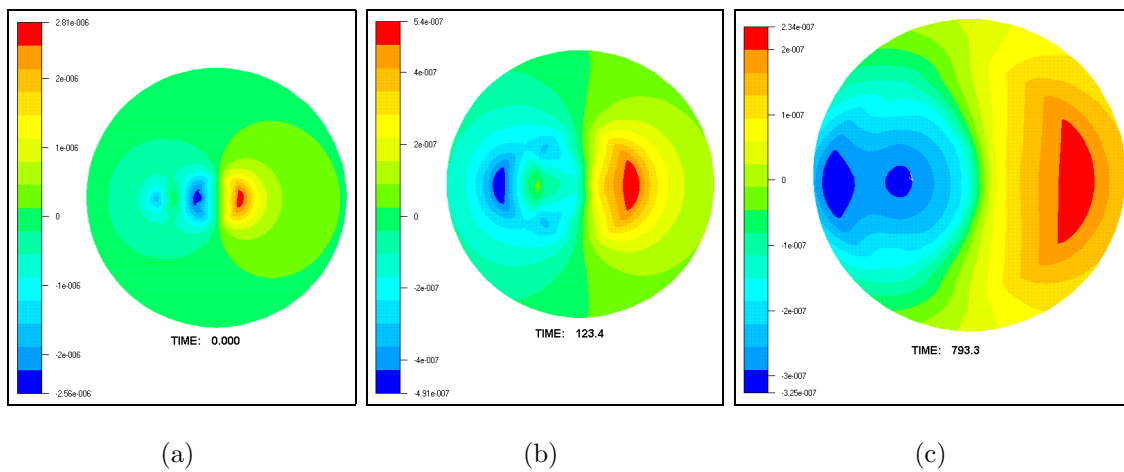


FIG. 3.11 – Isovaleurs de la première composante du champ vitesse \mathbf{v}_h durant l'expansion de deux bulles. Approche formellement multidomaine

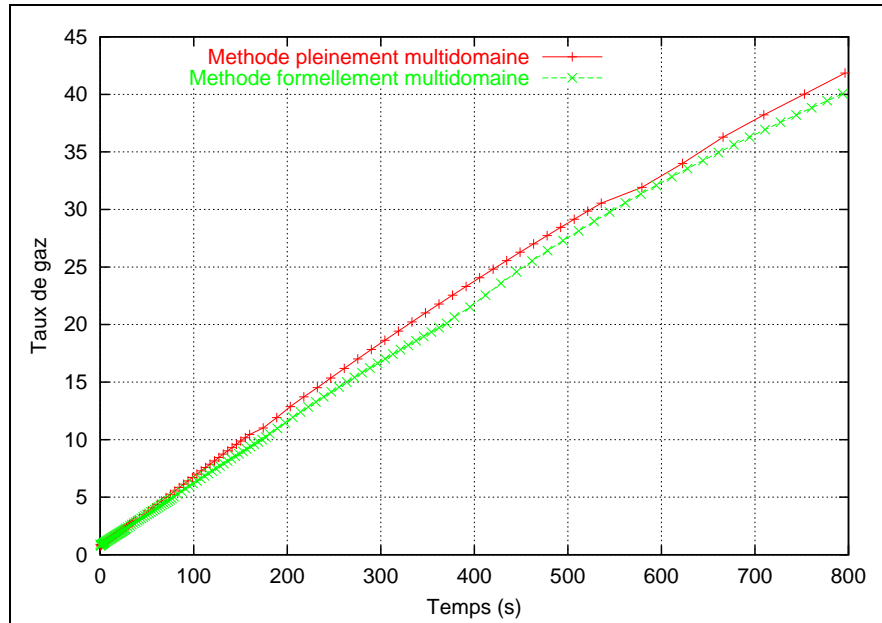


FIG. 3.12 – Comparaison de l'évolution du taux de gaz lors de l'utilisation de la méthode pleinement multidomaine et de la méthode formellement multidomaine

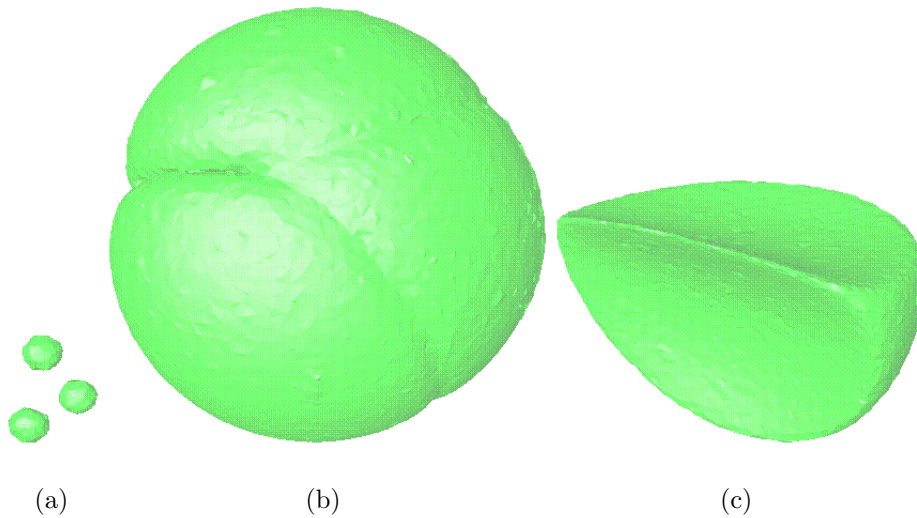


FIG. 3.13 – Expansion de trois bulles : système initial, système après expansion et une des bulles du système final

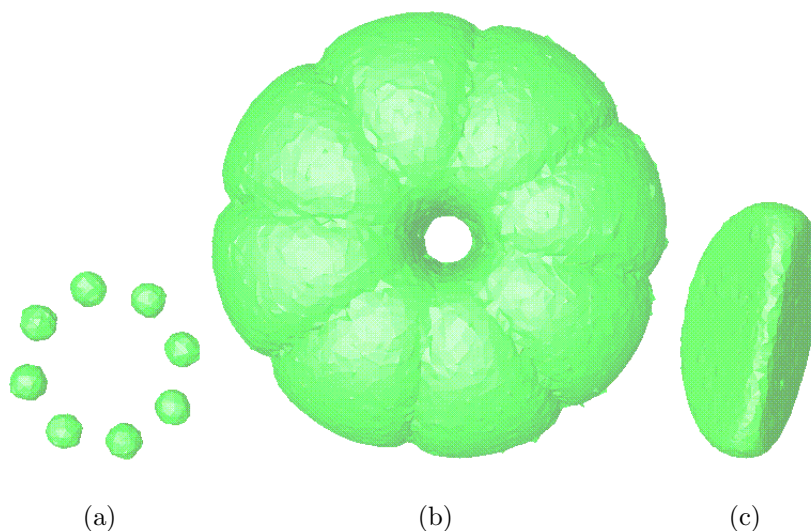


FIG. 3.14 – Expansion de huit bulles : système initial, système après expansion et une des bulles du système final

cylindriques comme la bulle centrale de la Figure 3.16(c).

3.2.3.3 Structure de Kelvin

En 1887 Lord Kelvin, qui fut un précurseur dans l'étude des mousses, posa la question de savoir quelle forme géométrique peut remplir un volume en minimisant les interfaces. Autrement dit, quelle est la forme pouvant prétendre à modéliser une cellule élémentaire de mousse à l'équilibre. Il proposa la forme montrée sur la Figure 3.17(d), baptisée tétrakaïdécaèdre, ou structure de Kelvin. Cette forme est celle de la bulle centrale après expansion du système de la Figure 3.17 (voir [68]). Bien que la structure de Kelvin puisse servir à modéliser une mousse parfaitement ordonnée, il a été prouvé que ce n'est pas la forme optimale en terme de minimisation de surface (voir [69] et [49]). De plus, le tétrakaïdécaèdre, comme d'autres structures plus optimales, ne sont que rarement observées dans les mousses réelles [68].

Nous déduisons de ce qui précède que la méthodologie développée est apte à prédire l'expansion d'un système à n bulles dans une matrice liquide. Ceci signifie une bonne description des interfaces liquide - gaz et des interactions entre bulles, grâce à la méthode Galerkin discontinu mise en place et couplée avec une technique de r-adaptation de maillage. Ceci implique également une bonne prédiction des champs de vitesse et de pression, ce que l'on avait déjà vu au chapitre précédent en validant notre couplage liquide - gaz lors de l'expansion d'une seule bulle. L'étape suivante est la simulation, non plus seulement de l'expansion de n bulles, mais de l'expansion d'un échantillon de mousse contenant ces n bulles. Nous commençons par quelques considérations sur la notion de volume représentatif, avant de modéliser celui-ci et de donner des exemples de simulations d'expansions de structures de mousses.

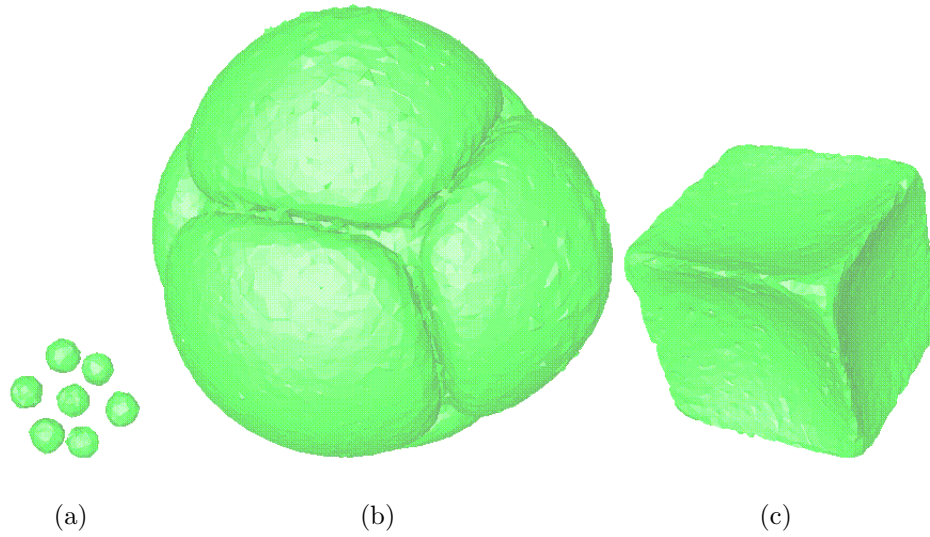


FIG. 3.15 – Expansion de six bulles autour d'une septième : système initial, système après expansion et bulle centrale après expansion

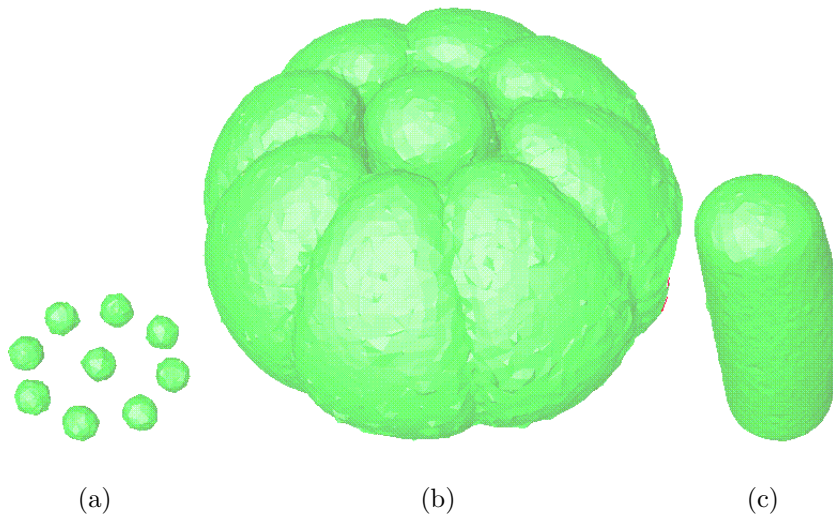


FIG. 3.16 – Expansion de huit bulles autour d'une neuvième : système initial, système après expansion et bulle centrale après expansion

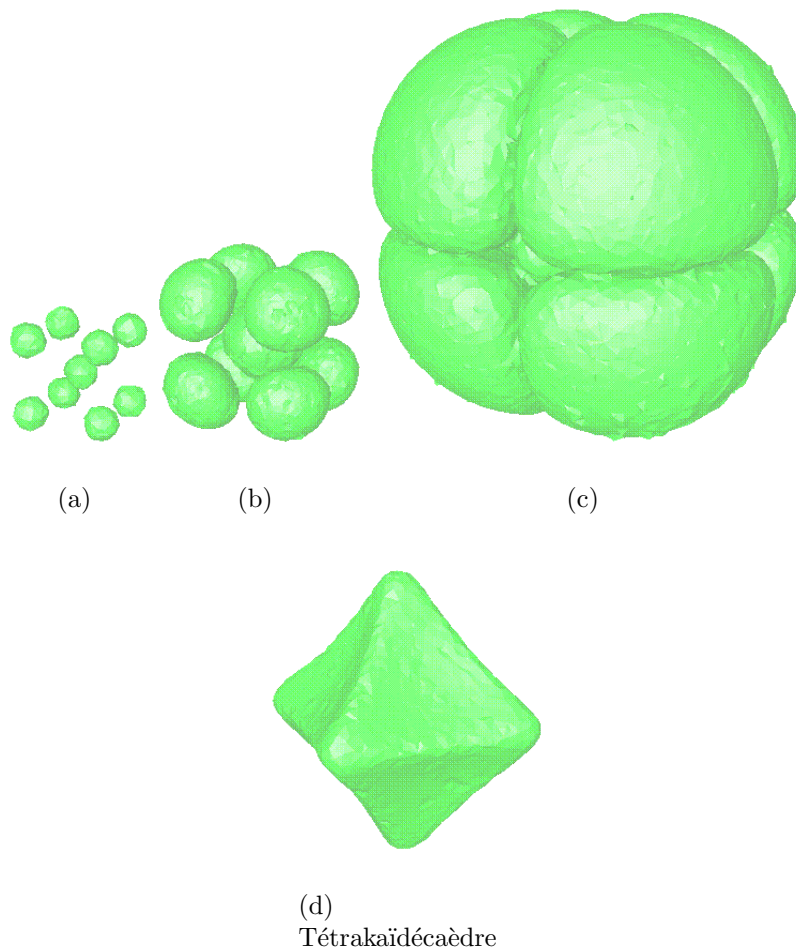


FIG. 3.17 – Expansion d'un "système cubique centré" de neuf bulles : état initial, intermédiaire et final, et bulle centrale du système final (tétrakaïdécaèdre)

3.3 Du volume représentatif de la structure d'une mousse au volume de calcul

Supposons que nous disposions de moyens informatiques suffisants pour représenter et prendre en compte la totalité des bulles dans nos simulations d'expansion de mousse. Idéalement, et même si la complexité de la physique mise en jeu nous impose quelques réserves sur ce sujet [68], nous serions à même de déterminer la structure finale de la mousse, pourvu que l'on connaisse une distribution initiale de bulles, donnée par la germination, les propriétés du gaz et du polymère, et les conditions du procédé de fabrication.

Les réserves émises viennent du fait que la mousse est un matériau à mémoire [68], pour lequel on ne connaît jamais totalement l'état initial (germination hétérogène), voir même les conditions de fabrication, puisque l'on peut supposer que celles-ci ne sont pas entièrement contrôlées. De plus la mousse possède différentes échelles physiques, avec notamment la présence d'agents tensioactifs agissant à l'échelle moléculaire. Ce qui implique que son comportement ne peut être simplement déduit du comportement du gaz et du polymère (voir chapitre 1).

Cependant, même en se mettant dans le cadre idéal où tout est connu, les capacités informatiques actuelles n'offrent, loin s'en faut, ni les ressources mémoire, ni la vitesse de calcul nécessaires à une simulation de l'intégralité de la structure. Ainsi, même s'il est difficile de donner une estimation du nombre de bulles présentes dans une mousse, puisque celui-ci varie fortement selon les cas, nous fournissons, pour fixer les idées, l'évaluation suivante, en nous basant sur [31] et [32] : entre 10^9 et 10^{15} bulles par mètre cube...

La totalité de la structure ne pouvant être prise directement en compte, deux solutions s'offrent principalement à nous :

- Modéliser et simuler une structure idéale, par exemple périodique, faite de cellules minimisant les interfaces liquide - gaz [42], [68], [69]. Ainsi, les cellules peuvent être modélisées par un empilement de sphères lorsque la fraction liquide n'est pas négligeable [59]. Dans ce cas, une méthode d'homogénéisation permet d'effectuer le passage micro - macro [8], [62].
- Modéliser et simuler une certaine fraction de la structure, et non la structure dans sa totalité, en considérant deux contraintes : cette fraction doit être suffisamment grande pour être représentative de la structure de la mousse et du comportement du matériau ; cette fraction doit être suffisamment petite pour être traitée par les moyens informatiques actuels.

C'est cette deuxième approche que nous choisissons pour la suite. La fraction de la structure simulée s'appelle volume représentatif. Nous allons expliciter cette notion.

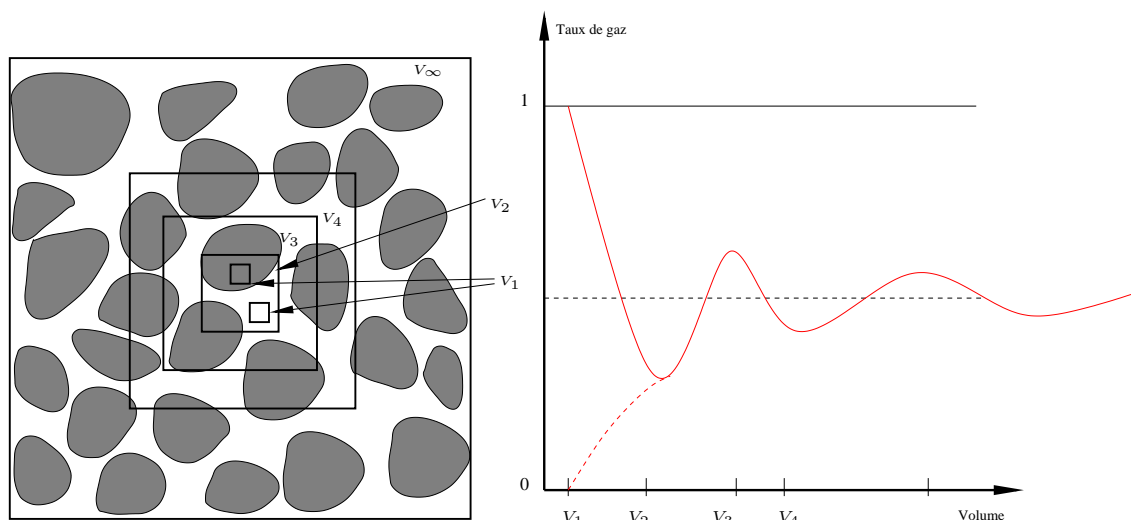
3.3.1 Définition et existence d'un volume représentatif

Le volume élémentaire représentatif (VER) est défini comme étant un volume V d'un milieu hétérogène, suffisamment grand pour être statistiquement représentatif du matériau, *i.e.* pour inclure toute la gamme des hétérogénéités microstructurales présentes dans le matériau [39].

La question centrale dans la définition du VER est donc celle de sa taille. Celle-ci dépend de la propriété que l'on souhaite étudier sur le VER. Prenons l'exemple du taux de gaz G d'une mousse, défini comme le rapport entre le volume du gaz contenu dans la mousse et le volume total de cette mousse. Nous prélevons, successivement, des échantillons de mousse de volumes V croissants. Idéalement, le taux de gaz $G(V)$ calculé dans ces volumes tend vers une limite G_∞ lorsque V augmente (Figure 3.18). G_∞ est le taux de gaz global de la mousse. Ainsi, pour l'étude du taux de gaz, le volume V_{VER} du VER est tel que :

$$\forall V \subset \text{mousse}, V \supset V_{VER}, |G(V) - G_\infty| < \varepsilon \quad (3.20)$$

La définition de la taille du VER se fait donc à une erreur donnée ε près [39]. Remarquons également que (3.20) définit l'échelle macroscopique, à cette même erreur près.



(a) Sélection de plusieurs volumes.

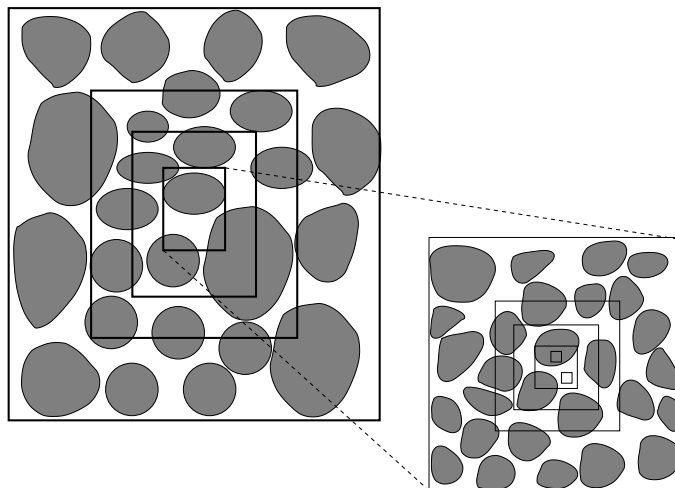
(b) Taux de gaz par volume.

FIG. 3.18 – Notion de volume élémentaire représentatif (VER)

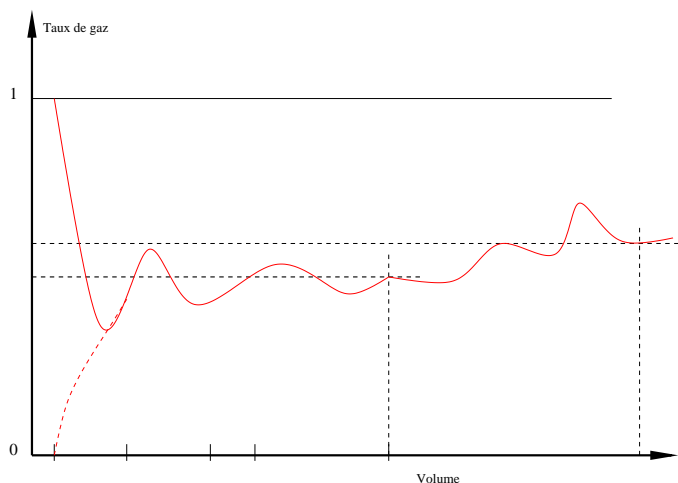
Par définition, toute propriété d'une mousse devrait être constante et indépendante de l'échelle pour des volumes supérieurs à V_{VER} . Or, dans le premier chapitre, nous avons insisté sur le fait que la mousse est un matériau hétérogène à toutes les échelles, depuis l'échelle moléculaire (présence de tensioactifs par exemple), jusqu'à celle du procédé de fabrication, avec une germination hétérogène et des gradients de température entraînant des variations de propriétés sur toute la pièce. Dans ces conditions parler de volume élémentaire représentatif n'a pas toujours de sens.

Ceci étant, l'impossibilité de définir un VER en toute généralité pour une mousse ne change rien à la nécessité de définir un volume représentatif. Sans cela, notre travail n'aurait plus lieu d'être. Nous définissons donc un volume représentatif $V(X)$ comme étant un volume suffisamment grand pour décrire la microstructure de la mousse au

voisinage d'un point X de celle-ci. Ainsi, dans l'exemple du taux de gaz, le taux global G_∞ ne représente plus la limite (au sens (3.20)) de $G(V)$ pour V assez grand (voir Figure 3.19). Par contre, l'existence du volume représentatif au point X revient à dire que $G(V)$ présente un plateau pour un V assez grand, centré en X . Ce plateau définit la taille du volume représentatif en X .



(a) Hétérogénéités à plusieurs échelles.



(b) Taux de gaz par volume.

FIG. 3.19 – Notion de volume représentatif dans un milieu hétérogène.

3.3.2 Modélisation d'un volume représentatif

Nous définissons un domaine de calcul Ω contenant une matrice liquide et n bulles de gaz. Ω modélise le volume représentatif $V(X)$.

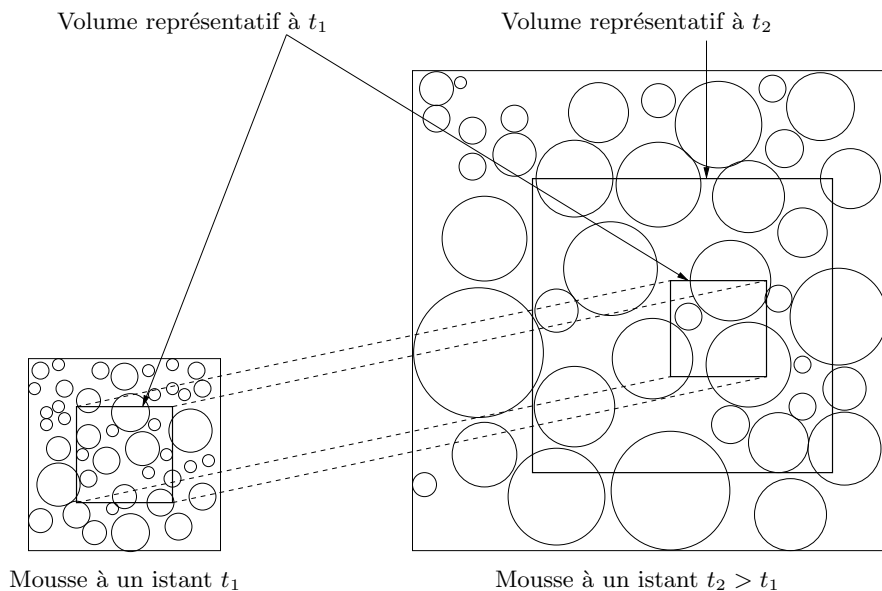


FIG. 3.20 – Changement d'échelle lors de l'expansion d'une mousse

Le processus qui nous intéresse, l'expansion de mousse, n'est pas stationnaire. En particulier, le volume final de la mousse peut être jusqu'à 30 fois celui du volume liquide initial (voir les sites web des entreprises productrices de mousse polymère, comme www.shopmaninc.com). Les dimensions physiques du volume représentatif augmentent donc durant l'expansion de la mousse. Ainsi, la Figure 3.20 montre la même mousse à deux instants, t_1 et t_2 , avec $t_1 > t_2$. Entre ces deux instants il y a expansion. Donc, le volume représentatif valide à l'instant t_1 , ne l'est plus à t_2 . Il est alors nécessaire de redimensionner ce volume pour qu'il soit à nouveau représentatif. Au vu de cet exemple, la taille du volume de calcul doit suivre l'expansion de la mousse au cours des simulations d'expansion.

Concernant l'échelle physique du volume de calcul, les réflexions du paragraphe 2.6.2.1 sont toujours valides, à savoir qu'*a priori* le volume de calcul n'a pas d'échelle fixée. Ceci peut s'interpréter comme une propriété d'auto-similarité de la structure : quelle que soit l'échelle à laquelle on la regarde on retrouve les mêmes motifs.

3.3.2.1 Condition aux bords du domaine de calcul

La condition aux bords du domaine de calcul est, comme au chapitre précédent, Equation 2.9, de type contrainte normale imposée : $\sigma \mathbf{n} = -p_{ext} \mathbf{n}$. Cette condition traduit la contrainte exercée par le milieu extérieur (la mousse) sur l'échantillon, considéré. Il s'agit donc d'un couplage micro-macro rattachant le volume de calcul Ω à un point X précis de la mousse, conformément à la définition du volume représentatif.

Remarquons que les conditions périodiques employées pour simuler l'évolution d'une mousse vers son état d'équilibre (voir paragraphe 1.3.3.1 et [68]), et permettant d'éliminer tout effet de bord, ne sont ici pas viables, du fait d'une part de ce couplage micro - macro, et d'autre part de la simulation d'une expansion.

La proposition 2.1 donnant la valeur moyenne de la contrainte sur le volume de calcul est toujours valable et se généralise ainsi, dans le cas où le gaz Ω_g est constitué de n bulles distinctes Ω_{g_i} :

$$\frac{1}{|\Omega_l|} \int_{\Omega_l} \sigma = \sum_{i=1}^n \frac{|\Omega_{g_i}|}{|\Omega_l|} (p_{g_i} - p_{ext})I - p_{ext}I \quad (3.21)$$

3.4 Simulation de l'expansion d'un échantillon de mousse

La méthodologie développée permet de simuler l'expansion de n bulles dans le volume de calcul Ω . Considérons un système régulier de 125 bulles croissant dans le volume de calcul. La Figure 3.21 montre l'isovaleur 1/2 de la fonction caractéristique du gaz au cours de l'expansion d'un tel système. Le domaine de calcul Ω est un cube de côté 10^{-3} maillé avec 250 000 éléments tétraédriques. Le système initial est celui de la Figure 3.21(a) : toutes les bulles ont même volume et même pression interne. La simulation de l'expansion de ce système jusqu'à son état final (Figure 3.21(i)) comporte 269 incréments de temps (pas de temps variable). Le CPU correspondant est de 12 heures et 20 minutes sur un Pentium III en séquentiel.

Remarquons d'abord que la régularité du système est conservée durant l'expansion. De plus, au cours de celle-ci, les bulles interagissent et adoptent une forme polyédrique. Des parois inter-cellulaires apparaissent ainsi, constituées de liquide piégé entre plusieurs bulles de gaz (Figures 3.21(g) - 3.21(i)). Enfin, comme mentionné au paragraphe 3.2.3.1, il arrive un moment de l'expansion où le maillage n'est plus assez fin pour représenter toutes les interfaces liquide - gaz. C'est le cas à partir de la Figure 3.21(f) : l'épaisseur du liquide entre deux bulles est trop fine pour être représentée par l'isovaleur 1/2 avec ce maillage, ce qui donne l'effet visuel de coalescence.

Ces premières constatations étant faites, l'enseignement essentiel de cette simulation est le changement d'échelle se produisant dans le système avec l'expansion, et qui, ici, n'est pas pris en compte. En effet, l'expansion des bulles provoque l'écoulement du liquide à travers la frontière du domaine de calcul (à partir de la Figure 3.21(c)). Il s'en suit qu'à la fin de la simulation, seule la bulle centrale reste intégralement dans le domaine Ω (Figures 3.21(g) - 3.21(i)), les autres bulles étant sorties avec le liquide. Ainsi, la Figure 3.21(i) représente un zoom sur la structure de la mousse décrite initialement.

Afin de compenser ce changement d'échelle, nous faisons subir au domaine de calcul Ω une transformation globale d'expansion.

3.4.1 Expansion du domaine de calcul : prise en compte du changement d'échelle

Nous choisissons une transformation globale de Ω répondant aux deux critères suivants :

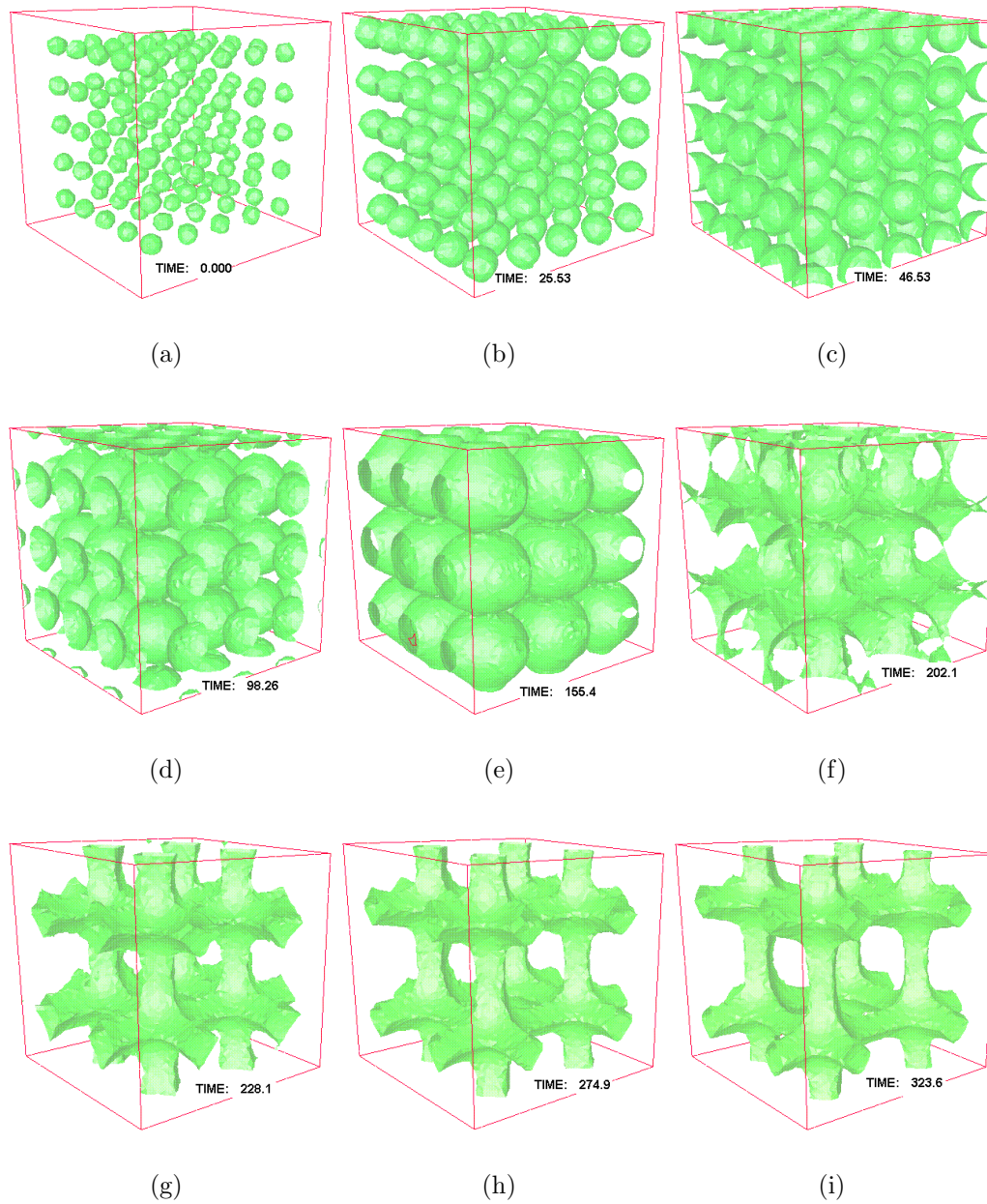


FIG. 3.21 – Illustration du phénomène de changement d'échelle lors de l'expansion d'un système de bulles dans le volume de calcul

- Cette transformation permet de conserver la même masse de liquide dans Ω tout au long du calcul. Le polymère étant considéré comme incompressible, la conservation de la masse équivaut à la conservation du volume de polymère dans Ω .
- Cette transformation traduit un changement d'échelle. Elle doit conserver la géométrie de Ω , *i.e.*, les angles et les rapports de longueur.

La transformation correspondant à ces deux critères est l'homothétie centrée.

A l'instant initial $\Omega(0)$ est connu. Nous identifions alors l'ensemble des points de $\Omega(0)$ avec leurs coordonnées X_0 de sorte que l'on peut écrire :

$$\Omega(0) = \{X_0 \in \Omega(0) \subset \mathbb{R}^d\} \quad (3.22)$$

Le domaine de calcul est alors défini, au cours de l'expansion, par :

$$\Omega(t) = \{X(t) \in \mathbb{R}^d; \frac{dX}{dt} = \mathbf{v}_e(X), X(0) = X_0\} \quad \forall t \in [0, \Theta] \quad (3.23)$$

\mathbf{v}_e est la vitesse d'expansion de Ω . La conservation de la quantité de liquide dans Ω s'écrit par l'égalité des flux :

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n} = \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (3.24)$$

L'équation (3.24) équivaut également, par le théorème de la divergence à :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v}_e = \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (3.25)$$

Choisissons à présent la forme de \mathbf{v}_e dans Ω de telle sorte que la géométrie soit préservée :

$$\mathbf{v}_e(X) = L(X - C) + T \quad (3.26)$$

\mathbf{v}_e est donc prise comme la somme d'une homothétie de rapport L et de centre C , et d'une translation par un vecteur T . C est choisi comme le centre du domaine de calcul afin de préserver le rapport des longueurs. Étant donné que Ω est un cube ou une sphère, ce choix ne pose pas de problème de définition. T est un vecteur constant n'intervenant donc pas dans l'expression (3.25).

Tenant compte de cette expression dans (3.25), on obtient :

$$L \int_{\Omega} \nabla \cdot X = \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (3.27)$$

d'où l'expression de L :

$$L = \frac{1}{d|\Omega|} \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \quad (3.28)$$

Le choix de T est arbitraire. Nous prenons ce vecteur comme égal à la vitesse moyenne dans Ω_l :

$$T = \frac{1}{|\Omega_l|} \int_{\Omega_l} \mathbf{v} \quad (3.29)$$

Finalement, à tout instant $t \in]0, \Theta[$, le domaine de calcul $\Omega(t)$ est défini par l'ensemble des point $X \in \mathbb{R}^d$ vérifiant :

$$\boxed{\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \mathbf{v}_e(X) &= \frac{X-C}{d|\Omega|} \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{|\Omega_l|} \int_{\Omega_l} \mathbf{v} \\ X(0) &= X_0 \end{cases}} \quad (3.30)$$

Remarquons qu'en faisant l'hypothèse que $\partial\Omega \cap \partial\Omega_l = \partial\Omega$, alors \mathbf{v}_e se réécrit en : $\mathbf{v}_e(X) = \frac{X-C}{d|\Omega|} \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} + T$. Cependant en pratique, cette hypothèse n'est pas assurée. C'est pourquoi nous laissons \mathbf{v}_e sous la forme décrite par (3.30).

L'expression (3.30) nécessite quelques commentaires. L'objectif est de conserver le volume de liquide présent dans Ω au cours de l'expansion. Nous avons : $|\Omega_l| = |\Omega| - |\Omega_g|$, où $|\Omega_l|$ est le volume du liquide, et $|\Omega_g|$ celui du gaz. La conservation de $|\Omega_l|$ équivaut donc : $\frac{d|\Omega_l|}{dt} = \frac{d|\Omega_g|}{dt}$. L'incompressibilité du polymère implique que $\frac{d|\Omega_g|}{dt} = \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_l} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$. De plus, par la proposition B.1 de l'Annexe B, nous avons : $\frac{d|\Omega|}{dt} = \int_{\partial\Omega} \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n}$. Par ce raisonnement, nous retrouvons ainsi l'égalité des flux écrite en (3.24).

Par la suite, nous verrons que, dans les simulations utilisant la vitesse d'expansion définie par (3.30), le volume de liquide est exactement conservé jusqu'à ce que les bulles atteignent la frontière $\partial\Omega$. Puis, le volume de liquide décroît dans Ω . Nous n'avons pas d'explication satisfaisante à ce phénomène. Remarquons que, considérer le flux de \mathbf{v}_e sur $\partial\Omega \cap \partial\Omega_l$ dans (3.24) entraîne un gain de volume de liquide lorsque les bulles sortent.

Ceci étant, nous allons voir que, par la méthode d'expansion de domaine décrite, nous pouvons préserver la quantité de liquide jusqu'à avoir environ 65% de gaz. D'autre part, en considérant suffisamment de bulles dans Ω , nous pouvons considérer la structure de la mousse dans un volume intérieur à Ω , évitant ainsi les effets de bord.

3.4.1.1 Discrétisation : vitesse de maillage

La vitesse d'expansion de domaine est prise en compte par une vitesse de maillage, notée \mathbf{v}_{eh} , définie en chaque noeud du domaine Ω_h , de coordonnées X_h par :

$$\mathbf{v}_{eh}(X_h) = \frac{X_h - C_h}{d|\Omega_h|} \int_{\partial\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{\int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h} \int_{\Omega_h} \mathbb{1}_{\Omega_l}^h \mathbf{v} \quad (3.31)$$

Cette vitesse de maillage est prise en compte lors du transport des fonctions caractéristiques et de la pression du gaz en posant $\mathbf{v}_c = \mathbf{v} - (\mathbf{v}_a + \mathbf{v}_{eh})$ dans l'équation (2.4), où \mathbf{v}_a est la vitesse de r-adaptation de maillage définie au paragraphe 2.4.4. De plus, le maillage est mis à jour par : $X_{h|I^+} = X_{h|I} + |I|(\mathbf{v}_{eh} + \mathbf{v}_a)$ (voir également le paragraphe 2.5).

3.4.1.2 Validation : expansion d'une structure régulière

Nous réalisons la même simulation qu'à la Figure 3.21 mais en ajoutant cette fois-ci l'expansion du domaine. Les différentes étapes de cette expansion sont représentées sur la Figure 3.22. Au temps $t = 100$ (Figure 3.22(f)) les 125 bulles sont encore intégralement comprises dans le domaine de calcul, alors que, à temps équivalent, il n'en reste que 27 sans l'expansion de domaine de calcul (Figure 3.21(d)). En fin de compte, nous obtenons sur les Figures 3.22(g) et 3.22(h) une structure de mousse (forme polyédrique des bulles, parois inter-cellulaires) avec un taux de gaz autour de 65 - 75 %, et un accroissement du volume de calcul de l'ordre de 3. Remarquons enfin que, du fait de ce changement d'échelle, les parois inter-cellulaires sont décrites par moins d'éléments de maillage que dans le cas de la Figure 3.21 : la Figure 3.21(g) représente un zoom sur la structure de la Figure 3.22(h). Ainsi, sur la Figure 3.22(i) ces parois commencent à disparaître : le maillage n'est plus assez fin pour représenter l'isovaleur 1/2 de la fonction caractéristique du gaz (voir paragraphe 3.2.3.1).

D'un point de vue qualitatif, lorsque l'on trace l'évolution au cours de l'expansion du volume de liquide présent dans le domaine de calcul (Figure 3.23(b)), on constate que celui-ci reste réellement constant jusqu'à $t = 100$. Nous avons ensuite perte de volume : de 5% en $t = 120$ (Figure 3.22(g)) et de 25% en $t = 140$ (Figure 3.22(g)). Ceci signifie, en regardant l'évolution du taux de gaz sur la Figure 3.23(a), que l'on a une description convenable de la structure de mousse (erreur sur le volume de liquide inférieure à 10%) tant que le taux de gaz est inférieur à 65%.

La variation de la quantité de liquide malgré l'expansion de domaine a deux origines distinctes. D'une part les effets de bord, énoncés au paragraphe 3.4.1, intervenant lorsque les bulles commencent à sortir du domaine de calcul, et qui provoquent une perte de volume de liquide.

Le deuxième facteur pouvant faire varier la quantité de liquide au cours de l'expansion est la diffusion des fonctions caractéristiques, à l'intérieur même du domaine de calcul. En effet, passé un certain taux de gaz, les fonctions caractéristiques du liquide et du gaz ont leurs valeurs strictement comprises entre 0 et 1 sur la quasi totalité des éléments du maillage. Ainsi, au vu du système (2.50), la condition d'incompressibilité $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ n'est plus assurée, puisque, sur chaque élément, vient s'ajouter à cette condition l'imposition de la pression du gaz $p = p_g$. Ceci explique la légère augmentation du volume de liquide constatée entre le début de l'expansion et le temps $t = 80$.

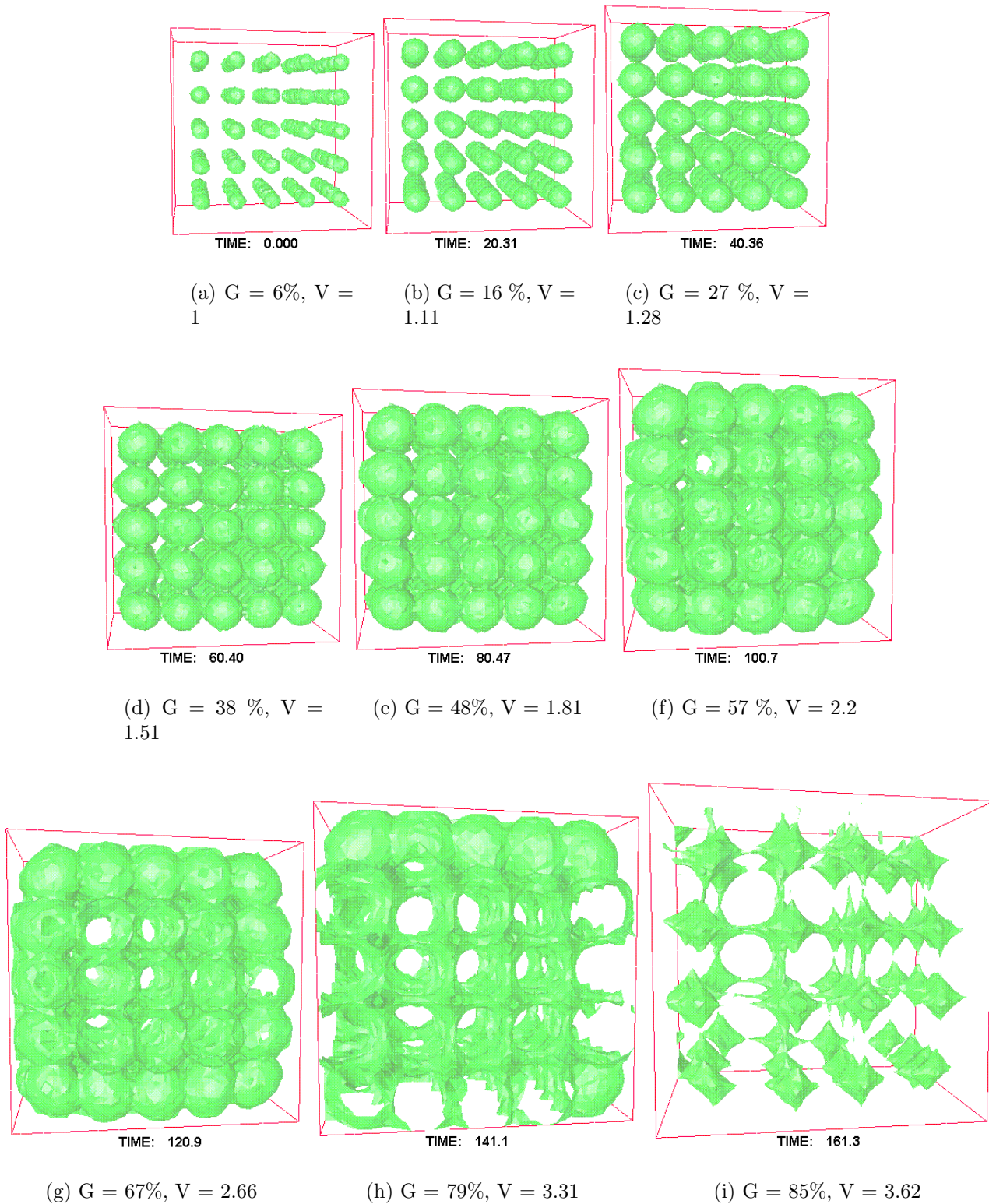
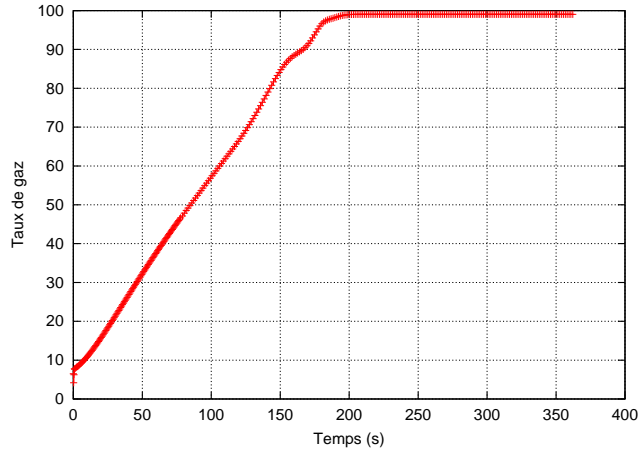
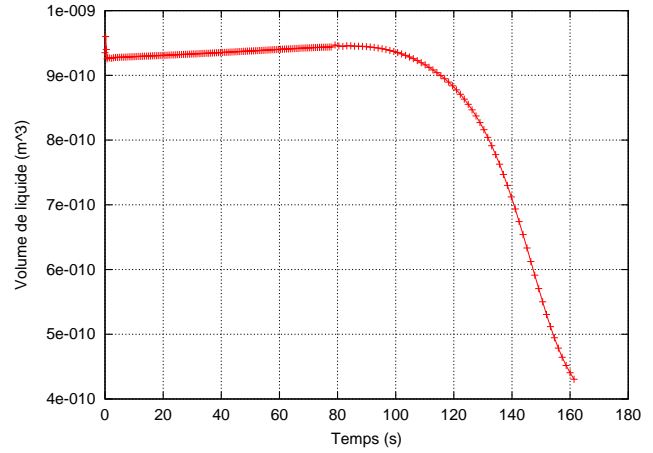


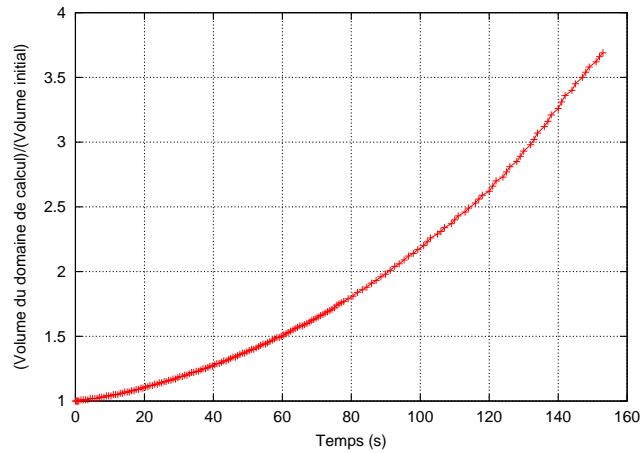
FIG. 3.22 – Prise en compte du changement d'échelle lors de l'expansion d'un système de bulles : expansion du domaine de calcul. G est le taux de gaz. V est le rapport entre le volume du domaine de calcul au temps considéré et son volume initial



(a)



(b)



(c)

FIG. 3.23 – Expansion du domaine de calcul : évolution du taux de gaz (rapport entre volume du gaz et volume du domaine de calcul), évolution du volume de liquide présent dans le domaine de calcul (haut) ; expansion du domaine de calcul (bas) : rapport entre volume au temps t et volume initial

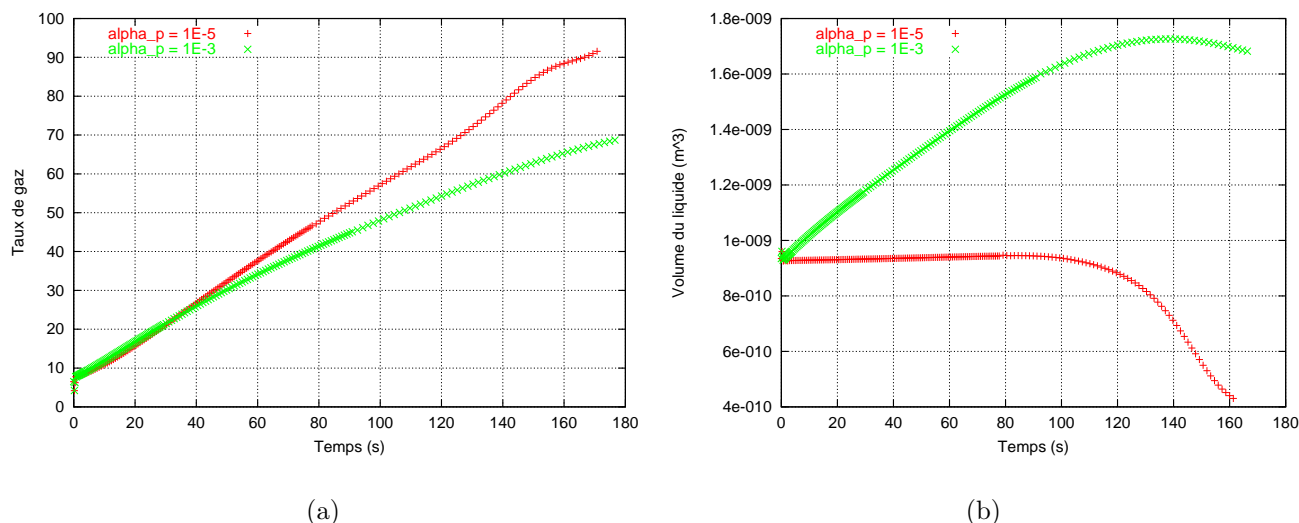


FIG. 3.24 – Variation du taux de gaz et du volume de liquide contenu dans le domaine de calcul au cours de l'expansion. Comparaison entre les valeurs obtenues pour $\alpha_p = 10^{-5}$ et $\alpha_p = 10^{-3}$

Pour se convaincre de l'importance que peut revêtir ce phénomène, la Figure 3.24(b) montre l'évolution du volume de liquide lors de deux simulations : une avec le coefficient $\alpha_p = 10^{-3}$ et l'autre avec $\alpha_p = 10^{-5}$. Rappelons que α_p est un coefficient qui intervient dans la formulation faible en vitesse pression (Equation (2.50)) en pondérant le terme d'imposition de la pression du gaz $p = p_g$. Ainsi, plus ce coefficient est petit, et plus la condition $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ est vérifiée au détriment de $p = p_g$. Ce qui explique la meilleure conservation du volume lorsque $\alpha_p = 10^{-5}$. La création de liquide observée lorsque $\alpha_p = 10^{-3}$ explique également l'évolution du taux de gaz dans ce même cas (Figure 3.24(a)).

3.4.1.3 Conclusion

Nous venons de compléter la modélisation et la simulation de l'expansion d'une structure de mousse : nous simulons l'expansion de n bulles de gaz dans la matrice liquide, et nous prenons en compte le changement d'échelle intervenant dans le volume représentatif en faisant croître le volume de calcul. Cette croissance est calculée pour que le volume de liquide reste constant dans le domaine de calcul.

L'expansion d'un système régulier comportant 125 bulles nous a fourni une première validation de notre approche. Lors de la simulation de cette expansion, les bulles adoptent une forme polyédrique du fait de leur interaction, et le liquide piégé entre ces bulles forme des parois inter-cellulaires. Nous passons d'un taux de gaz de l'ordre du pourcent à un taux supérieur 80 %, et observons ainsi l'expansion d'une structure de mousse.

Une analyse de l'évolution du volume de liquide présent dans le domaine de calcul nous a montré que celui-ci reste constant jusqu'à ce que les effets de bords deviennent importants. Nous avons alors une perte de volume de liquide. Le rôle du coefficient

α_p a également été démontré. Celui-ci doit être petit afin d'assurer l'incompressibilité du liquide. Le taux de gaz atteint avec un volume de liquide constant est d'environ 65%.

Nous donnons deux exemples d'expansion d'une structure aléatoire de mousse, en 2D et en 3D. Nous concluons ce chapitre par l'expansion anisotherme d'un échantillon de mousse.

3.4.2 Expansion d'une structure 2D de mousse

Considérer en premier exemple une expansion de structure 2D de mousse présente deux avantages : d'un point de vue numérique, cela permet d'utiliser un maillage fin, avec un nombre d'éléments "raisonnable" (comparé au 3D), et donc de garder un bon compromis entre la qualité de la description des interfaces liquide - gaz et le temps de calcul ; d'un point de vue pédagogique, cela permet de comprendre plus aisément qu'en 3D la formation de la structure durant une simulation. De plus, comme cela a été dit dans la partie bibliographique de ce document, la modélisation de la structure de mousse s'est longtemps effectuée uniquement en 2D [67], [24], [36], [35]. Les auteurs tirent ainsi parti de la simplicité de la forme des interfaces liquide - gaz décrites par des segments de droite ou des arcs de cercle.

Nous utilisons comme cadre de travail à notre étude le logiciel purement 3D **REM3D**. Pour cette raison, le domaine de calcul considéré est celui de la Figure 2.8(a), encore représenté sur la Figure 3.25 : un parallélépipède rectangle de dimensions $10^{-3} \times 2.10^{-5} \times 10^{-3}$, donc avec un rapport de 50 dans l'épaisseur. Ce domaine est discrétisé avec un maillage anisotrope ne comportant qu'une seule couche d'éléments dans l'épaisseur. De plus, au niveau des conditions aux bords du problème mécanique, deux plans de symétrie sont considérés : en $y = 0$ et en $y = 2.10^{-5}$ (ce qui signifie que sur ces deux plans nous imposons : $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ et $\sigma_n - (\sigma_n \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = 0$ avec $\sigma_n = \sigma \mathbf{n}$). Ceci rend le problème tout à fait 2D. Sur les quatre autres faces de Ω nous imposons la condition classique $\sigma \mathbf{n} = -p_{ext} \mathbf{n}$ (voir Figure 3.25).

Nous plaçons 64 bulles dans le domaine de calcul, suivant une grille régulière (voir Figure 3.26). Chaque bulle est initialement sphérique avec un rayon tiré aléatoirement (loi uniforme) entre 2.10^{-5} et 5.10^{-5} . Toutes les bulles ont la même pression initiale, $p_g = 200$, tandis que nous prenons $p_{ext} = 0$. Le liquide est considéré newtonien : $\eta_0 = 1000 Pa.s$.

La Figure 3.26 montre l'expansion de la structure de mousse associée à ce système. Le volume de liquide dans le domaine de calcul est bien conservé jusqu'au temps $t = 20$, pour décroître par la suite. Ainsi, au temps $t = 29$ (Figure 3.26(f)), la perte de volume de liquide est de 15%. La conservation de la quantité de liquide n'implique pas celle du nombre de bulles. Néanmoins, grâce à l'expansion du domaine de calcul, il reste assez de bulles dans celui-ci, pour avoir sur les Figures présentées une description intéressante d'une structure de mousse.

Nous constatons que les bulles, par interaction, adoptent rapidement des formes polyédriques (Figures 3.26(b) - 3.26(i)). De plus, les hétérogénéités initiales dans le volume des bulles sont amplifiées au cours du temps. Ainsi, nous pouvons remarquer sur les Figures 3.26(d) - 3.26(e) des petites bulles "bloquées" entre plusieurs autres

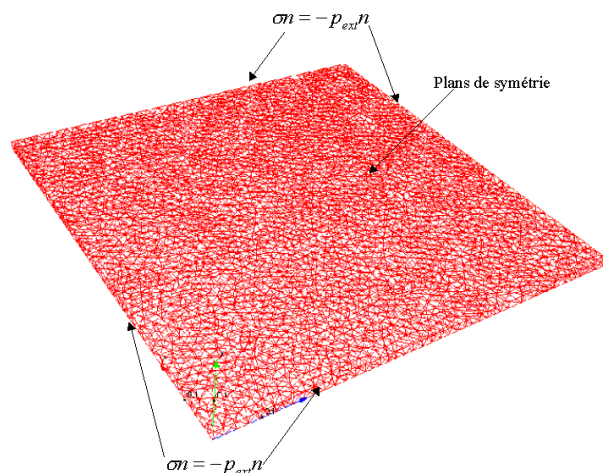


FIG. 3.25 – Domaine pseudo 2D, $\Omega = [10^{-3}, 2.10^{-5}, 10^{-3}]$, discrétisé avec 68 000 tétraèdres (23000 noeuds) et une seule couche d'éléments dans l'épaisseur. Deux plans de symétrie ($y = 0$ et $y = 2.10^{-5}$) impliquent les conditions aux bords suivantes : $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ et $\sigma_n - (\sigma_n \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = 0$ où $\sigma_n = \sigma \mathbf{n}$.

de volumes plus importants. La taille d'une bulle dépend donc fortement de son voisinage immédiat. Le champ pression du gaz p_g est représenté à l'instant $t = 29$ sur la Figure 3.28(b), et montre, à cet instant, les hétérogénéités de pression dans les bulles créées par les différences de volume. Comme nous l'avons vu au paragraphe 3.2.3.1, la pression du gaz s'homogénéise ensuite avec l'expansion.

La plus grande quantité de liquide se trouve piégé entre les bulles de gaz, formant ainsi ce que l'on peut appeler les bords Plateau (voir Figure 1.1). Ces bords Plateau sont clairement définis sur les Figures 3.26(e) - 3.26(i). Cette bonne description des interfaces liquide - gaz est due à l'utilisation de la r-adaptation de maillage : la Figure 3.27 présente le maillage adapté au temps $t = 29$.

Enfin, notons les effets de bord visible à partir de la Figure 3.26(e) et que nous avons mentionnés au paragraphe 3.4.1.2 : du fait de la différence entre la pression interne d'une bulle arrivant au bord du domaine de calcul, et la contrainte normale imposée sur ce bord (ici $p_{ext} = 0$), la vitesse d'expansion de cette bulle sortante est élevée (voir la première composante du champ vitesse représentée sur la Figure 3.28(a)). C'est pourquoi nous voyons, sur le bord droit de Ω , un amas de gaz constitué de bulles en train de sortir du domaine et ayant "coalescé" (la quantité de liquide les séparant est quasi nulle) (Figures 3.26(e) - 3.26(i)). Ainsi, pour avoir au final une structure de mousse viable, non perturbée par les bords du domaine, il est nécessaire de considérer plusieurs couches de bulles entre ces bords et le centre du domaine.

3.4.3 Expansion d'une structure 3D de mousse

Nous présentons maintenant un exemple d'expansion d'une structure de mousse 3D constituée de 400 bulles de gaz. Le domaine de calcul est un cube de côté 10^{-3} . Les bulles sont initialement sphériques, avec mêmes rayons ($4,5.10^{-5}$) et mêmes pressions internes ($p_g^0 = 200$, $p_{ext} = 0$). Par contre, leurs positions sont tirées aléatoirement dans le domaine de calcul Ω (loi uniforme avec exclusion d'une "zone

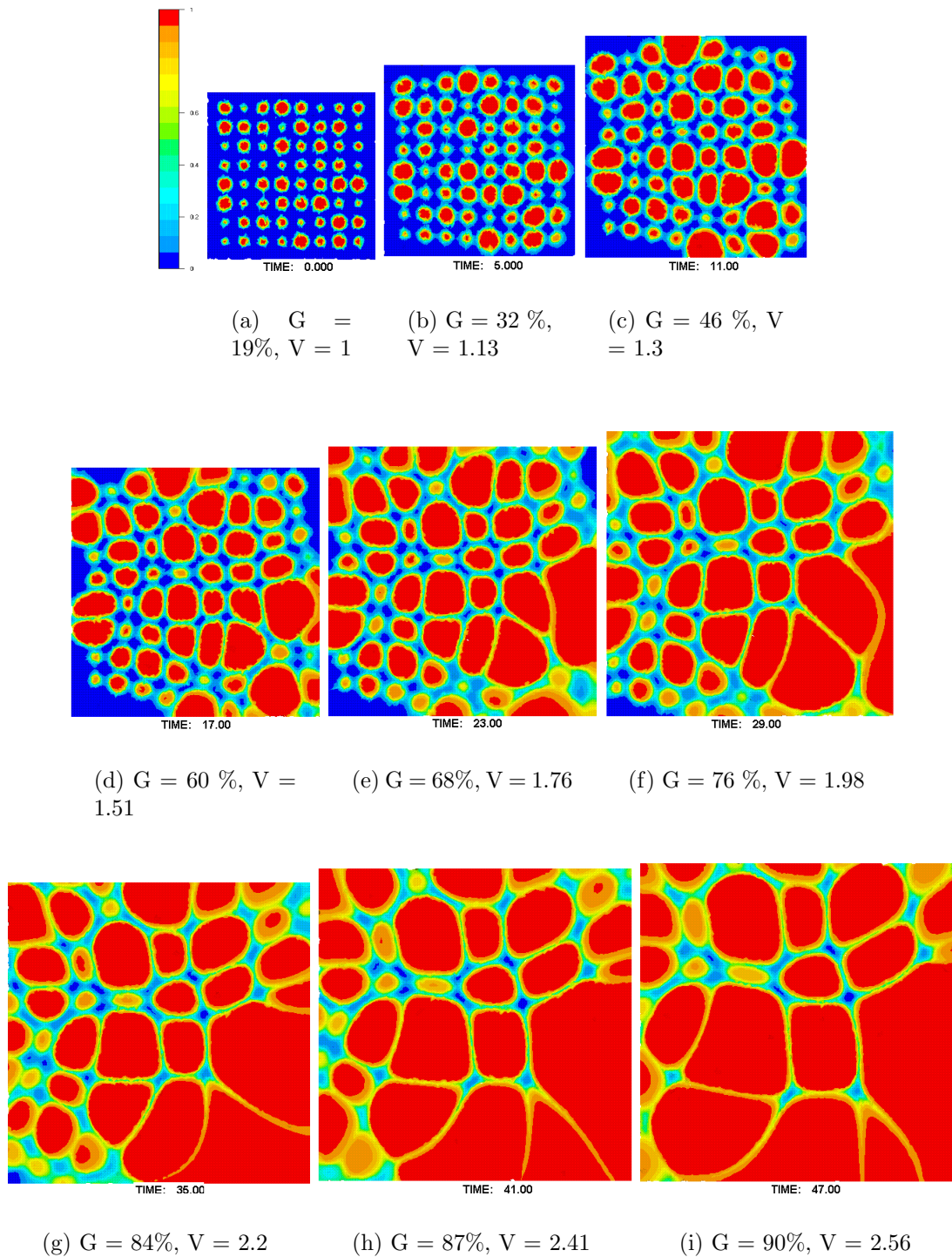


FIG. 3.26 – Expansion d'une structure 2D comprenant 64 bulles. G est le taux de gaz. V est le rapport entre le volume du domaine de calcul au temps considéré et son volume initial

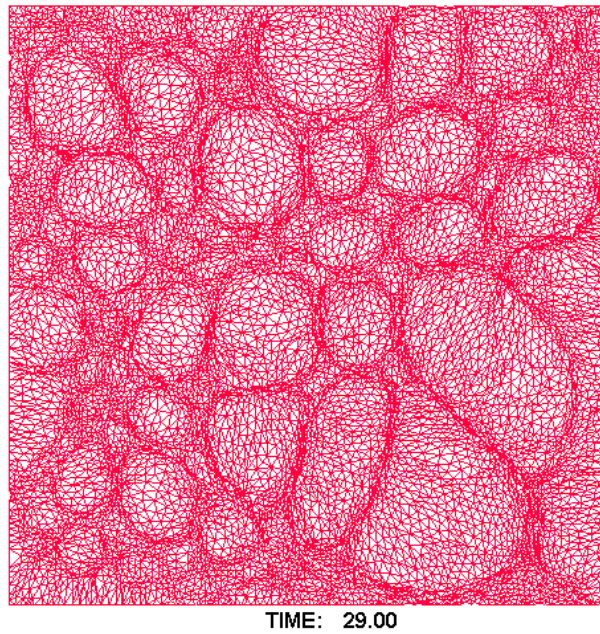


FIG. 3.27 – Maillage r-adapté lors de l'expansion de 64 bulles de gaz en 2D

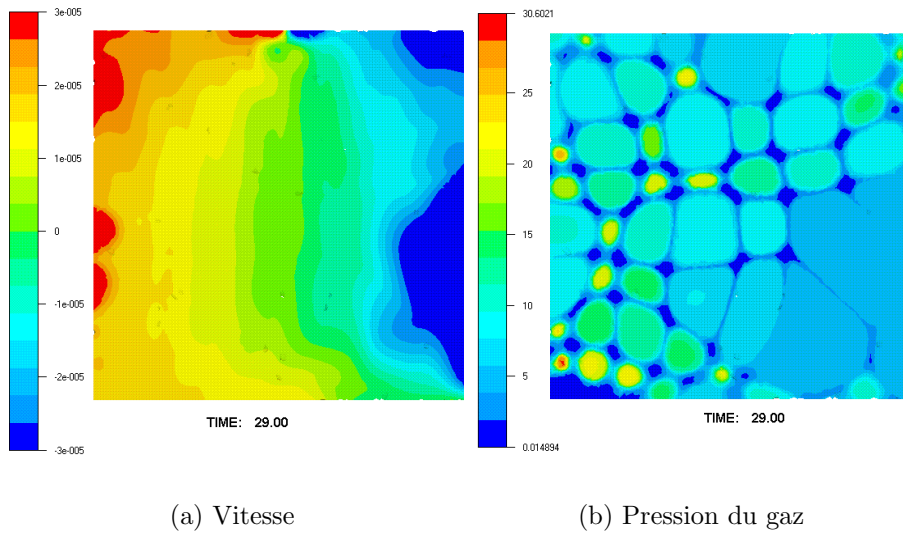


FIG. 3.28 – Vitesse et pression du gaz dans le domaine de calcul lors de l'expansion 2D de 64 bulles

de sûreté” près de la frontière). La Figure 3.29 montre l'évolution de l'isovaleur 1/2 de la fonction caractéristique du gaz (ou du liquide) au cours de l'expansion. Le maillage du domaine de calcul contient 550 000 éléments tétraédriques. Le passage de l'état initial (Figure 3.29(a)) à l'état final de l'expansion (Figure 3.29(i)) s'effectue en 50 incréments, pour un temps CPU de 11 heures.

Comme pour les simulations précédemment présentées, nous voyons la formation d'une structure de mousse, à savoir que les bulles adoptent une forme polyédrique, et le liquide, piégé par ces bulles, forme les parois inter-cellulaires. Le changement d'échelle lié à l'expansion est pris en compte en forçant le domaine de calcul à croître avec le gaz afin de conserver à chaque instant le volume de liquide. Cette expansion du domaine de calcul permet de garder suffisamment de bulles pour observer la structure de mousse.

Comme dans les simulations précédentes, à partir d'un certain taux de gaz les interfaces liquide - gaz deviennent trop fines pour être correctement représentées sur le maillage. Ceci explique les trous présents dans la structure à partir de la Figure 3.29(f) (l'isovaleur 1/2 disparaît).

De plus, la diffusion des fonctions caractéristiques et les effets de bord dus à certaines bulles sortant du domaine de calcul, ne permettent plus, à partir d'un certain taux de gaz, de conserver la quantité de liquide dans ce domaine. Ainsi, sur la Figure 3.30, nous constatons qu'avec 400 bulles, nous atteignons un taux de gaz de l'ordre de 60% tout en limitant la variation volume de liquide à 10%. Remarquons, à titre de comparaison, que dans le cas du système régulier à 125 bulles (Figure 3.22) nous conservons le volume jusqu'à un taux de gaz supérieur à 65%. Ce résultat s'explique par le fait que la symétrie du système l'assujettit moins aux effets de bord.

La Figure 3.30(a) montre l'évolution du taux de gaz lors de l'expansion d'une structure aéléatoire de mousse, formée, successivement de 100, 200 et 400 bulles. Les volumes et pressions initiaux des bulles sont, dans chaque simulation, les mêmes. Nous constatons alors que, plus le système a de bulles, plus sa vitesse d'expansion est élevée. Ce qui s'explique simplement par le fait que plus le taux de gaz du système est important, et plus la viscosité du système est faible. D'où une expansion plus rapide.

D'autre part, sur la Figure 3.30(a), est représentée l'évolution du taux de gaz pour deux simulations à 100 bulles, deux à 200 et deux à 400. Entre deux simulations ayant le même nombre de bulles, seules les positions initiales de ces bulles diffèrent. Nous observons ainsi que les résultats trouvés pour un nombre de bulles donné sont reproductibles. Ce résultat est fondamental car il assure la cohérence de nos simulations.

3.4.4 Expansion anisotherme d'une structure de mousse

Le couplage thermo-mécanique s'effectue de la même façon qu'à la section 2.7. Nous ne reviendrons donc ni sur la thermique dans le polymère, ni sur le couplage thermique polymère - gaz. Nous nous contentons d'étendre la technique utilisée pour décrire l'expansion anisotherme d'une bulle, à l'expansion anisotherme d'un système de bulles.

Deux cas sont à envisager, selon que l'on utilise l'approche pleinement multidomaine

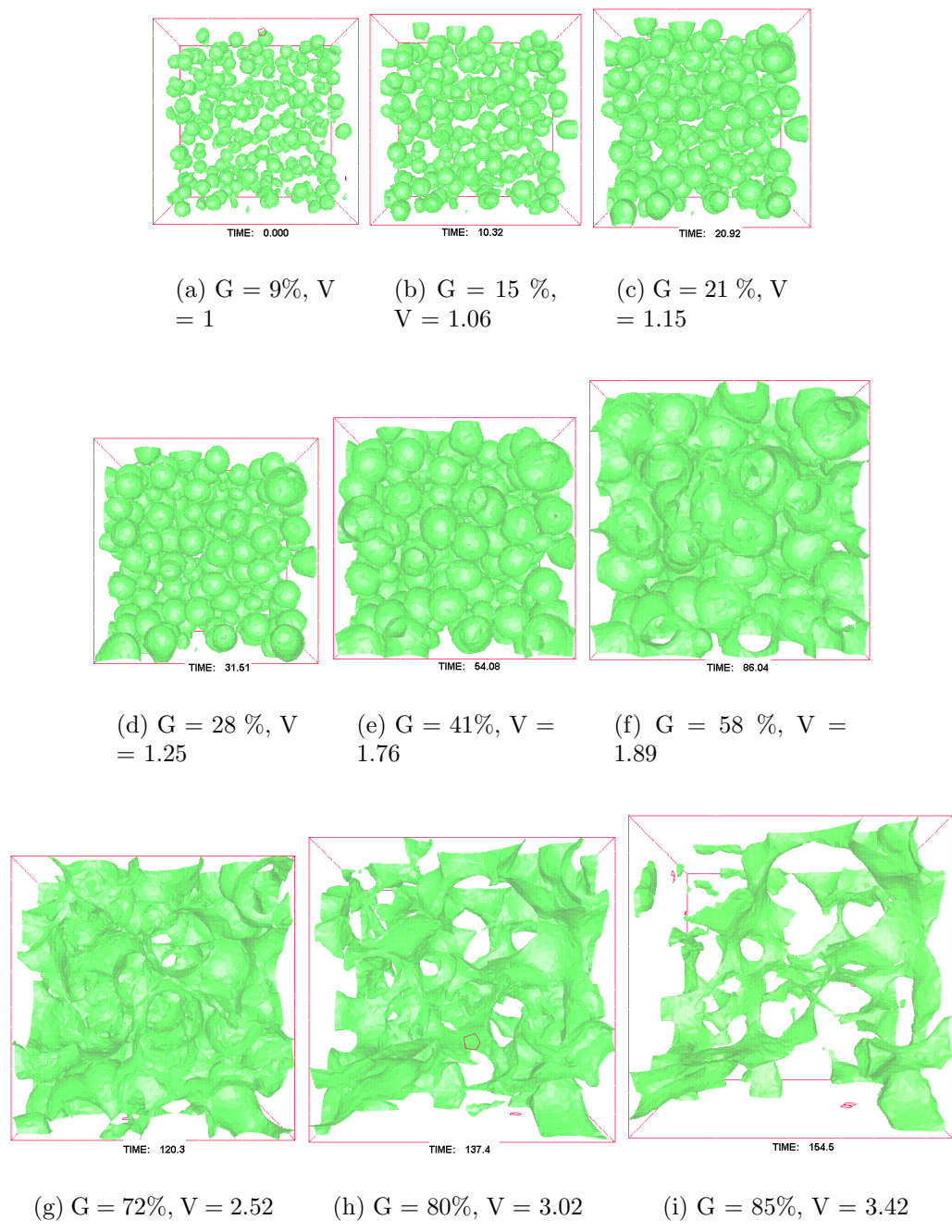


FIG. 3.29 – Expansion d'une structure 3D comprenant 400 bulles. G est le taux de gaz. V est le rapport entre le volume du domaine de calcul au temps considéré et son volume initial

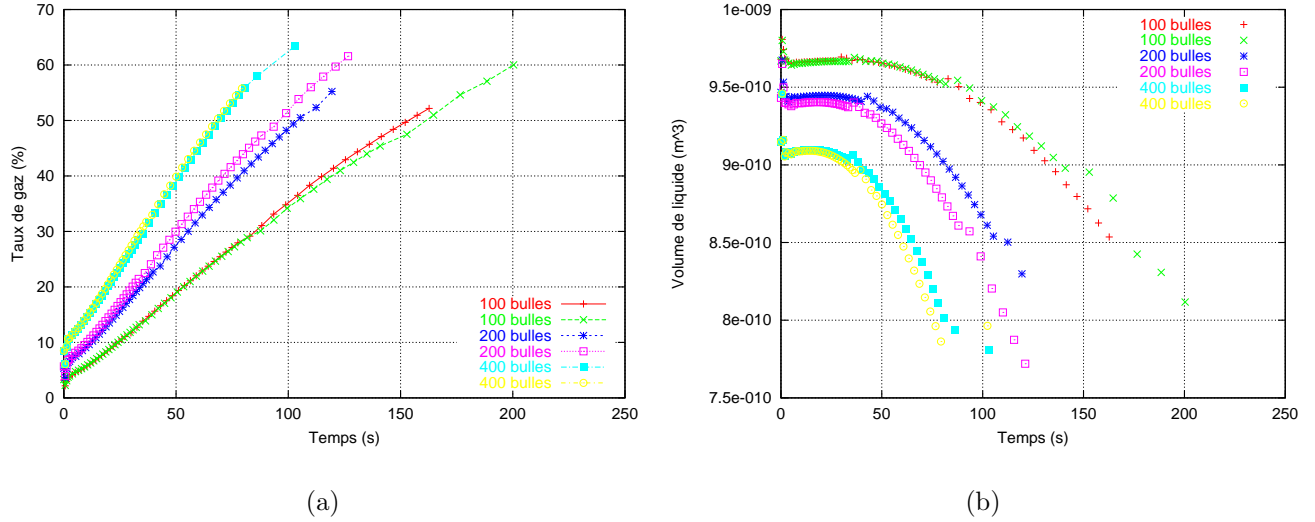


FIG. 3.30 – Variation du taux de gaz et du volume de liquide contenu dans le domaine de calcul au cours de l'expansion de 100, 200 et 400 bulles.

(paragraphe 3.2.1), ou l'approche formellement multidomaine (paragraphe 3.2.2).

3.4.4.1 Approche pleinement multidomaine

Nous connaissons exactement la fonction caractéristique de chaque bulle Ω_{g_i} . Le volume $|\Omega_{g_i}|$ de la $i^{\text{ème}}$ bulle est donc exactement calculable, si bien que la pression de cette bulle est obtenue par : $p_{g_i}|\Omega_{g_i}| = n_{g_i}RT_{g_i}$. n_{g_i} est le nombre de moles contenues dans la bulle, et T_{g_i} est la température de cette bulle.

Le champ de température T , défini globalement dans le liquide comme dans le gaz, vérifie l'Equation (2.137), avec, maintenant, les définitions suivantes :

$$\begin{cases} k &= k_g \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} + k_l \mathbb{1}_{\Omega_l} \\ \rho c &= c_V \sum_{i=1}^n \rho_{g_i} n_{g_i} \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} + \rho_l c_l \mathbb{1}_{\Omega_l} = c_V \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} \frac{n_{g_i}^2 \mathcal{M}}{|\Omega_{g_i}|} + \mathbb{1}_{\Omega_l} \rho_l c_l \end{cases} \quad (3.32)$$

et

$$\dot{w} = - \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}} \frac{p_{g_i}}{|\Omega_{g_i}|} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbb{1}_{\Omega_l} 2\eta \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(\mathbf{v}) \quad (3.33)$$

L'Equation (2.137) est discrétisée par la méthode éléments finis $P0/P0^+$. La température de la $i^{\text{ème}}$ bulle, T_{g_i} , est alors prise comme la valeur moyenne de T sur Ω_{g_i} :

$$T_{g_i} = \frac{1}{|\Omega_{g_i}|} \int_{\Omega_{g_i}} T.$$

3.4.4.2 Approche formellement multidomaine

La position et le volume de chaque bulle ne sont plus exactement définis, puisque le gaz est décrit par une seule fonction caractéristique $\mathbb{1}_{\Omega_g}$. L'équation (3.12) donnant l'évolution du champ pression du gaz p_g doit alors être modifiée de façon à prendre en compte l'évolution de la température. En différenciant la loi des gaz parfaits, nous obtenons :

$$\frac{\partial p_{g|\Omega_{g_i}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla p_{g|\Omega_{g_i}} = -\frac{1}{|\Omega_{g_i}|} p_{g|\Omega_{g_i}} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot \mathbf{v} + \frac{p_{g|\Omega_{g_i}}}{T_{g_i}} \frac{dT_{g_i}}{dt} \quad (3.34)$$

où $T_{g_i} = \frac{1}{|\Omega_{g_i}|} \int_{\Omega_{g_i}} T$. La démarche reste alors la même qu'au paragraphe 3.2.2.

Le champ de température T est défini par l'Equation (2.137). L'expression de \dot{w} donnée par la définition (3.33) utilise les termes $p_{g_i} \int_{\Omega_{g_i}} \nabla \cdot \mathbf{v}$ calculés dans (3.34).

Enfin, la masse volumique du gaz est supposée homogène ($\rho_g = n_g \mathcal{M} / |\Omega_g|$), si bien que ρc est exactement obtenue par l'expression (2.138).

3.4.4.3 Simulation anisotherme de l'expansion d'une structure de mousse

Les remarques faites au paragraphe 2.7 à propos des différents modes d'expansion possibles (expansion due à une surpression initiale ; expansion due à une différence de température) restent valables. De plus, une étude complète nécessiterait également une meilleure définition de la différence $p_g - p_{ext}$. Nous proposons, à titre d'exemple, l'expansion anisotherme d'une structure de mousse contenant 64 bulles. L'ensemble du domaine de calcul est considéré comme adiabatique, la température est initialement homogène dans le gaz et le liquide, égale à $300^\circ C$, tandis que $p_{g0} = 2.10^6 Pa$ et $p_{ext} = 0$.

La Figure 3.31 montre l'évolution de la température moyenne dans le gaz : celle-ci baisse dans les premiers instants de l'expansion, par détente du gaz. Puis, par transfert thermique du polymère vers le gaz ($k_g = 0.042$), une température d'équilibre s'établit. Cette température est inférieure à la température initiale. L'expansion a donc dissipé de l'énergie. Le temps de retour à l'équilibre thermique est court devant le temps d'expansion.

La Figure 3.32 montre les variations, sur un plan de coupe, de la fonction caractéristique du liquide et du champ de température T . Le polymère étant plus froid autour des bulles, sa viscosité augmente localement, ce qui ralentit l'expansion.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mis en place un outil permettant de simuler l'expansion 3D d'un échantillon de mousse. Pour ce faire, deux extensions ont été apportées par rapport à la simulation de l'expansion d'une bulle. D'une part la prise en compte d'un nombre élevé de bulles, et d'autre part, la prise en compte du changement d'échelle induit par l'expansion.

Deux approches ont été développées pour simuler l'évolution de plusieurs bulles. Une approche pleinement multidomaine, consistant à représenter chaque bulle par

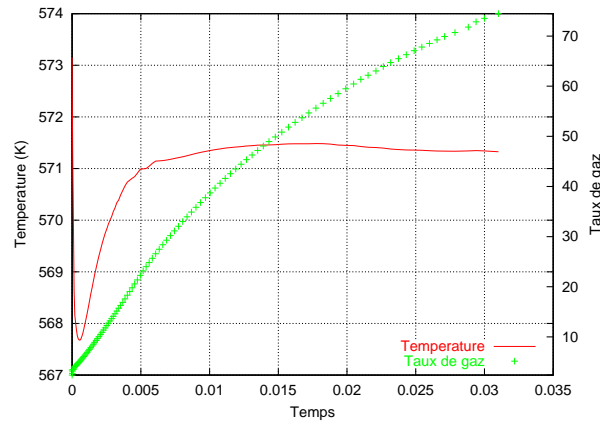


FIG. 3.31 – Evolution de la température moyenne du gaz lors de l’expansion de 64 bulles (échelle de gauche, courbe continue) - Evolution du taux de gaz lors de cette expansion (échelle de droite, points). Initialement : $T_{gaz} = T_{liquide} = 573^{\circ}K$ et $p_g = 2.10^6$ Pa, $p_{ext} = 0$. $k_g = 0.042$

sa fonction caractéristique, et à suivre son évolution par la résolution d’une équation de transport. Une approche formellement multidomaine consistant à définir une seule fonction caractéristique pour tout le gaz, et un champ pression du gaz. L’évolution de cette fonction et de ce champ est calculée en résolvant deux équations de transport. Cette méthode nécessite également de pouvoir reconstituer la position de chaque bulle constituant le gaz. Nous avons montré l’équivalence (à une précision près) de ces deux méthodes. Pour nos simulations nous choisissons l’approche formellement multidomaine pour les gains de mémoire et de temps CPU qu’elle entraîne.

Nous avons vu que l’expansion de la mousse occasionne un changement d’échelle du volume représentatif la décrivant. Dans nos simulations, ce changement d’échelle est pris en compte en considérant une vitesse globale d’expansion du maillage du domaine de calcul. Cette vitesse est prise comme une homothétie, et est calculée de manière à conserver la quantité de liquide dans le domaine de calcul au cours de l’expansion.

Les simulations présentées montre la formation d’une structure de mousse. Les bulles interagissent et adoptent des formes polyédriques. Le liquide, piégé entre ces bulles, forme les parois inter-cellulaires. Partant d’un taux de gaz de l’ordre du pourcent, nous arrivons à décrire la structure jusqu’à un taux de gaz de l’ordre de 85%, après quoi les interfaces liquide - gaz deviennent trop fines pour être complètement représentées sur les maillages utilisés. Le volume de liquide est maintenu constant jusqu’à des taux de gaz de l’ordre de 60 à 65%, après quoi des effets de bords interviennent, et font chuter ce volume. Les temps de calcul sont de l’ordre de dix heures, pour un maillage de 550 000 éléments.

Le couplage thermo-mécanique décrit au précédent chapitre a été étendu au cas d’un système de bulles. Partant d’une température homogène, les simulations montrent, dans un premier temps, l’apparition d’hétérogénéité de température dans le polymère, due à la détente du gaz. Puis, l’équilibre thermique s’établit à une température inférieure à la température initiale (le domaine est pris adiabatique).

Dans la suite de ce document, nous allons caractériser la viscosité et de taux d’ex-

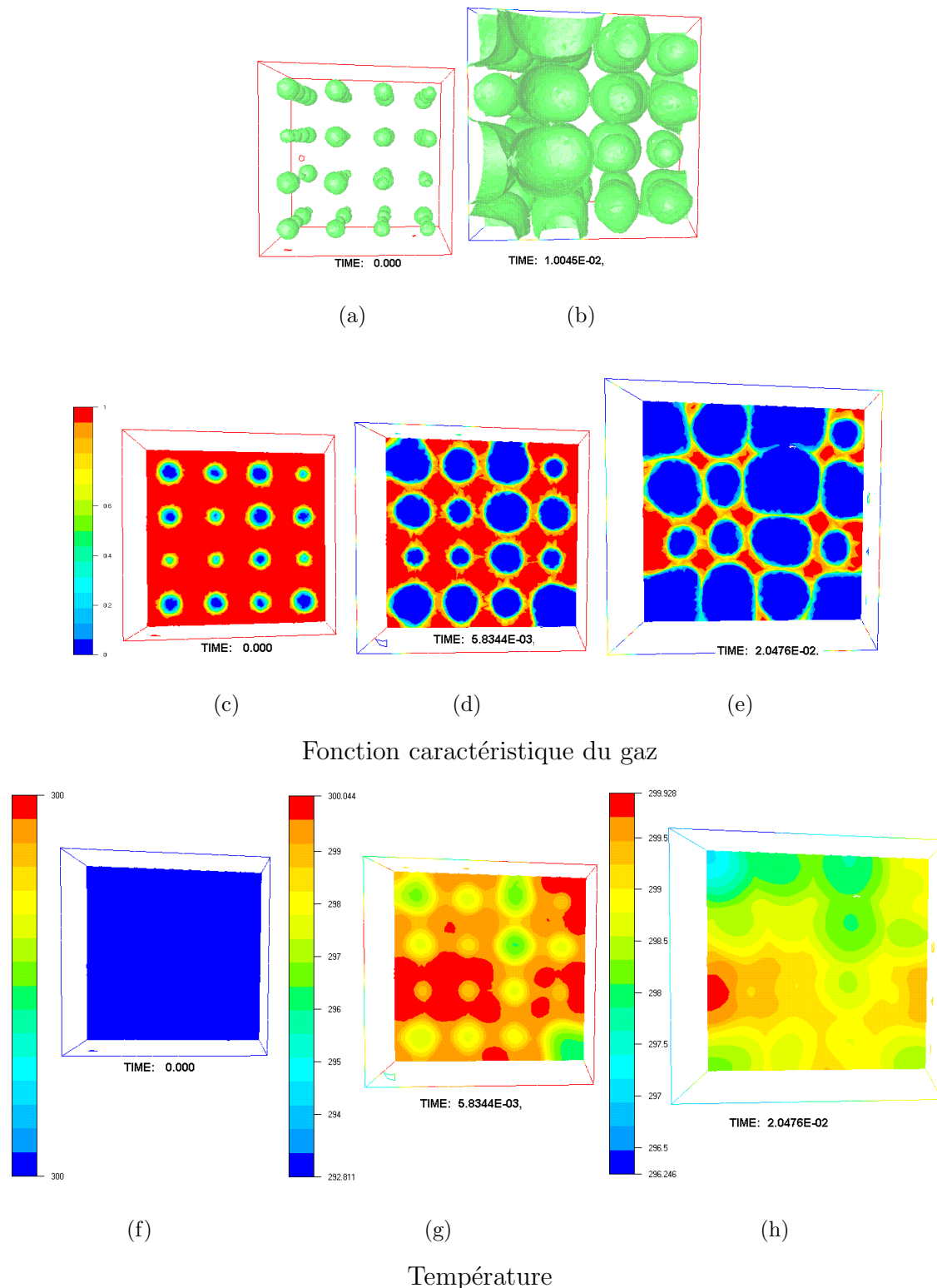


FIG. 3.32 – Expansion anisotherme d’une structure de mousse contenant 64 bulles. Haut : Etat initial et état intermédiaire. Milieu : isovaleurs de la fonction caractéristique du liquide au cours de l’expansion sur un plan de coupe. Bas : Champ température T sur le même plan de coupe, aux mêmes instants. Initialement : $T_{\text{gaz}} = T_{\text{liquide}} = 573^{\circ}\text{K}$ et $p_g = 2.10^6$ Pa, $p_{\text{ext}} = 0$. $k_g = 0.042$

pansion des structures simulées. Les lois obtenues seront alors utilisées dans une approche macroscopique de l'expansion de la mousse.

Chapitre 4

De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique

Nous étudions dans ce chapitre l'expansion d'une mousse thermoplastique d'un point de vue macroscopique. Le mélange liquide - gaz est donc considéré comme un fluide homogène compressible de viscosité η_m et de masse volumique ρ_m . Ce mélange, noté Ω_m , s'expande dans une cavité Ω pouvant être ouverte ou fermée, selon que l'on simule une expansion libre ou une expansion fermée (voir le premier chapitre). Nous allons d'abord établir les équations régissant l'expansion du mélange dans une cavité. Puis, nous effectuerons un couplage micro-macro en exprimant la dépendance de la masse volumique et de la viscosité du mélange à sa structure. Pour ce faire nous utiliserons les outils de modélisation et de simulation d'expansion d'un volume représentatif de mousse développés dans les précédents chapitres. Enfin nous introduirons le couplage thermo-mécanique et présenterons les résultats d'expansion obtenus.

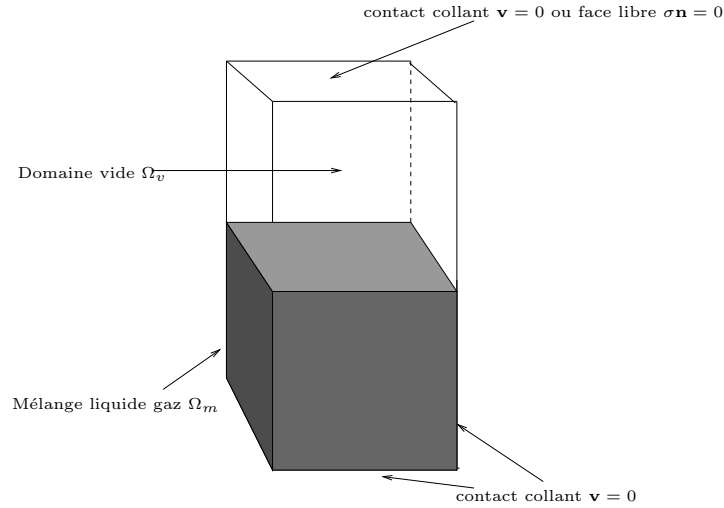
4.1 Construction du modèle physique et numérique

La cavité Ω dans laquelle se développe la mousse contient deux domaines : le mélange Ω_m et le vide Ω_v (voir Figure 4.1). Cette cavité peut être ouverte ou fermée. Nous notons $\Gamma \subset \partial\Omega$ l'ensemble des parois de la cavité.

Comme au paragraphe 2.3, nous cherchons à établir le système d'équations vérifiées par les champs de vitesse \mathbf{v} et de pression p dans tout Ω , *i.e.* dans Ω_m comme dans Ω_v .

Les champs de vitesse et de pression sont définis dans la partie vide Ω_v de la même façon qu'ils le sont dans la partie gazeuse, mais cette fois en prenant $p_g = 0$. Nous ne reviendrons pas sur ce point et renvoyons au paragraphe 2.3.1 pour les détails.

Intéressons nous plutôt au mélange liquide - gaz. Nous lui appliquons les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Comme pour le modèle microscopique nous négligeons les termes d'inertie ainsi que de tension superficielle. De plus nous appliquons une condition de contact collant sur les parois Γ de Ω .


 FIG. 4.1 – Cavité Ω ouverte ou fermée dans laquelle se développe la mousse

Ce dernier point est discutable (voir paragraphe 1.2.4.2) et constitue une première approximation. Ceci nous conduit à la formulation suivante.

Trouver la vitesse $\mathbf{v} \in \mathcal{C}^2(\Omega_m)$, $\mathbf{v}|_{\Gamma} = 0$, et la pression $p \in \mathcal{C}^1(\Omega_m)$, telles que, $\forall t \in]0, \Theta[, \forall x \in \Omega_m(t)$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot [2\eta_m(|\varepsilon(\mathbf{v})|, G)\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p & = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} & = -\frac{1}{\rho_m} \frac{d\rho_m}{dt}(G) \\ \sigma \mathbf{n} & = 0 \end{cases} \quad \text{sur } \partial\Omega_v \cap \partial\Omega_m \quad (4.1)$$

où G est la fraction volumique gazeuse du mélange. G est un champ, dépendant du point où l'on se trouve dans Ω_m et du temps. La viscosité η_m dépend de G , ainsi, que de la structure de la mousse.

En négligeant la masse volumique du gaz devant la masse volumique ρ_l du polymère (de l'ordre de 1000 kg.m^{-3}), nous pouvons écrire :

$$\rho_m = (1 - G)\rho_l \quad (4.2)$$

Le polymère est supposé incompressible (ρ_l est constant), si bien que :

$$\frac{1}{\rho_m} \frac{d\rho_m}{dt} = -\frac{1}{1 - G} \frac{dG}{dt} \quad (4.3)$$

Le couplage micro-macro s'effectue donc au travers du taux d'expansion dG/dt qui reste à déterminer. Rappelons que, dans le modèle microscopique développé précédemment, l'expansion des bulles est gouvernée par la différence entre la pression interne du gaz et la pression ambiante, et que cette dernière constitue une donnée macroscopique du problème, extérieure à notre modèle microscopique.

Il s'en suit que nous posons :

$$\frac{dG}{dt} = \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = f(G, p_g - p) \quad (4.4)$$

où p_g est le champ de pression interne du gaz. Remarquons que nous ne faisons pas dépendre explicitement le taux d'expansion du temps. Ceci est valide dans le cas d'une mousse thermoplastique, où l'expansion est due à une différence de pression. En revanche, si nous avons à modéliser l'expansion d'une mousse thermodurcissable, impliquant une création de gaz par réaction chimique, le temps pourrait apparaître explicitement dans l'expression de dG/dt .

En définitive, le système en vitesse - pression à résoudre est :

Trouver la vitesse $\mathbf{v} \in \mathcal{C}^2(\Omega_m)$, $\mathbf{v}|_{\Gamma} = 0$, et la pression $p \in \mathcal{C}^1(\Omega_m)$, telles que, $\forall t \in]0, \Theta[$, $\forall x \in \Omega_m(t)$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot [2\eta_m(|\varepsilon(\mathbf{v})|, G)\varepsilon(\mathbf{v})] - \nabla p & = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} & = \frac{1}{1-G}f(G, p_g - p) \\ \sigma \mathbf{n} & = 0 \text{ sur } \partial\Omega_v \cap \partial\Omega_m \end{cases} \quad (4.5)$$

De la même manière qu'aux chapitres 2 et 3, nous déduisons du système (4.5) et du prolongement de \mathbf{v} et p dans Ω_v une formulation variationnelle du problème. La seule différence est que la condition de Dirichlet $\mathbf{v}|_{\Gamma} = 0$ est prise en compte dans le choix de l'espace fonctionnel contenant \mathbf{v} . Ainsi, nous définissons :

$$\mathcal{V}_{\Gamma} = \{v \in \mathcal{V} ; \mathbf{v}|_{\Gamma} = 0\} \quad (4.6)$$

Nous associons à Ω_m et à Ω_v leurs fonctions caractéristiques, $\mathbb{1}_{\Omega_m}$ et $\mathbb{1}_{\Omega_v}$. Au final, la formulation variationnelle mixte en vitesse - pression s'écrit :

A chaque instant t , connaissant $\mathbb{1}_{\Omega_m}$, $\mathbb{1}_{\Omega_v}$ et G , trouver $(\mathbf{v}, p) \in \mathcal{V}_{\Gamma} \times \mathcal{P}$ tels que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_m} 2\eta_m(|\varepsilon(\mathbf{v})|, G)\varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) + \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_v} 2\eta_v \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(w) \\ \quad - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_m} p \nabla \cdot w = 0 \\ - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_m} q \nabla \cdot \mathbf{v} - \alpha_p \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_v} p q = - \int_{\Omega} \mathbb{1}_{\Omega_m} q \frac{1}{1-G} f(G, p_g - p) \\ \forall (w, q) \in \mathcal{V}_{\Gamma} \times \mathcal{P} \end{cases} \quad (4.7)$$

où η_v joue le rôle du η_g des chapitres précédents, et doit donc être petit. Conjointement au Système (4.7), trois équations de transport de type Equation (2.60) sont résolues : une par fonction caractéristique, et l'équation de transport de la fraction gazeuse (4.4).

Comme précédemment (voir paragraphe 2.3.2), le domaine Ω est discrétisé à l'aide d'un maillage constitué d'éléments tétraédriques. Le système (4.7) est discrétisé en vitesse - pression par l'élément fini $P1+/P1$. Les fonctions caractéristiques et la fraction volumique gazeuse sont approchées par des fonctions étant $P0$ sur un élément d'espace, et Pn sur un intervalle de temps. Nous appliquons ainsi notre méthode espace-temps Galerkin discontinu pour résoudre les trois équations de transport (voir section 2.4). La technique de r-adaptation de maillage permet de réduire la diffusion de l'interface mélange - vide.

Enfin, notons que, dans le système (4.7), le terme $f(G, p_g - p)$ est mis au second membre. Dans cette expression, la pression p est donc connue et est la pression calculée au temps précédent. $f_h(G_h, p_{g_h} - p_h)$ est $P0$ par élément spatial, Pn par intervalle de temps.

Comme cela est expliqué à la section 2.4, le système (4.7) doit être intégré également en temps. \mathbf{v}_h et p_h étant constants par intervalle de temps, cela revient à prendre les valeurs moyennes de $\mathbb{1}_{\Omega_m}^h$, $\mathbb{1}_{\Omega_v}^h$ et G_h sur l'intervalle de temps considéré.

4.2 Détermination de la viscosité d'un volume re-présentatif de mousse

Durant l'expansion d'une mousse, nous passons d'un mélange liquide - gaz, où les bulles sont sphériques, interagissent peu entre elles et occupent un faible pourcentage du volume total, à une structure de mousse avec des bulles polyédriques occupant plus de 80% du volume total.

Dans la littérature [42], la structure d'un mélange diphasique est principalement décrite par la fraction de la phase diluée. La viscosité du mélange est alors reliée à cette fraction, via par exemple la loi d'Einstein pour des sphères dures, ou la loi de Taylor pour des gouttes (déformables). Ces lois sont valables pour des émulsions diluées, *i.e.* des mélanges où la fraction de la phase diluée est inférieure à 5%. Cette valeur représente une première limite à la comparaison entre le comportement d'une mousse et d'une émulsion. Cependant, et plus fondamentalement, il existe une différence majeure entre le comportement des mousses et celui des émulsions. Ainsi, comme le souligne Kraynik [42], les effets non newtoniens proviennent, dans les émulsions, de l'interaction entre les bulles et le liquide (tension superficielle), alors que dans le cas des mousses, ces effets sont principalement dus à l'interaction entre les bulles elles-mêmes.

Nous proposons par la suite de décrire un comportement homogène d'un échantillon de de mousse simulé. Ceci permet de prendre directement en compte la structure de la mousse dans son comportement. Cette approche est statistique, et suppose que l'échantillon simulé soit représentatif de la structure d'une mousse.

Considérons un volume représentatif dans lequel on veut décrire un comportement homogène : une viscosité η en cisaillement est définie par cisaillement d'un cube (Figure 4.2) :

$$\tau = \eta \frac{U}{h} \quad (4.8)$$

où τ est la contrainte de cisaillement, et U la vitesse.

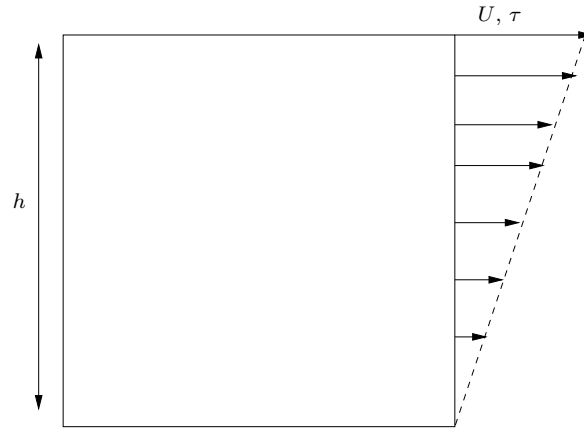


FIG. 4.2 – Cisaillement d'une fluide homogène. τ est la contrainte de cisaillement, U la vitesse

Réitérons la même expérience, mais cette fois avec une structure de mousse simulée à l'aide des outils développés dans les précédents chapitres (voir Figure 4.3). Nous obtenons ainsi, à chaque étape de l'expansion, une description d'un comportement homogène de l'échantillon.

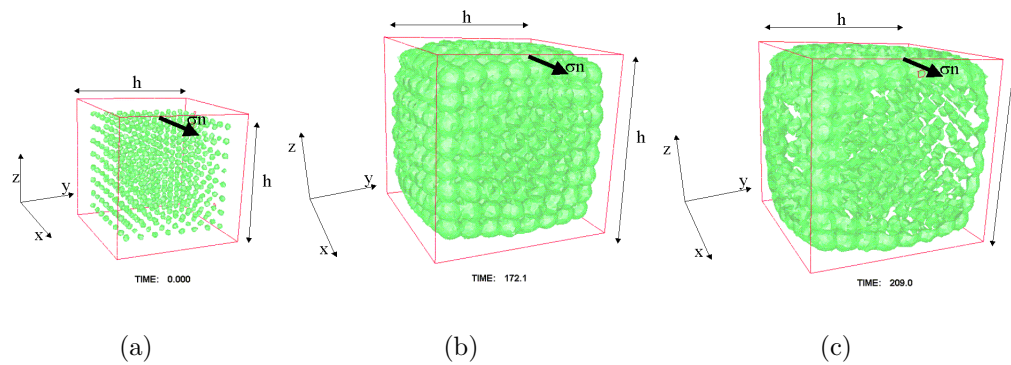


FIG. 4.3 – Essais de cisaillement sur trois échantillons de mousse correspondant à trois étapes de l'expansion

De plus, le débit D à travers la face de sortie, qui est une grandeur aisée à calculer, s'exprime par :

$$D = U \frac{h^2}{2} \quad (4.9)$$

En définitive, la viscosité en cisaillement η_m d'un échantillon de mousse Ω est :

$$\boxed{\eta_m = \frac{h^3 \tau}{2D}} \quad (4.10)$$

4.2.1 Dépendance de la viscosité à la structure

Les essais effectués montrent que la consistance du liquide intervient comme facteur multiplicatif dans l'expression de la viscosité de la mousse η_m . Aussi, nous posons :

$$\eta_m(G) = \eta_0 K(G) \quad (4.11)$$

où η_0 est la consistance du polymère et K une fonction du taux de gaz que nous allons essayer de déterminer en faisant de la "rhéologie numérique".

Nous considérons trois structures de mousse, mettant toutes en jeu 512 bulles, mais différant par la taille et la position de ces bulles : une structure régulière (ou ordonnée) comme sur la Figure 3.22, où les bulles sont disposées selon une grille et ont toutes le même rayon initial $3 \cdot 10^{-5}$; une structure partiellement aléatoire comme sur la Figure 3.29, où les bulles ont le même rayon initial $3 \cdot 10^{-5}$ mais dont les positions initiales sont tirées aléatoirement ; une structure totalement aléatoire comme sur la Figure 4.4, où les positions initiales des bulles ainsi que leurs rayons initiaux sont choisis aléatoirement, ces derniers étant tirés de manière équiprobable dans l'intervalle $[2, 5 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}]$.

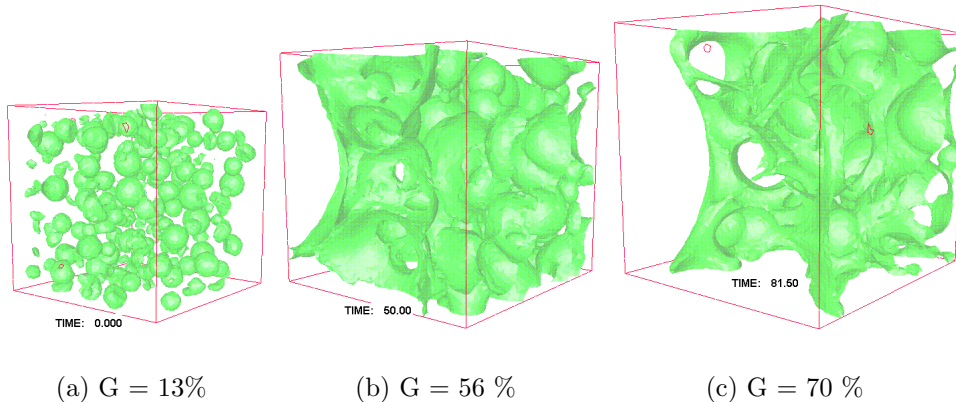


FIG. 4.4 – Expansion aléatoire d'une structure 3D contenant 512 bulles. G est le taux de gaz.

La Figure 4.5 montre l'évolution de la viscosité relative K de ces trois structures en fonction de la fraction gazeuse durant leurs expansions. Nous constatons que les viscosités des trois structures coïncident pour des fractions gazeuses supérieures à 20%. Ceci peut signifier qu'au-delà d'un certain taux de gaz, ce sont les interactions bulles - bulles qui déterminent la viscosité, et que celle-ci dépend donc directement et fortement de la densité de bulles dans la mousse.

Cependant, nous ne pouvons conclure à l'indépendance de la viscosité d'une mousse vis-à-vis de l'hétérogénéité de la taille et de la forme des bulles, loin s'en faut. En

effet, rien ne nous assure que le domaine de calcul soit réellement représentatif d'une structure de mousse. Nous avons pris un rapport initial entre rayon minimal et rayon maximal de 3.2, soit un rapport de volumes de 27, ce qui peut être insuffisant par rapport à la réalité. Pour affiner nos calculs, il nous faudrait une distribution réelle de taille de bulles, avec une analyse statistique. Cela reste à faire.

Soulignons enfin que nous n'étudions pas ici la dépendance de la viscosité vis-à-vis de l'orientation des bulles. Au cours d'un cisaillement, les bulles prennent progressivement une forme ovale, ce qui peut modifier le comportement du système.

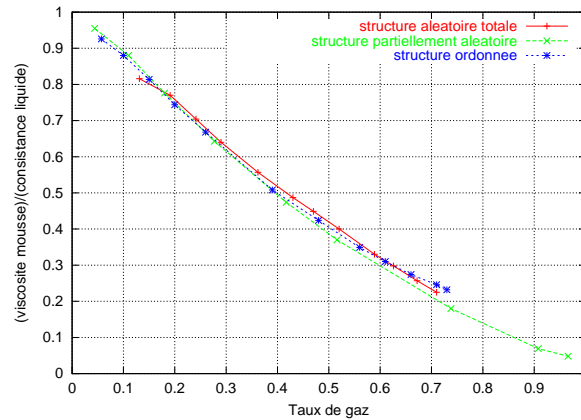


FIG. 4.5 – Comparaison de la fonction $K = \eta_m / \eta_0$ obtenue par cisaillement d'une structure ordonnée et par cisaillement d'une structure aléatoire

4.2.2 Dépendance de la viscosité à la densité de bulles

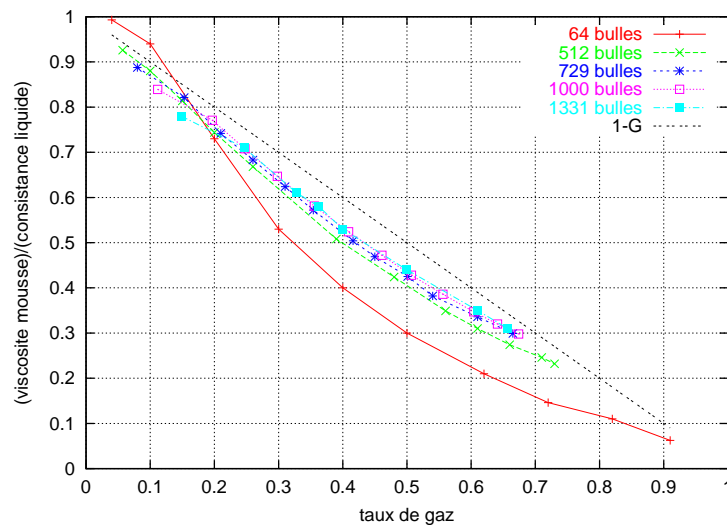


FIG. 4.6 – Fonction $K = \eta_m / \eta_0$ obtenue par simulation en fonction du nombre de bulles contenues dans le domaine de calcul

Nous considérons l'expansion de différentes structures ordonnées contenant un nombre de bulles allant de 64 à 1331, *i.e.* ayant différentes densités de bulles. Le choix de

structures ordonnées n'influe pas, nous venons de le voir, sur la viscosité de la mousse, et permet de conserver l'intégralité des bulles dans le volume de calcul durant l'expansion. Les effets de bord s'en trouvent ainsi limités (voir paragraphe 3.4.3). Sur la Figure 4.6 nous avons tracé les valeurs de $K = \eta_m/\eta_0$ en fonction du taux de gaz, calculées au cours de l'expansion des différentes structures. Pour un nombre de bulles supérieur à 64, nous avons représenté uniquement les valeurs obtenues avant que les effets de bord n'interviennent (taux de gaz inférieur à 70 %), et pour lesquelles la description de la structure est bonne (diffusion des fonctions caractéristiques faible). En comparant les courbes de la Figure 4.6 avec la droite $1 - G$ tracée sur cette même figure, nous observons une dépendance non linéaire de la viscosité à la fraction gazeuse G . Nous distinguons trois zones différentes dans les courbes de la Figure 4.6. D'une part, pour un taux de gaz inférieur à 20%, plus le nombre de bulles est élevé, et plus la viscosité calculée est faible. Ceci s'explique par le fait qu'à taux de gaz équivalent, plus la densité en bulles est élevée et plus celles-ci sont petites, offrant ainsi une moindre résistance au cisaillement, tant que les interactions entre les bulles sont négligeables, *i.e.* tant que la fraction gazeuse est petite.

Lorsque le taux de gaz est supérieur à 20%, l'effet inverse se produit : à taux de gaz équivalent, la viscosité augmente avec le nombre de bulles. Nous pouvons penser que cela est dû aux interactions bulle - bulle plus importantes lorsque le taux de gaz est élevé, et s'opposant ainsi au cisaillement.

Enfin, lorsque la fraction gazeuse tend vers 1, la viscosité tend asymptotiquement vers zéro.

Nous venons ainsi de mettre en avant, d'une part la dépendance non linéaire de la viscosité d'une mousse au taux de gaz, et d'autre part la dépendance de cette viscosité à la densité de bulles. Remarquons que lorsque la densité de bulles est élevée, la viscosité semble tendre vers une courbe asymptotique.

4.2.3 Expression de la viscosité d'une mousse

Au vu de l'étude qui précède, nous proposons la loi suivante reliant la viscosité d'une mousse η_m au taux de gaz G qu'elle contient, lorsque la matrice liquide est newtonienne de consistance η_0 :

$$\eta_m(G) = \eta_0 \left(1 + r_1^2 \left(\frac{G}{1-G} \right)^2 \right)^{\frac{r_2-1}{2}} \quad (4.12)$$

où r_1 et r_2 sont des paramètres à déterminer. Remarquons que le quotient $G/(1-G)$ est égal au rapport entre le volume occupé par le gaz et celui occupé par le liquide $|\Omega_g|/|\Omega_l|$. Sur la Figure 4.7 nous avons représenté les viscosités simulées et les fonctions de type 4.12 correspondantes. Nous obtenons ainsi une bonne approximation des viscosités simulées, et extrapolons ces viscosités pour des taux de gaz proches de 0 ou de 1. Les valeurs numériques trouvées sont : $r_1 = 4.57$, $r_2 = 0.23$ pour 64 bulles ; $r_1 = 4.87$, $r_2 = 0.38$ pour 512 bulles ; $r_1 = 5.9$, $r_2 = 0.53$ pour 1000 bulles.

Nous avons ainsi obtenu une loi phénoménologique reliant la viscosité d'une mousse à sa fraction gazeuse, dans le cas où la structure est assez homogène. Les deux

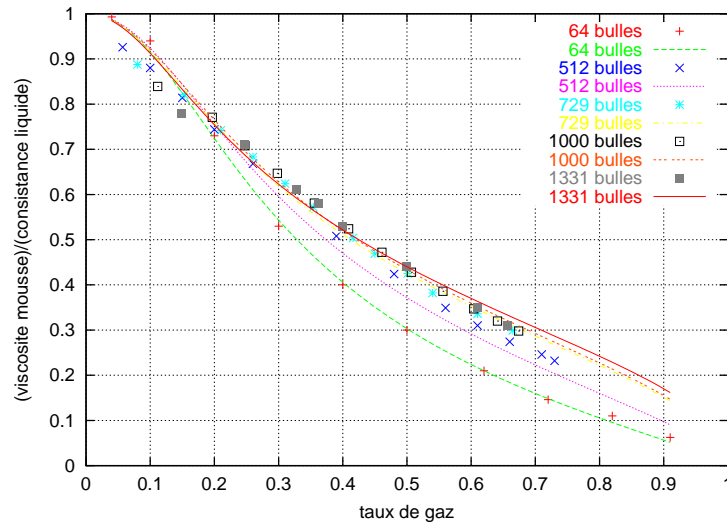


FIG. 4.7 – Valeurs de $K = \eta_m/\eta_0$ simulées en fonction du nombre de bulles contenues dans le domaine de calcul, et fonctions utilisées pour approcher ces valeurs

paramètres de cette loi dépendent de la densité de bulles, ainsi que de la taille de ces bulles, puisque l'interaction entre bulles semble déterminante.

4.3 Couplage micro-macro

Le couplage micro-macro s'effectue en fermant l'Equation (4.5) via le taux d'expansion dG/dt (voir Equation (4.4)). Nous nous proposons de déterminer ce taux grâce à des simulations utilisant notre modèle microscopique. Rappelons que celui-ci rend compte de l'expansion d'un volume représentatif de la structure de mousse en un point donné de l'écoulement macroscopique. Ce modèle prend comme variables d'entrée la configuration initiale du gaz ainsi que sa pression initiale, et fait intervenir une variable d'ordre macroscopique, p_{ext} , la pression ambiante au point considéré de l'écoulement macroscopique.

Nous exprimerons d'abord dG/dt lorsque les interactions entre bulles ne sont pas prises en compte. Pour cela, nous utiliserons le modèle analytique développé au paragraphe 2.6.1. Puis nous exprimerons dG/dt lors de l'expansion d'une structure de mousse, en tenant compte d'une densité de bulles.

4.3.1 Modèle analytique du taux d'expansion du gaz

Soit Ω un volume représentatif de mousse en expansion, de volume $|\Omega|$, contenant une partie gazeuse Ω_g de volume $|\Omega_g|$ et une partie liquide Ω_l de volume constant $|\Omega_l|$ au cours du temps. Le taux de gaz G_c Ω est défini par : $G_c = |\Omega_g|/|\Omega|$, soit encore : $G_c = |\Omega_g|/(|\Omega_g| + |\Omega_l|)$. Nous avons ainsi la relation suivante entre $|\Omega_g|$ et G_c :

$$|\Omega_g| = \frac{G_c}{1 - G_c} |\Omega_l| \quad (4.13)$$

Nous supposons maintenant que le gaz est composé de n bulles sphériques de volumes $|\Omega_{g_i}|$, de rayons R_i et de pressions p_{g_i} , comme indiqué sur la Figure 4.8. Le liquide est considéré comme newtonien, de consistance η_0 . Conformément au modèle analytique du paragraphe 2.6.1, nous supposons la pression constante dans le liquide, et égale à p_{ext} qui est la contrainte appliquée sur $\partial\Omega$ par le milieu extérieur. Chaque bulle croît ainsi par différence de pression $p_{g_i} - p_{ext}$, et les interactions entre bulles sont, pour le moment, négligées.

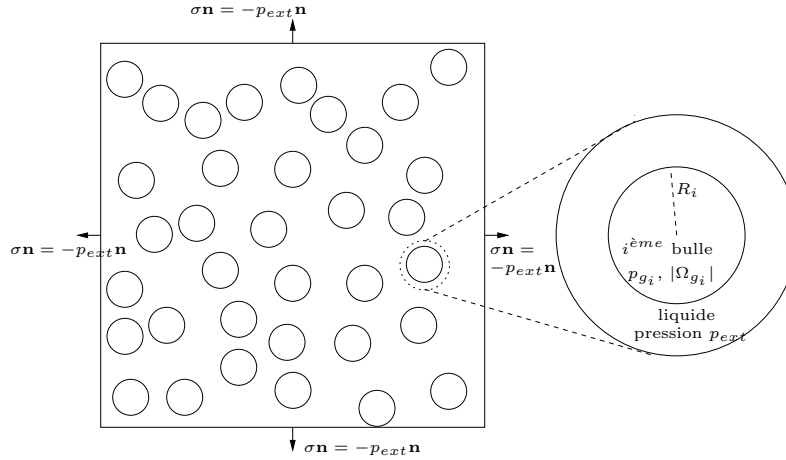


FIG. 4.8 – Expansion de n bulles sphériques de rayons R_i , de volumes $|\Omega_{g_i}|$ et de pressions internes p_{g_i} . p_{ext} est la pression dans le liquide

Nous avons :

$$|\Omega_g| = \sum_{i=1}^n |\Omega_{g_i}| = \frac{4\pi}{3} \sum_{i=1}^n R_i^3 \quad (4.14)$$

Si bien que :

$$\frac{1}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} = \frac{3}{\sum_{i=1}^n R_i^3} \sum_{i=1}^n \dot{R}_i R_i^2 \quad (4.15)$$

Ne tenant pas compte des interactions entre bulles, nous appliquons à chaque bulle le résultat (2.117), ce qui entraîne :

$$\frac{1}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} = \frac{3}{4\eta_0 \sum_{i=1}^n R_i^3} \sum_{i=1}^n (p_{g_i} - p_{ext}) R_i^3 \quad (4.16)$$

Supposons à présent que toutes les bulles aient la même pression dans le volume Ω : $p_{g_i} = p_g$. L'Equation (4.16) se simplifie alors en :

$$\frac{1}{|\Omega_g|} \frac{d|\Omega_g|}{dt} = \frac{3}{4\eta_0} (p_g - p_{ext}) \quad (4.17)$$

En différenciant la relation (4.13), et en la combinant avec l'expression (4.17), nous obtenons, sous les hypothèses considérées, l'expression du taux d'expansion du gaz dans le volume Ω en fonction de $p_g - p_{ext}$:

$$\frac{dG_c}{dt} = \frac{3}{4\eta_0} (p_g - p_{ext}) G_c (1 - G_c) \quad (4.18)$$

Pour finir, nous exprimons la pression du gaz p_g en fonction de G_c . p_g étant supposée homogène dans Ω_g , la loi des gaz parfaits s'écrit, pour chaque bulle : $p_g |\Omega_{g_i}| = p_{g_0} |\Omega_{g_i}^0|$. En sommant sur toutes les bulles, nous avons : $p_g |\Omega_g| = p_{g_0} |\Omega_{g_0}|$. Considérant l'expression (4.13), nous pouvons écrire :

$$p_g = \frac{1 - G_c}{G_c} \frac{G_{c0}}{1 - G_{c0}} p_{g_0} \quad (4.19)$$

Ainsi, en négligeant les interactions entre bulles, et en supposant une pression du gaz homogène, le taux d'expansion du gaz dans le volume représentatif, s'écrit en fonction de G_c et p_{ext} comme :

$$\frac{dG_c}{dt} = \frac{3}{4\eta_0} \left((1 - G_c)^2 \frac{G_{c0}}{1 - G_{c0}} p_{g_0} - p_{ext} G_c (1 - G_c) \right) \quad (4.20)$$

D'après la définition du volume représentatif, l'Equation (4.20) exprime le taux d'expansion du gaz en un point de la mousse au voisinage duquel la pression p est supposée homogène et égale à p_{ext} .

Suivant maintenant une approche macroscopique, le taux d'expansion du gaz G est un champ. Nous avons alors :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = \frac{3}{4\eta_0} \left((1 - G)^2 \frac{G_0}{1 - G_0} p_{g_0} - p G (1 - G) \right) \quad \text{dans } \Omega_m \quad (4.21)$$

Si bien que la fonction f définie dans l'Equation (4.4) s'écrit :

$$f(G, p_g - p) = \frac{3}{4\eta_0} (p_g - p) G (1 - G) = \frac{3}{4\eta_0} \left((1 - G)^2 \frac{G_0}{1 - G_0} p_{g_0} - p G (1 - G) \right) \quad (4.22)$$

Enfin, pour pouvoir résoudre numériquement l'Equation (4.21), nous devons étendre son domaine de validité à Ω , de manière à avoir le second membre de (4.21) nul dans Ω_v .

En définitive, le taux de gaz G vérifie, dans Ω , l'Equation suivante :

$$\boxed{\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G &= \frac{3}{4\eta_0} \left((1 - G)^2 \frac{G_0}{1 - G_0} p_{g0} \mathbb{1}_{\Omega_m} - pG(1 - G) \right) \\ [G(\cdot, t)]_{\partial\Omega^-} &= 0 \\ G(x, 0) &= G_0 \mathbb{1}_{\Omega_m}(x, 0) \end{cases}} \quad (4.23)$$

Cette équation est discrétisée par la méthode espace-temps Garlekin discontinu que nous avons développée à la section 2.4. L'ordre d'approximation temporel q doit être le même pour les fonctions caractéristiques du vide et du mélange $\mathbb{1}_{\Omega_v}^h$ et $\mathbb{1}_{\Omega_m}^h$ et pour le taux de gaz G .

Nous venons d'établir un premier couplage micro-macro en reliant le taux d'expansion du gaz à la différence de pression entre pression du gaz et pression ambiante dans le mélange liquide - gaz Ω_m . Cette relation est déduite du modèle analytique décrivant l'expansion d'une bulle de gaz dans un liquide newtonien. Jusqu'à présent, aucun cas n'a été fait de l'interaction entre les bulles. Nous allons prendre en compte ce phénomène grâce à nos simulations d'expansion d'un volume représentatif.

4.3.2 Expression du taux d'expansion d'une mousse

Nous réalisons plusieurs simulations d'expansion de structure de mousse en faisant varier la densité de bulles. La fraction gazeuse initiale est la même pour chaque simulation, $G_{c0} = 5\%$, si bien que, plus le nombre de bulles considérées est élevé, plus les tailles de celles-ci, prises à même taux de gaz, sont petites. Nous prenons des structures ordonnées (bulles disposées selon une grille) et des bulles ayant la même taille et la même pression initiale de manière, d'une part, à conserver l'intégralité de la structure dans le domaine de calcul durant l'expansion, et d'autre part à satisfaire les hypothèses du modèle précédemment développé.

Enfin, nous prenons la pression ambiante $p_{ext} = 0$. En l'absence d'interaction entre bulles, et puisque celles-ci ont la même pression, le taux de gaz G_c déterminé par le modèle précédent (Equation (4.20)) vaut :

$$G_c(t) = 1 - \left(\frac{3}{4\eta_0} \frac{p_{g0} G_{c0}}{1 - G_{c0}} t + \frac{1}{1 - G_{c0}} \right)^{-1} \quad (4.24)$$

La Figure 4.9 présente les évolutions du taux de gaz obtenues par simulation avec 64, 512, 729, 1000 et 1331 bulles, et les compare avec celle fournie par l'expression (4.24).

Les résultats montrent que le taux de gaz, et donc le taux d'expansion est fortement influencé par la densité de bulles, et diminue lorsque cette dernière augmente. Ceci reflète l'interaction entre les bulles et les contraintes qu'elles exercent les unes sur les autres.

Considérons l'expansion de 64 bulles. Tant que la fraction gazeuse n'excède pas 45%, son évolution reste similaire à celle obtenue sans interaction. La divergence observée entre les deux fractions au-delà de 50% s'explique par le fait que le gaz sort du volume de calcul provoquant une diminution de la quantité de liquide présent dans

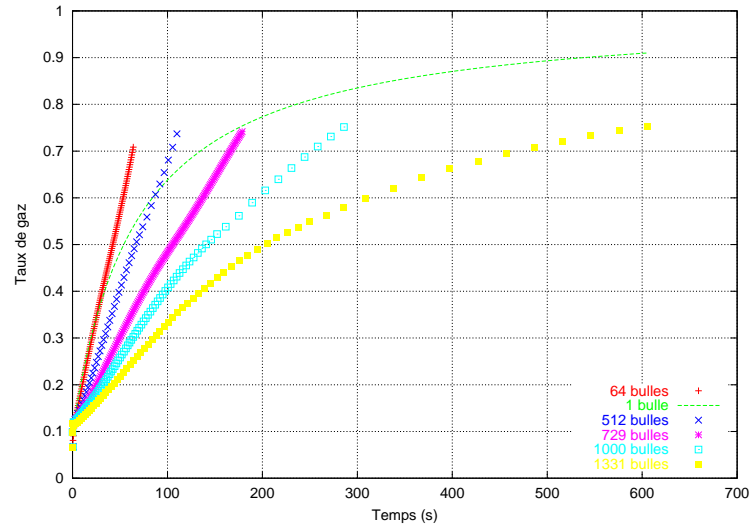


FIG. 4.9 – Evolution du taux de gaz lors de simulations d'expansion de volumes de mousse ordonnée, contenant de 64 à 1331 bulles. Le taux de gaz initial est le même dans tous les cas et $p_{ext} = 0$. Le taux de gaz correspondant à une bulle est celui donné par le modèle précédent ne tenant pas compte des interactions

ce volume, comme expliqué au précédent chapitre. En conséquence, au-delà d'un certain seuil, le taux d'expansion de la fraction gazeuse est surestimé par rapport à la réalité. Ce raisonnement est applicable pour chaque simulation.

Notons de plus, que plus le nombre de bulles considérées est élevé, et plus ces effets de bord sont négligeables par rapport à l'ensemble des bulles restant à l'intérieur.

Nous choisissons d'exprimer l'interaction des bulles dans l'expression du taux de gaz en introduisant simplement dans l'expression (4.24), un paramètre κ :

$$G_c(t) = 1 - \left(\kappa \frac{3}{4\eta_0} \frac{p_{g0} G_{c0}}{1 - G_{c0}} t + \frac{1}{1 - G_{c0}} \right)^{-1} \quad (4.25)$$

κ est déterminé d'après les courbes de la Figure 4.9. Sa valeur est fonction de la densité de bulles (Figure 4.10(b)), et dépend donc également du rayon de ces bulles. Les courbes correspondant à l'expression (4.25) sont tracées sur la Figure 4.10(a).

En définitive, nous proposons le couplage micro-macro suivant, qui exprime le taux d'expansion d'une mousse polymère dans laquelle la matrice liquide est newtonienne de consistance η_0 :

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G &= \frac{3\kappa}{4\eta_0} \left((1 - G)^2 \frac{G_0}{1 - G_0} p_{g0} \mathbb{1}_{\Omega_m} - pG(1 - G) \right) \\ [G(\cdot, t)]_{\partial\Omega^-} &= 0 \\ G(x, 0) &= G_0 \mathbb{1}_{\Omega_m}(x, 0) \end{cases} \quad (4.26)$$

Le système (4.5) est maintenant fermé, tant pour la viscosité que pour le taux d'expansion. Nous allons mettre en application ces considérations dans la section suivante.

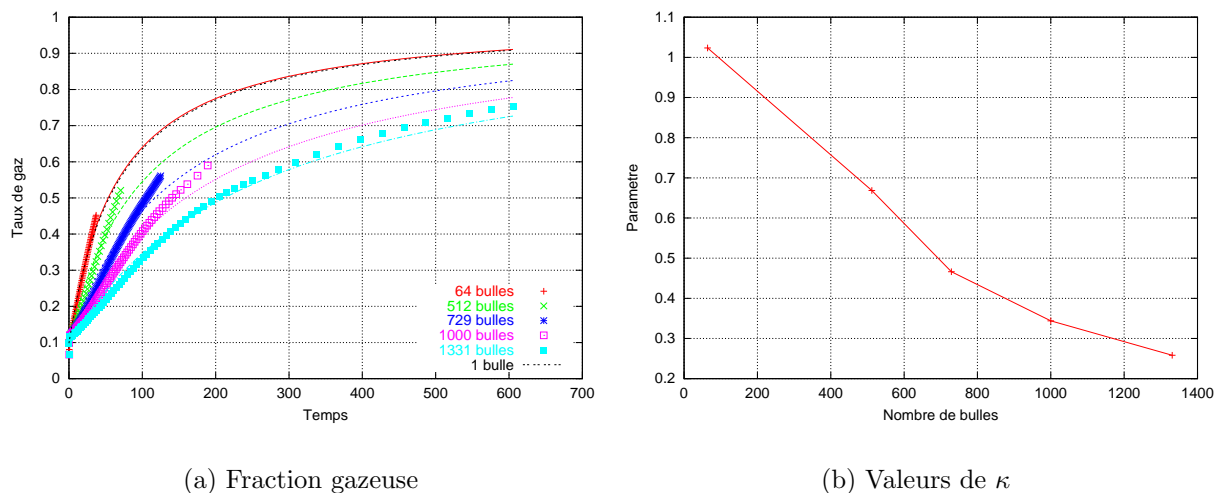


FIG. 4.10 – Evolution du taux de gaz lors de l'expansion d'une structure de mousse. Les points correspondent aux valeurs obtenues par simulation. Les courbes sont les approximations estimées par l'Equation (4.25). Les valeurs trouvées pour κ sont sur la courbe de droite.

4.4 Simulation macroscopique de l'expansion d'une mousse

Nous présentons ici un premier exemple de simulation à l'échelle macroscopique. Il s'agit de l'expansion d'une mousse dans une cavité cylindrique de hauteur 100 mm et de rayon 25 mm. Grâce à la symétrie du problème, le domaine de calcul Ω se réduit au quart de cylindre représenté sur la Figure 4.11. Deux faces de ce domaine sont alors considérées comme plans de symétrie lors de l'imposition des conditions au bord du problème mécanique. Sur le reste de la frontière du domaine de calcul, un contact collant est supposé, avec $\mathbf{v} = 0$. Ce choix ne correspond pas nécessairement à la réalité [42], mais constitue une première approximation.

Initialement, le mélange liquide - gaz occupe 14% du volume de la cavité comme décrit sur la Figure 4.11. La fraction gazeuse initiale est prise à $G_0 = 1\%$, tandis que la pression initiale du gaz est $p_{g0} = 10^6 Pa$. La matrice liquide du mélange est supposée newtonienne de consistance $\eta_0 = 10^3 Pa.s$. La viscosité η_m du mélange est donnée par la loi (4.12) avec le jeu de paramètres trouvé pour 1331 bulles. Le taux d'expansion du mélange est donné par l'expression (4.26), où le paramètre κ est pris égal à 0.258, valeur trouvée avec 1331 bulles.

Nous distinguons deux cas de figures : l'expansion contrôlée et l'expansion libre, correspondant à une cavité fermée (injection) ou libre (extrusion).

4.4.1 Expansion fermée

Le domaine de calcul Ω est fermé : la partie de la frontière $\partial\Omega$ située dans le plan $z = 100$ (voir Figure 4.11) est considérée comme une paroi à contact collant ($\mathbf{v} = 0$). La Figure 4.12, où sont représentées les isovaleurs supérieures à 0.5 de la fonction

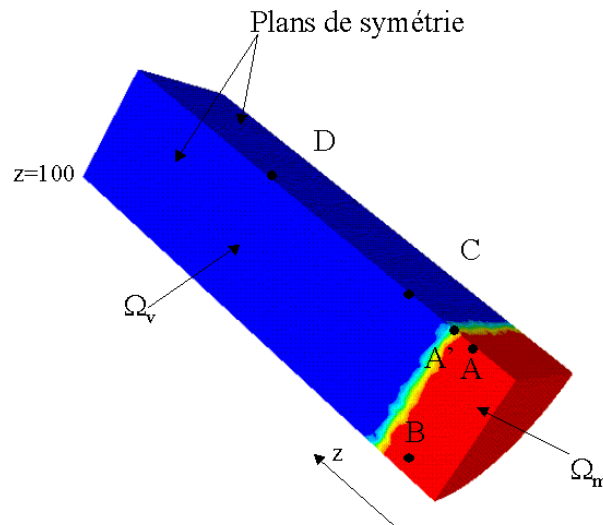


FIG. 4.11 – Domaine de calcul à l’instant initial : un quart de cylindre de hauteur 100 mm, de rayon 25 mm. Les plans de symétrie se caractérisent par la condition suivante : $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ et $\sigma_n - (\sigma_n \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = 0$ où $\sigma_n = \sigma \mathbf{n}$. Nous suivons l’évolution des grandeurs lors de l’expansion aux points désignés par les lettres A, A’, B, C, D

caractéristique du mélange, montre l’expansion de la mousse, obtenue par simulation à l’échelle macroscopique. Remarquons la forme bombée du front de matière, due au contact collant et à l’absence des termes de gravité.

Les Figures 4.13 et 4.14 montrent l’évolution de la fraction gazeuse au cours de cette expansion. La fraction gazeuse à coeur est assez homogène, avec des variations n’excédant pas les 5%, et atteint une valeur comprise entre 80 et 88% de gaz en fin de remplissage. L’échelle de la Figure 4.14, est ainsi limitée à l’intervalle $[0.8, 0.88]$ afin de mettre en évidence ces écarts. On s’aperçoit alors que plus on s’éloigne du front de matière et plus la valeur de la fraction gazeuse diminue, ce qui s’explique par l’augmentation de la pression ambiante.

L’évolution de la vitesse d’expansion est présentée sur la Figure 4.15. Celle-ci est maximale au front de matière. Au temps $t = 4.09s$ (Figure 4.15(d)) nous constatons une chute de la vitesse ainsi que de la pression. Cela signifie qu’à coeur, dG/dt est quasiment nulle, donc que nous avons atteint l’équilibre entre pression du gaz et pression ambiante. La valeur maximale de la fraction gazeuse est alors atteinte, et est de 88 %.

Pour des temps supérieurs à 4s, les parties de la cavité non remplies se remplissent progressivement : c’est le cas des coins supérieurs et des zones près des parois à contact collant (Figures 4.13(g) - 4.13(h)). De plus, la fraction gazeuse à coeur tend à s’homogénéiser lentement (Figure 4.14).

La Figure 4.16 présente l’évolution de la fraction gazeuse, de la viscosité du mélange, de la vitesse selon z et de la pression aux points notés A, A’, B, C et D sur la Figure 4.11.

Initialement, les points A et B sont dans le mélange, avec une fraction gazeuse de 1%, tandis que les points C et D sont dans la partie vide. La fraction gazeuse y

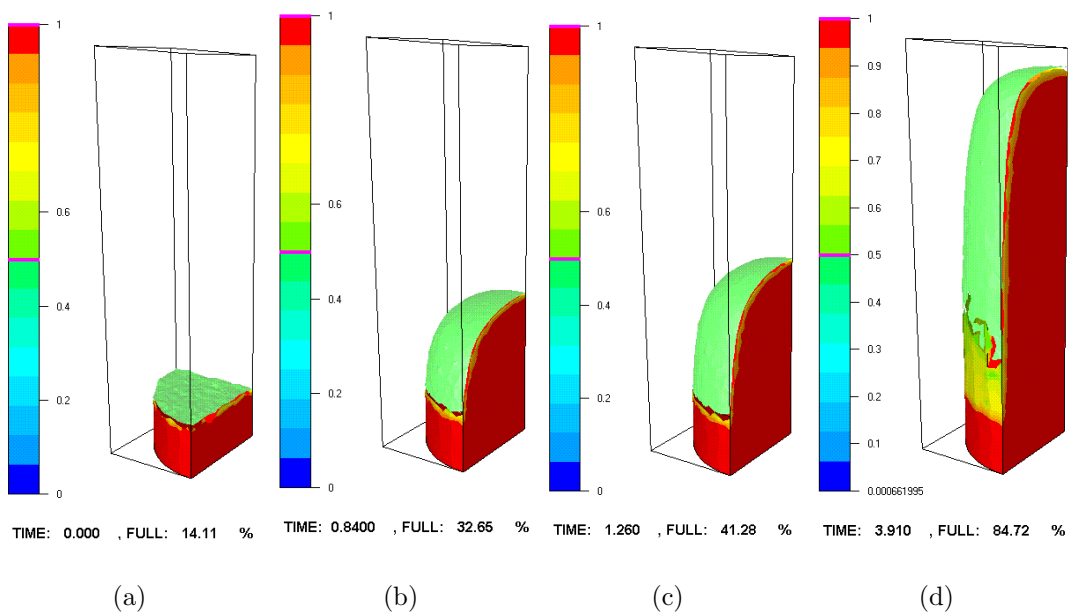


FIG. 4.12 – Expansion d'une mousse dans un cylindre avec $\eta_0 = 1000$ Pa.s, $\eta_m = \eta_0 K(G)$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6$ Pa (fonction caractéristique du mélange)

est alors nulle. L'arrivée du front de matière en C et D est symbolisée par les traits verticaux sur la Figure 4.16(a) aux temps $t = 0.6$ pour C et $t = 2.3$ pour D .

La fraction gazeuse est donc d'abord transportée avec le front de matière aux points C et D , puis suit son évolution selon la loi des gaz parfaits. Nous constatons sur la Figure 4.16(a) une évolution plus lente de la fraction gazeuse dans les zones où la pression est la plus élevée (Figure 4.16(d)) : près des parois, comme au point B , et loin du front de matière (point A par rapport à C , et point C par rapport à D). Cette évolution se répercute sur celle de la viscosité de la mousse.

L'évolution de la viscosité relative η_m/η_0 est représentée aux points A , B , C et D sur la Figure 4.16(b). Tant que les points C et D sont dans la partie vide, le rapport des viscosités est, par défaut pris à 1. Lorsque le front de matière atteint ces points, l'évolution de la viscosité est gouvernée par l'évolution de la fraction gazeuse.

L'évolution de la pression aux points A , B , C , D est tracée sur la Figure 4.16(d). Les valeurs aux points C et D avant passage du front de matière (en $t = 0.6$ pour C et $t = 2.3$ pour D) ne sont pas à prendre en compte. Notons d'abord la pression élevée en B due à la proximité de la paroi. Aux points A et B la pression diminue rapidement jusqu'au temps $t = 0.5$ s. Ceci vient d'un taux d'expansion dG/dt maximal durant cette période (Figure 4.16(a)), et donc d'une décroissance rapide de la pression du gaz, comme on l'a vu dans le modèle micro. Passé cette période de forte expansion, nous constatons, en chaque point, une légère augmentation de la pression, due à l'éloignement du front de matière.

La Figure 4.16(c) représente l'évolution de la vitesse aux points A , A' , B , C , D . Re-

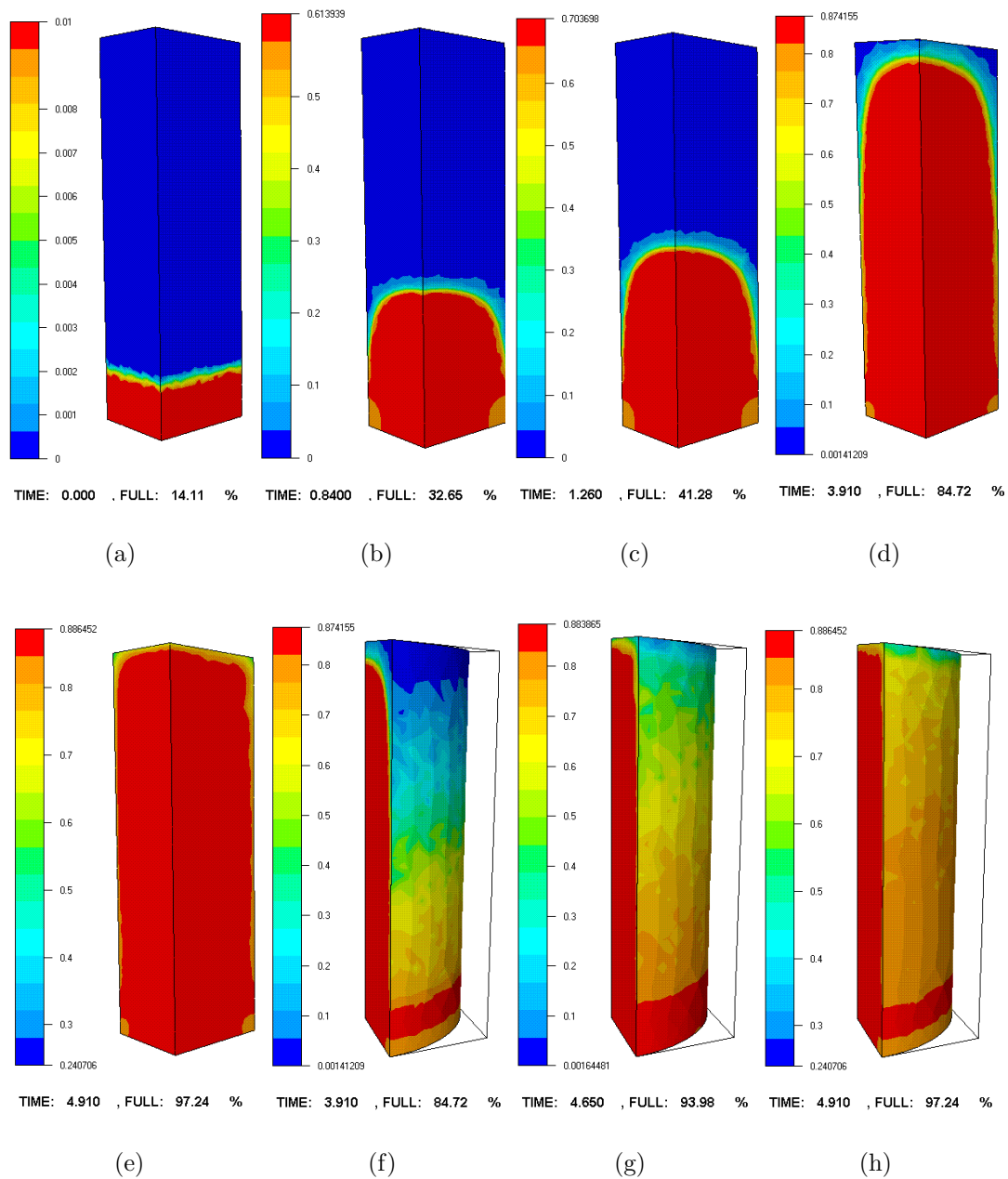


FIG. 4.13 – Evolution de la fraction gazeuse lors de l'expansion fermée d'une mousse dans un cylindre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6 Pa$

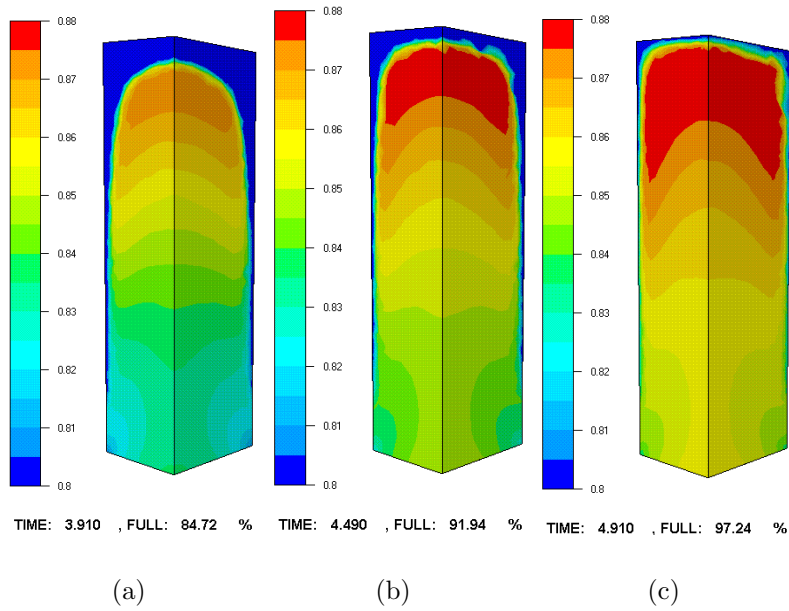


FIG. 4.14 – Evolution de la fraction gazeuse en fin d'expansion fermée. Seules les valeurs comprises entre 0.8 et 0.88 sont représentées

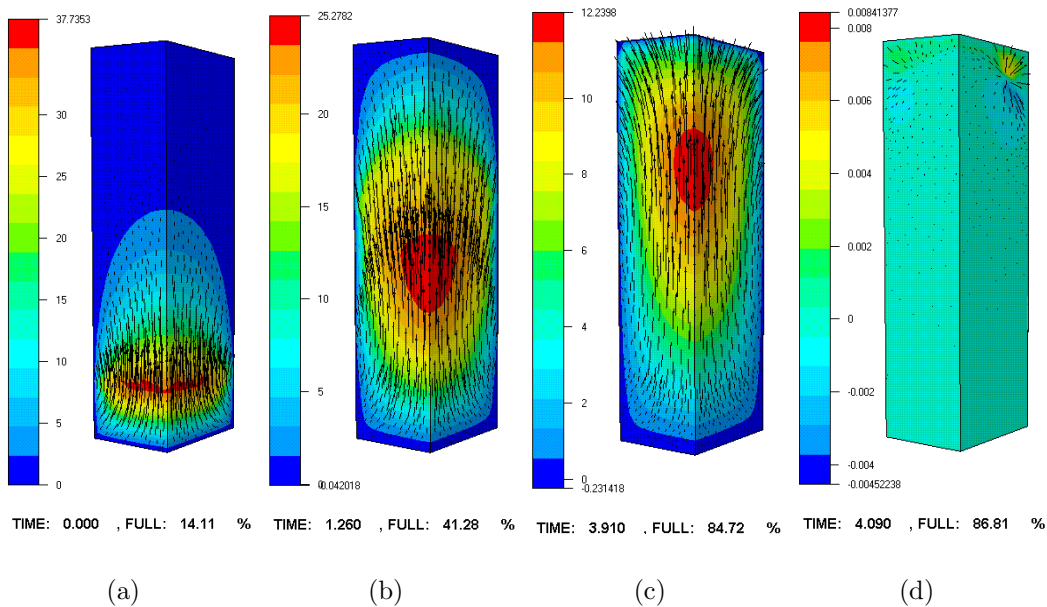


FIG. 4.15 – Vecteurs vitesse et isovaleurs de la troisième composante du champ de vitesse durant l'expansion d'une mousse dans un cylindre fermé

marquons l'influence de la paroi à contact collant, avec la faible vitesse au point B . Le point A' est situé initialement au front de matière (contrairement à A , situé en-dessous). Ainsi, nous constatons, pour chaque point, que la vitesse est maximale lorsque ce point se trouve au front de matière. Ceci est normal, étant donné que la contrainte est minimale au front de matière. De plus, cette vitesse maximale diminue au cours du temps, conformément à l'évolution de la pression et du taux d'expansion (vitesse maximale de A' inférieure à celle de C , inférieure à celle de D).

Enfin, nous constatons sur les Figures 4.16(c) et 4.16(d), qu'au temps $t = 4\text{ s}$ la vitesse et la pression s'annulent en A , B , C et D . Ceci signifie que le taux d'expansion dG/dt est nul, donc qu'il y a équilibre entre la pression ambiante et celle du gaz.

4.4.2 Expansion libre

Le domaine de calcul Ω est maintenant ouvert : la matière peut sortir librement par la partie de la frontière $\partial\Omega$ située dans le plan $z = 100$ (voir Figure 4.11), sur laquelle nous imposons une contrainte nulle ($\sigma\mathbf{n} = 0$).

La Figure 4.17 montre l'évolution de la fraction gazeuse au cours de l'expansion. Tant que le front de matière se situe assez loin du sommet du cylindre (Figures 4.17(a) et 4.17(b)), rien ne change par rapport à l'expansion contrôlée de la Figure 4.13. Par contre, le temps mis pour atteindre l'équilibre, est de 5 s, au lieu de 4 s dans le cas fermé.

Nous avons tracé sur la Figure 4.18 l'évolution de la fraction gazeuse, de la viscosité, de la vitesse et de la pression aux points A , B , C et D . Les commentaires faits précédemment sont toujours valables. Notons les pressions plus basses que précédemment (Figure 4.18(d)), en particulier en D , dues à la face de sortie sur laquelle $\sigma\mathbf{n} = 0$; la vitesse en fin d'expansion est, elle, plus élevée que précédemment (Figure 4.18(c)).

Le couplage micro-macro que nous venons d'effectuer s'appuie sur le fait que la modélisation de l'expansion d'un volume représentatif de mousse nécessite une variable d'ordre macroscopique, la pression ambiante. L'expansion a donc lieu grâce aux fluctuations de pression Δp dans le mélange liquide - gaz. Ainsi, des hétérogénéités de fraction gazeuse, et donc de taille de bulle (ou de densité de bulles) apparaissent dans la mousse. L'expansion de la mousse dépend donc de sa structure, via la viscosité et la masse volumique, et des conditions de fabrication via les hétérogénéités de pression.

Notons de plus, que la consistance η_0 de la matrice liquide, la pression initiale du gaz p_{g0} et la fraction gazeuse initiale G_0 sont des facteurs d'échelle dans nos simulations : la multiplication par un facteur n de p_{g0} ou de G_0 entraîne dans les simulations une division d'un facteur n du temps d'expansion ; la multiplication par un facteur n de η_0 entraîne une multiplication d'un facteur n du temps d'expansion.

Lors de la fabrication d'une mousse polymère, la température est l'autre facteur influant, avec la pression, sur l'expansion d'une mousse polymère (voir le chapitre 1), avec notamment la formation d'une peau en surface due au refroidissement [19]. Pour conclure ce chapitre et ce document, nous proposons une première prise en

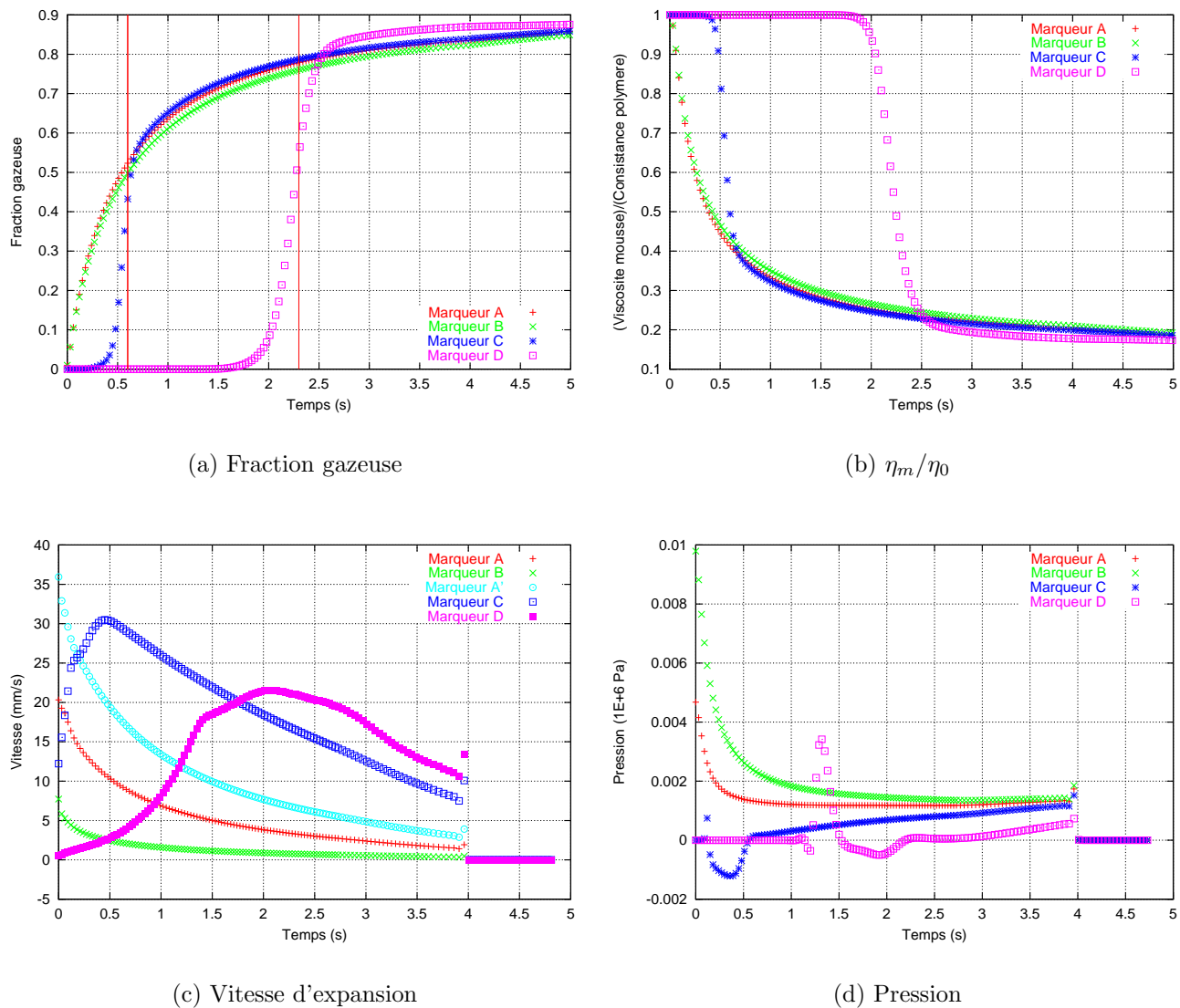


FIG. 4.16 – Evolution de la fraction gazeuse, de η_m/η_0 , de la vitesse et de la pression aux points A, A', B, C, D lors de l'expansion d'une mousse dans un cylindre fermé. Le rapport η_m/η_0 est par défaut égal à 1 en amont du front de matière. Les deux traits verticaux sur la première figure marquent les instants où le front de matière atteint les points C et D.

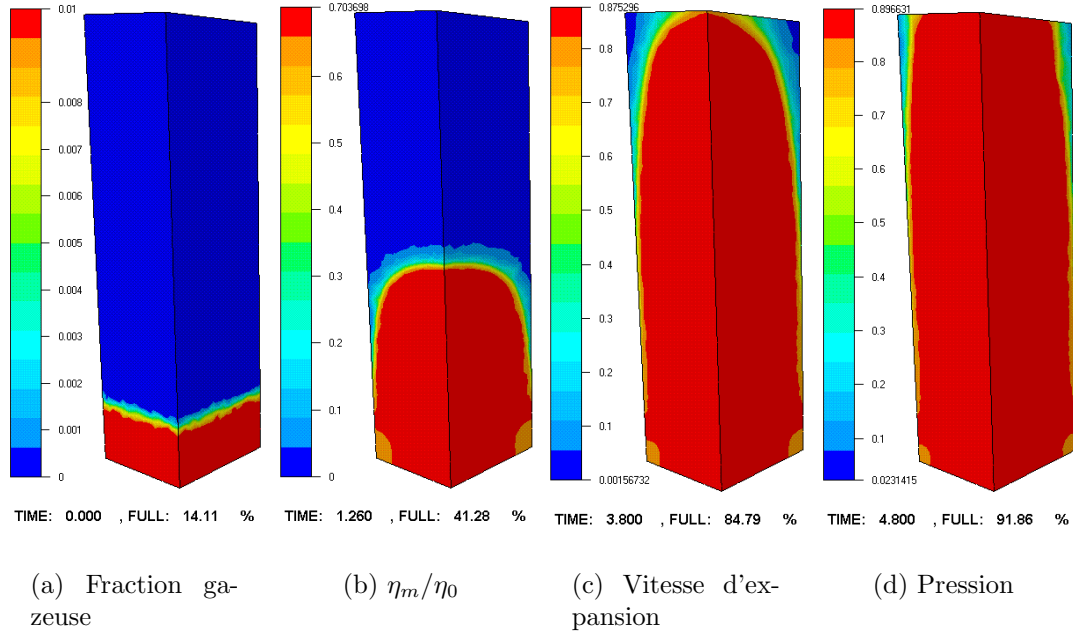


FIG. 4.17 – Evolution de la fraction gazeuse lors de l'expansion libre d'une mousse dans un cylindre avec $\eta_m = \eta_0 K(G)$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6$ Pa.

compte de la thermique au niveau du couplage micro-macro.

4.5 Couplage thermo-mécanique

Nous supposons que la masse volumique ρ_l de la matrice polymère ne dépend pas de la température. En conséquence notre approche macroscopique de l'expansion anisotherme d'une mousse est toujours basée sur l'Equation (4.7) couplée à la température T du mélange au travers, d'une part de la viscosité $\eta_m(G, T)$, et d'autre part du taux d'expansion $dG/dt = f(G, p_g - p, T)$.

Nous faisons l'hypothèse que la température est homogène dans le volume représentatif durant son expansion.

L'expression (4.12) de la viscosité de la mousse η_m est alors étendue au cas anisotherme par :

$$\eta_m(G, T) = \eta(T) \left(1 + r_1^2 \left(\frac{G}{1-G} \right)^2 \right)^{\frac{r_2-1}{2}} \quad (4.27)$$

où la viscosité du liquide $\eta(T)$ suit une loi de type Arrhénius (2.126).

Considérons le taux d'expansion dG_c/dt du gaz dans le volume représentatif, calculé sans tenir compte des interactions entre bulles (bulles sphériques et pression du gaz homogène). La température étant supposée homogène, la relation (4.18) qui donne dG_c/dt se généralise, dans le cas anisotherme, en :

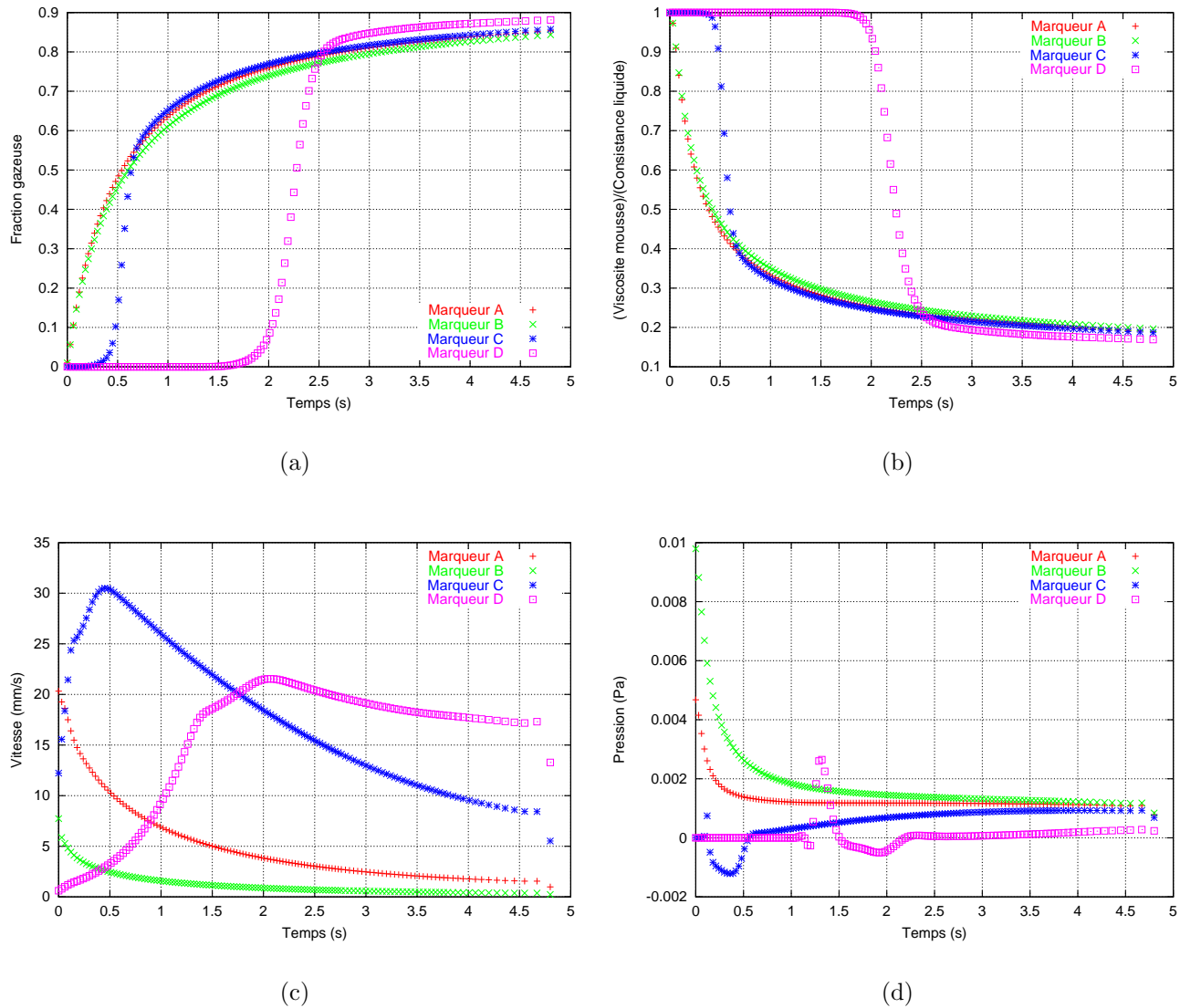


FIG. 4.18 – Evolution de la fraction gazeuse, de la viscosité, de la vitesse et de la pression aux points A, B, C, D lors de l'expansion libre d'une mousse dans un cylindre

$$\frac{dG_c}{dt} = \frac{3}{4\eta(T)}(p_g(T) - p_{ext})G_c(1 - G_c) \quad (4.28)$$

La pression p_g obéit à la loi des gaz parfaits. Dans chaque bulle Ω_{g_i} , nous avons : $p_g|\Omega_{g_i}| = n_{g_i}RT$ où n_{g_i} est le nombre de moles contenues dans la $i^{\text{ème}}$ bulle. Regardant l'instant initial, nous déduisons la relation : $n_{g_i}R = p_{g_0}|\Omega_{g_i}^0|/T_0$. D'où, $p_g|\Omega_{g_i}| = p_{g_0}|\Omega_{g_i}^0|T/T_0$. En sommant sur toutes les bulles, nous obtenons finalement : $p_g|\Omega_g| = p_{g_0}|\Omega_{g_0}|T/T_0$. Le volume de liquide étant constant durant l'expansion, la relation (4.13) permet alors d'écrire :

$$p_g = \frac{1 - G}{G} \frac{G_0}{1 - G_0} p_{g_0} \frac{T}{T_0} \quad (4.29)$$

En définitive, l'Equation (4.26) décrivant le couplage micro-macro et donnant le taux d'expansion du gaz dans une mousse est généralisée au cas anisotherme par :

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G &= \frac{3\kappa}{4\eta(T)} \left((1 - G)^2 \frac{G_0}{1 - G_0} \frac{p_{g_0}}{T_0} T \mathbb{1}_{\Omega_m} - pG(1 - G) \right) \\ [G(\cdot, t)]_{\partial\Omega^-} &= 0 \\ G(x, 0) &= G_0 \mathbb{1}_{\Omega_m}(x, 0) \end{cases} \quad (4.30)$$

Dans les expressions (4.27) et (4.30) les paramètres r_1 , r_2 et κ sont supposés indépendants de la température, et donc ont les mêmes valeurs que précédemment.

Enfin, la résolution du système (4.7) est couplée à celle de l'équation de la chaleur :

$$\begin{cases} (1 - G)\rho_l c_m \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) &= 2\eta_m \varepsilon(\mathbf{v}) : \varepsilon(\mathbf{v}) - p \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot \phi \\ \phi &= -k_m \nabla T \\ \forall (x, t) \in \Omega_l(t) \times [0, \Theta] \end{cases} \quad (4.31)$$

La résolution de l'Equation (4.31) s'effectue à l'aide de la méthode éléments finis $P0/P0^+$ décrite au paragraphe 2.7.2.2. Notons que dans la partie vide Ω_v , les paramètres thermiques sont tels que : $k_v = 0$ et $1/\rho_v c_{vide} = 0$. Il n'y a donc pas d'échange de chaleur entre Ω_v et Ω_m .

Nous appliquons le couplage thermo-mécanique ci-dessus à l'expansion libre du paragraphe 4.4.2.

4.5.1 Expansion libre anisotherme

Considérons, comme au paragraphe 4.4.2 une expansion libre avec, dans un premier temps, la même consistance de la matrice liquide, $\eta_0 = 1000 Pa.s$, la même fraction gazeuse initiale $G_0 = 1\%$, et la même pression initiale du gaz $p_{g_0} = 10^6 Pa$. Le mélange liquide gaz est à une température initiale de $300^\circ C$, tandis que les parois du moule Ω sont maintenues à une température de $50^\circ C$.

La chaleur massique et la conductivité thermique du mélange sont, ici, prises égales à celles du liquide. Pour la chaleur massique, ceci peut se justifier, puisque la chaleur

massique d'une mousse polyuréthane est de l'ordre de $10^3 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$, comme celle d'un polymère. Par contre, la conductivité thermique d'une mousse polyuréthane (par exemple) est de l'ordre de $2.10^{-2} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, alors que celle d'un polymère est supérieure à $10^{-1} \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. L'étude ci-dessous est donc qualitative, et vise à montrer les effets du couplage thermo-mécanique.

Les commentaires faits au paragraphe 4.4.2 sont toujours valables. L'évolution de la température dans le mélange est montrée sur la Figure 4.19. Soulignons que sur cette figure la partie occupée par le domaine vide est affichée à 300°C . La mousse n'adhérant pas à la paroi du moule (voir Figure 4.12), le vide fait office d'isolant thermique entre le moule et le mélange. Pour cette raison, la chaleur se propage surtout de la base de Ω (qui, au départ est occupée par le mélange) vers le haut (voir Figure 4.19(c)). Le temps d'expansion est de 5.5 s, ce qui fait que seule une mince couche de mélange située près de la base de Ω est refroidie. En effet, le mélange a une effusivité initiale $a = k_l/\rho_m c_l$ de l'ordre de $10^{-7} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, entraînant une profondeur de pénétration thermique $z = \sqrt{at}$ de l'ordre de 7 mm pour le temps d'expansion considéré [1].

L'évolution de la fraction gazeuse est décrite par la Figure 4.20. Le refroidissement aux parois ralentit l'évolution de la fraction gazeuse près de ces parois. Ce phénomène a deux origines. D'une part le rapport T/T_0 du à la loi des gaz parfaits et intervenant dans l'expression du taux d'expansion (4.30) : plus ce rapport est petit, et plus le taux d'expansion est faible ; d'autre part l'augmentation de la viscosité du polymère avec la diminution de la température, ce qui ralentit l'expansion du mélange via le facteur $1/\eta(T)$ intervenant dans l'Equation (4.30). Le rapport entre la viscosité de la mousse η_m et la consistance du polymère η_0 est représenté sur la Figure 4.21 aux points A , B , C et D . Ainsi, pour le point B situé près de la paroi, la viscosité augmente lorsque la température commence à baisser au voisinage de ce point. Nous observons ainsi le phénomène de formation de peau de surface, largement débattu dans la littérature des mousses polymères [31].

La Figure 4.20(d) représente la fraction gazeuse au même temps que sur la Figure 4.20(c). Simplement, seules les valeurs comprises entre 0.8 et 0.89 sont représentées sur cette figure, afin de mettre en avant le gradient de fraction gazeuse, de la base au sommet du domaine, du à la différence de température et de pression.

Remarquons enfin que l'expansion ne dépend plus linéairement de la consistance du polymère η_0 , de la pression initiale du gaz p_{g0} et de la fraction gazeuse initiale G_0 . Ainsi, la Figure 4.23 montre l'évolution de la fraction gazeuse lorsque $p_{g0} = 10^5 \text{ Pa}$ au lieu de 10^6 Pa . Le temps d'expansion n'est plus, comme dans le cas isotherme multiplié par 10, mais par un facteur supérieur à 10, et dépend donc de manière non linéaire de p_{g0} . Le temps d'expansion étant plus élevé que précédemment, la profondeur de pénétration thermique est elle-même plus importante (Figure 4.22), d'où un gradient plus prononcé de la fraction gazeuse. Par ailleurs, le temps d'expansion plus élevé implique également, à coeur de mousse, là où le mélange n'a pas encore refroidi, une fraction gazeuse finale plus élevée que dans le cas précédent. Ainsi, la simulation finit avec une fraction gazeuse maximale de 93%, contre 89% dans le cas où $p_{g0} = 10^6 \text{ Pa}$.

L'évolution de la fraction gazeuse et de la viscosité aux points A , B , C et D est

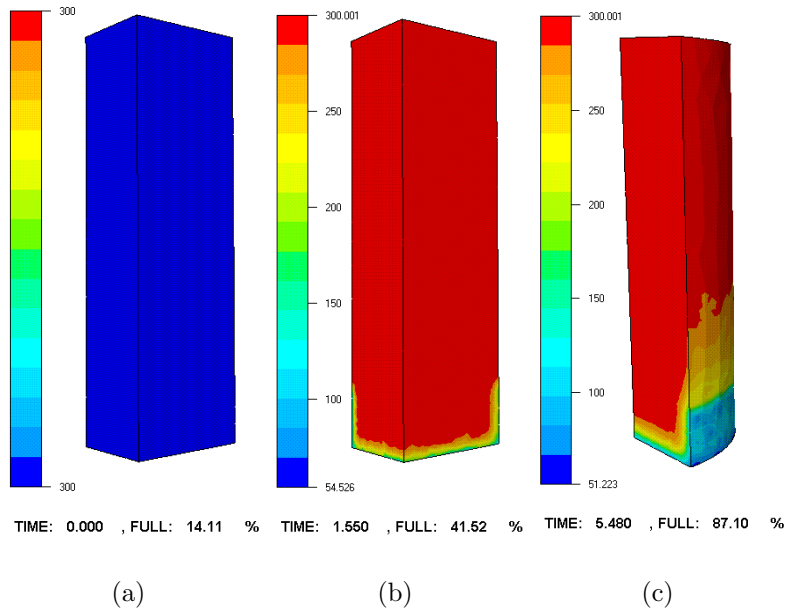


FIG. 4.19 – Evolution de la température lors de l’expansion libre d’une mousse dans un cylindre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6 Pa$

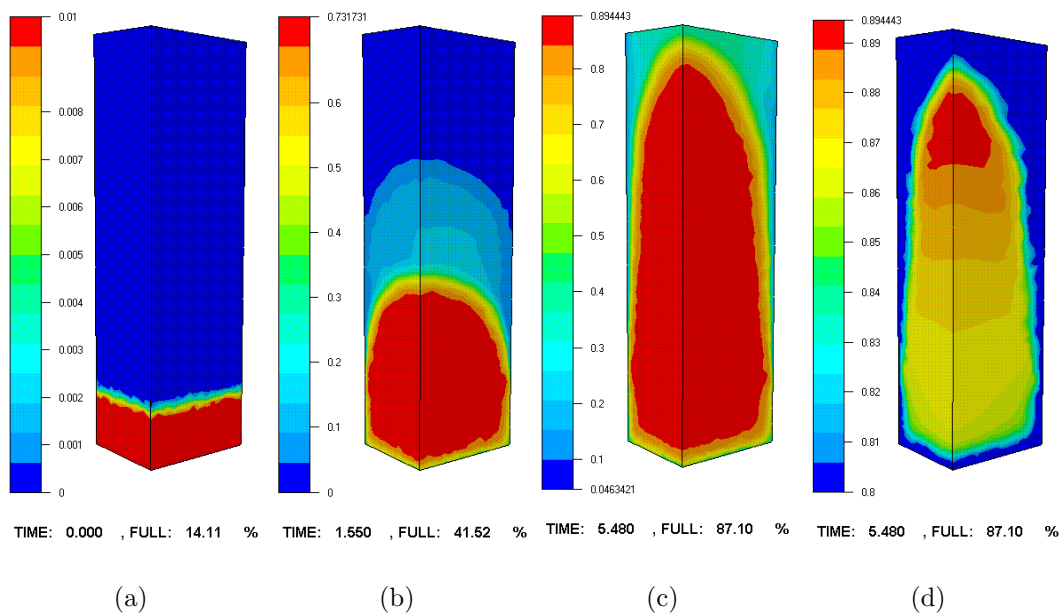


FIG. 4.20 – Evolution de la fraction gazeuse lors de l’expansion libre d’une mousse dans un cylindre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6 Pa$

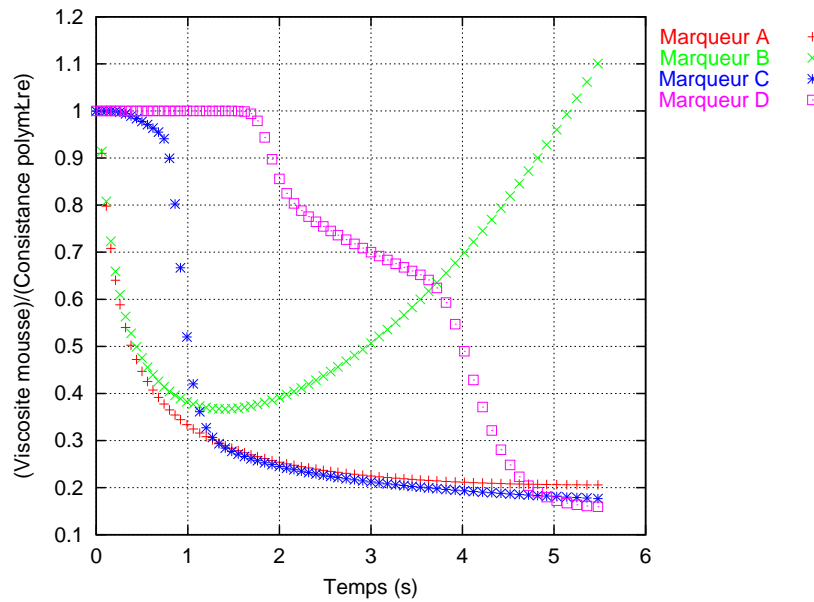


FIG. 4.21 – Evolution du rapport entre viscosité de la mousse et consistance du polymère, aux points A , B , C et D lors de l'expansion libre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^6 Pa$: effet du couplage thermo-mécanique

tracée sur la Figure 4.24. La viscosité aux points A , B et C diminue d'abord du fait de l'augmentation de la fraction gazeuse, puis croît avec le refroidissement.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé les outils développés pour simuler la formation et l'expansion d'une structure de mousse afin de décrire l'évolution de la viscosité et de la masse volumique d'un échantillon de mousse au cours de son expansion. Nous avons ainsi obtenu une dépendance de ces deux paramètres à la densité de bulles de la mousse. L'influence des interactions bulles - bulles sur ces paramètres a été mise en avant.

Nous basant sur ces résultats, nous avons ensuite effectué un couplage micro - macro permettant d'exprimer l'évolution de la masse volumique d'une mousse en expansion en fonction des fluctuations de pressions dans cette mousse.

La mousse est alors considérée comme un fluide homogène dont l'évolution de la masse volumique est donnée par le couplage micro - macro. La viscosité de ce fluide est celle déterminée pour un volume représentatif de mousse. Cette approche permet de prendre en compte les conditions du procédé de fabrication ainsi que l'influence la structure de mousse lors des simulations d'expansion. Ces simulations fournissent les variations de la fraction gazeuse dans le moule.

Enfin, nous avons réalisé un couplage thermo-mécanique au niveau de l'approche macroscopique. Les simulations montrent, que près des parois refroidies, l'expansion est plus lente, et même stoppée. On obtient ainsi la formation d'une peau de surface.

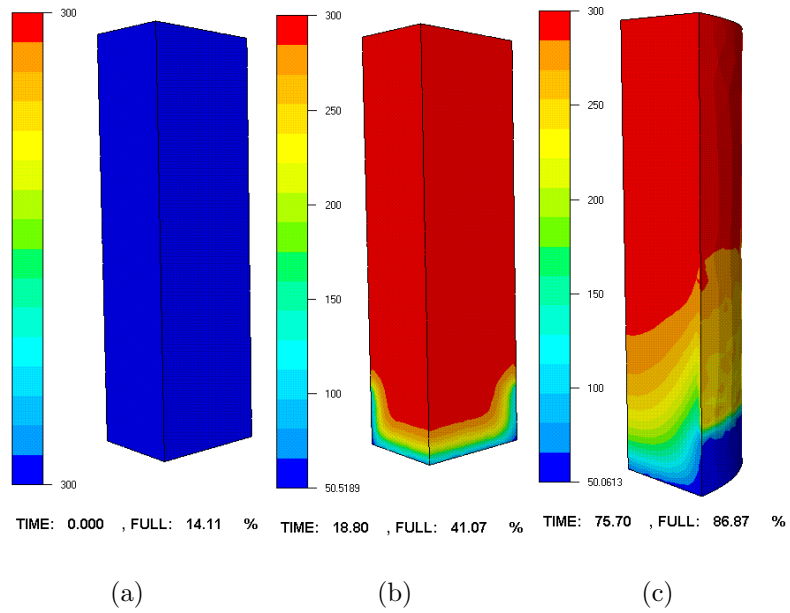


FIG. 4.22 – Evolution de la température lors de l’expansion libre d’une mousse dans un cylindre avec $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^5 Pa$

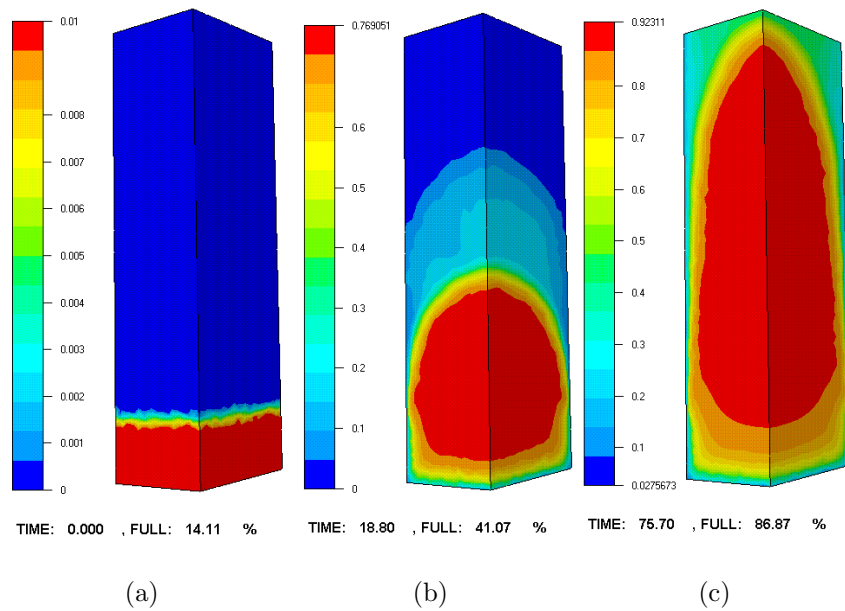
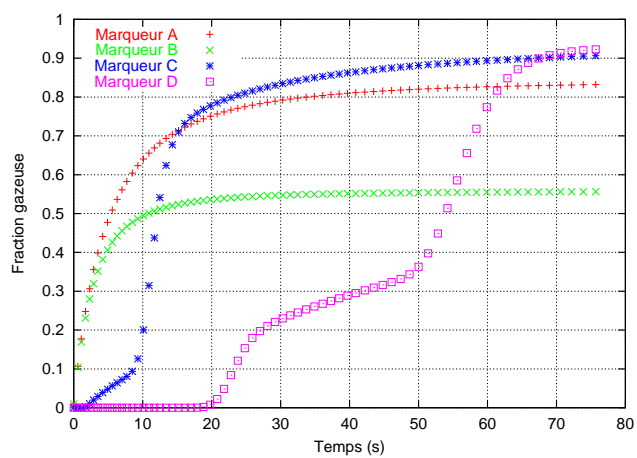
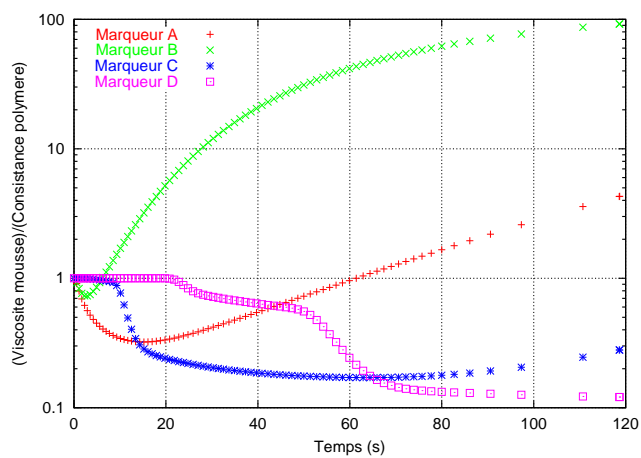


FIG. 4.23 – Evolution de la fraction gazeuse lors de l’expansion libre d’une mousse dans un cylindre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^5 Pa$



(a)



(b)

FIG. 4.24 – Evolution de la fraction gazeuse et de la viscosité (échelle logarithmique) en des points donnés de la mousse lors de l'expansion libre dans un cylindre. $\eta_0 = 10^3 Pa.s$, $G_0 = 1\%$, $p_{g0} = 10^5 Pa$

Conclusion

L'objectif de cette étude était de développer un outil numérique capable de rendre compte de la formation et de l'expansion de la structure d'une mousse polymère. Notre approche a été de simuler de manière directe le développement de cette structure, durant lequel, le taux de gaz passe de quelques pourcent à plus de 80% du volume total.

Ainsi, l'outil élaboré simule l'expansion de bulles de gaz dans une matrice polymère fondu. Cette expansion est due à la différence de pression entre la pression interne des bulles et la pression ambiante. Nous avons d'abord établi les équations en vitesse pression régissant l'écoulement du polymère provoqué par la contrainte exercée par le gaz. Le modèle quasi-statique des gaz parfaits décrit le comportement des bulles. Le choix numérique de mailler l'ensemble du domaine de calcul et de suivre l'évolution des bulles au travers d'une fonction caractéristique nous a conduit à prolonger les champs vitesse et pression dans le gaz. Le système d'équations obtenu définit la vitesse et la pression dans tout le domaine de calcul, et est discrétisé par l'élément fini $P1 + /P1$.

L'évolution de la fonction caractéristique du gaz est décrite par une équation de transport purement convective. Une méthode éléments finis espace-temps Galerkin discontinu a été développée et étudiée afin de résoudre ce type d'équation. Cette méthode est implicite, de sorte que sa stabilité n'est pas liée au choix du pas de temps. Ce choix dépend alors de la physique du problème et de la précision désirée. Une technique de r-adaptation de maillage est utilisée pour améliorer la précision sur les interfaces liquide - gaz.

Afin de suivre le changement d'échelle lié à l'expansion du gaz, le domaine de calcul est animé d'un mouvement global d'expansion. Cette transformation est une homothétie centrée dont le rapport est calculé de manière à ce que soit préservé le volume de liquide dans le domaine de calcul au cours de l'expansion.

Enfin, le couplage thermo-mécanique a été effectué. Une extension de la méthode Galerkin discontinu au problème de convection - diffusion permet de résoudre le problème thermique.

L'expansion d'une bulle a d'abord été étudiée précisément. Elle a permis de valider notre approche, en retrouvant les résultats des modèles cellulaires. L'expansion d'une structure aléatoire de mousse a ensuite été simulée, en 2D, en 3D, puis avec le couplage thermo-mécanique.

Lors de la simulation de l'expansion d'un système de bulles, celles-ci occupent

d'abord 1% du volume de calcul, puis croissent par différence de pression, jusqu'à remplir plus de 80% de l'espace. Durant cette expansion, les bulles interagissent directement, piégeant le polymère. Ainsi, une structure de mousse apparaît, avec formation de cellules polyédriques. Dans le cas anisotherme, des hétérogénéités de température apparaissent dans le liquide, en raison de la détente du gaz.

Le maillage utilisé en 3D compte 550 000 éléments tétraédriques. Les calculs ont été réalisés sur un Pentium III. Le temps CPU d'une simulation est d'environ 15 heures. D'un point de vue numérique, nous avons constaté une bonne description de la structure de mousse jusqu'à un taux de gaz de l'ordre de 60 à 70%. Au-delà de ce taux, les interfaces liquide - gaz deviennent trop fines pour être représentées correctement avec le maillage utilisé. Un maillage plus fin est donc nécessaire pour obtenir des taux de gaz supérieurs à 70%. Or, si le nombre d'éléments est multiplié par deux, la taille du système en vitesse - pression est multipliée par huit. De tels calculs, à plusieurs millions de degrés de liberté, peuvent motiver de nouveaux développements, notamment la parallélisation du code.

L'outil développé nous a permis d'effectuer une première caractérisation de l'évolution de la viscosité et de la masse volumique d'une mousse au cours de son expansion, en fonction de la densité de bulles. Ces expériences de "rhéologie numérique" ont mis en avant l'influence de l'interaction entre bulles. Cependant, une étude plus approfondie sur ce sujet est à faire. Il est en effet nécessaire de préciser la notion de volume représentatif, ainsi que la dépendance de la rhéologie à la forme des bulles. Nous avons proposé un couplage micro - macro utilisant la viscosité et l'évolution de la masse volumique déterminées en fonction de la densité de bulles. Des simulations d'expansions macroscopiques tenant compte du procédé de fabrication nous ont permis d'obtenir des hétérogénéités de fraction gazeuse dans la mousse.

Concernant le but de ce travail, la simulation et la prédiction de la formation d'une structure de mousse, de nombreuses perspectives sont à envisager.

Tout d'abord, des études peuvent être menées en utilisant l'outil développé. Ainsi, la dépendance de la structure de mousse à la rhéologie du polymère n'est pas clairement établie : qu'en est-il de la sensibilité au taux de déformation ? Obtient-t-on toujours une structure de mousse en faisant varier cette rhéologie ? De même, l'influence de la thermique doit être analysée plus finement.

Ensuite, des enrichissements physiques peuvent être apportés à l'outil développé. Le plus immédiat, peut-être, concerne le couplage thermo-mécanique. Nous avons en effet conclu au chapitre 2, que, pour que celui-ci soit effectif, la description de la différence $p_g - p_{ext}$ doit être améliorée (p_{ext} doit varier), lorsque l'expansion est pilotée par une différence de pression initiale. Il serait de plus intéressant d'étudier une expansion gouvernée par une réaction exothermique de création de gaz (mousses thermodurcissables, ou expansion de mousses alimentaires). Ceci pourrait fixer correctement les différences de pression, comme l'a montré la simulation d'expansion d'une bulle par transfert thermique au chapitre 2.

Il pourrait également être intéressant d'observer l'effet de la viscoélasticité sur l'expansion des bulles. Alors qu'un comportement pseudo-plastique augmente la vitesse d'expansion, notamment dans les premiers instants, la viscoélasticité devrait avoir

l'effet inverse.

Enfin, l'outil développé pourrait servir à étudier l'étape de germination. Nous avons en effet supposé dans notre modèle que tout le gaz est présent dès le départ sous forme de bulles. Les modèles proposés dans la littérature font, eux, intervenir une diffusion du gaz dissout dans le polymère vers les bulles. Cette diffusion participe à l'expansion. Ne pourrait-on pas imaginer que ce processus de diffusion corresponde à l'absorption de micro-bulles par des bulles plus grosses? La simulation directe grâce à notre code de calcul, de ce phénomène d'absorption, pourrait dans ce cas infirmer ou valider les modèles de germination existants. Dans cette optique, des développements tels que la prise en compte de la tension superficielle pourraient s'avérer nécessaires.

Annexe A

Equation de transport d'un domaine

Le but de cette annexe est de montrer que la fonction caractéristique $\mathbb{1}_A(x, t)$ où A désigne le domaine liquide Ω_l ou les bulles de gaz Ω_{g_i} , est solution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \mathbb{1}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbb{1}_A = 0 \quad \forall (x, t) \in \Omega \times [0, \Theta] \quad (\text{A.1})$$

L'Equation (A.1) décrit l'évolution du domaine A au cours du temps suivant un champ de vitesse \mathbf{v} . Des conditions doivent être imposées sur la partie entrante de $\partial\Omega$, *i.e* sur $\partial\Omega^- = \{x \in \partial\Omega; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0\}$ où \mathbf{n} est la normale unitaire extérieure à Ω . Par la suite, nous utiliserons le résultat suivant, exprimant la dérivée particulaire d'une intégrale de volume [26] :

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega(t)} k(x, t) dx = \int_{\omega(t)} \left(\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot [k\mathbf{v}] \right) dx \quad (\text{A.2})$$

où $\omega(t) \subset \Omega(t)$ contient un ensemble de particules fixées au cours du temps. L'égalité (A.2) est valide, pourvu que les dérivées mises en jeu soient bornées.

Prenons donc $\omega(t) \subset \Omega$ un ensemble de particules fixées au cours du temps. Cet ensemble peut être décomposé en au plus $n + 1$ sous-parties (où n est le nombre de bulles) :

$$\omega = \bigcup_{i=0}^n A_i \quad (\text{A.3})$$

où $A_0 = \Omega_l \cap \omega$ et $A_i = \Omega_{g_i} \cap \omega$, pour $i > 1$. Notons $\rho(x, t)$ la masse volumique d'une particule en x au temps t . La conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \int_{A_i} \rho(x, t) dx = 0 \quad (\text{A.4})$$

En notant $\mathbb{1}_A$ la fonction caractéristique de Ω_t ou Ω_{g_i} , (A.4) entraîne :

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega(t)} \mathbb{1}_A \rho(x, t) dx = 0 \quad (\text{A.5})$$

L'Equation (A.5) est à prendre au sens faible, dans la mesure où $\mathbb{1}_A \rho$ est discontinu sur ω . (voir aussi [50] et [51]). En appliquant (A.2) à (A.5), nous obtenons :

$$\int_{\omega(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\mathbb{1}_A \rho) + \nabla \cdot [\mathbb{1}_A \rho \mathbf{v}] \right) dx = 0 \quad (\text{A.6})$$

Ce qui peut encore s'écrire :

$$\int_{\omega(t)} \rho \left(\frac{\partial \mathbb{1}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbb{1}_A \right) dx + \int_{\omega(t)} \mathbb{1}_A \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v}] \right) dx = 0 \quad (\text{A.7})$$

La seconde intégrale de (A.7) s'annule par conservation de la masse. Ainsi, il en résulte que :

$$\int_{\omega(t)} \rho \left(\frac{\partial \mathbb{1}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbb{1}_A \right) dx = 0 \quad (\text{A.8})$$

Comme cette expression est valide pour tout $\omega(t) \subset \Omega$, nous en déduisons l'équation de transport annoncée (A.1).

Remarquons enfin, que pour prouver (A.1) directement dans le cas où $\mathbb{1}_A = \mathbb{1}_{\Omega_{g_i}}$, nous pouvons prendre $\omega(t) = \Omega_{g_i}(t)$.

Annexe B

Dérivée du volume d'un domaine animé d'une vitesse

Proposition B.1 Soit $\mathcal{V}(t)$ un domaine borné, $\mathcal{V}(t) \subset \mathbb{R}^3$, où t représente le temps. On note $\Sigma(t)$ la surface de $\mathcal{V}(t)$, et $V(t)$ son volume. Si la surface de $\mathcal{V}(t)$ se déplace à une vitesse $\mathbf{v}_\Sigma(x) \quad \forall x \in \Sigma$, on a :

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\Sigma} \mathbf{v}_\Sigma \cdot \mathbf{n} \quad (\text{B.1})$$

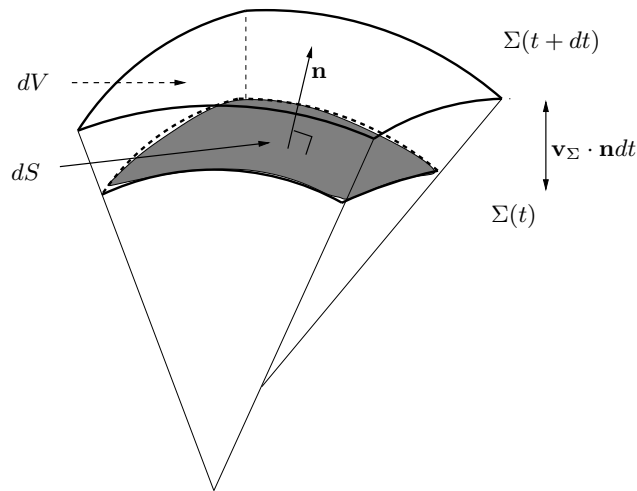


FIG. B.1 – Volume dV

Preuve : Considérons le volume de la bulle à t et $t+dt$ (voir Figure B.1), et calculons $V(t+dt) - V(t)$. Soient dV un volume élémentaire de $\mathcal{V}(t+dt) \setminus \mathcal{V}(t)$, et dS une surface élémentaire de $\Sigma(t)$. Alors :

$$dV = dS v_\Sigma \cdot \mathbf{n} dt \quad (\text{B.2})$$

il s'en suit, en sommant tous les éléments dV que :

$$\frac{V(t + dt) - V(t)}{dt} = \int_{\Sigma(t)} v_{\Sigma} \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{B.3})$$

En faisant tendre dt vers zéro nous obtenons le résultat annoncé (B.1).

Bibliographie

- [1] J.F. Agassant, P. Avenas, J.P. Sergent, B. Vergnes, and M. Vincent. *La mise en forme des matières plastiques*. Lavoisier TEC DOC, 1996.
- [2] F.J. Almgren and J.E. Taylor. The Geometry of Soap Films and Soap Bubbles. *Scientific American*, 235 :82–93, 1976.
- [3] M. Amon and C.D. Denson. A Study of the Dynamics of Foam Growth : Analysis of the Growth of Closely Spaced Spherical Bubbles. *Polymer Engineering and Science*, 24(13) :1026–1034, 1984.
- [4] M. Amon and C.D. Denson. A Study of the Dynamics of Foam Growth : Simplified Analysis and Experimental Results for Bulk Density in Structural Foam Molding. *Polymer Engineering and Science*, 26(3) :255–267, 1986.
- [5] A. Arefmanesh and S.G. Advani. Nonisothermal Bubble Growth in Polymeric Foams. *Polymer Engineering and Science*, 35(3) :252–260, 1995.
- [6] A. Arefmanesh, S.G. Advani, and E.E. Michaelides. A Numerical Study of Bubble Growth During Low Pressure Structural Foam Molding Process. *Polymer Engineering and Science*, 30(20) :1330–1337, 1990.
- [7] D.N. Arnold, F. Brezzi, and M. Fortin. A stable finite element for the stokes equations. *Calcolo* 21, 1983.
- [8] N. Bakhvalov and G. Panasenko. *Homogenisation : Averaging Processes in Periodic Media*. Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [9] J. Baranger and K. Najib. Analyse numérique des écoulements quasi-newtoniens dont la viscosité obéit à la loi puissance ou la loi de Carreau. *Numerishe Matematik*, 1990.
- [10] J. Baranger and D. Sandri. Finite element approximation of viscoelastic fluid flow : Existence of approximate solutions and error bounds. I. Discontinuous constraints. *Numerishe Matematik*, 1992.
- [11] J. Baranger and D. Sandri. Quelques propriétés de la méthode de galerkin discontinue. Application aux fluides viscoélastiques. Technical report, Académie des Sciences, 1996.
- [12] S. Batkam. *Thermique multidomaine en simulation numérique du remplissage 3D*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2002.
- [13] S. Batkam, J. Bruchon, and T. Coupez. A space-time discontinuous galerkin method for convection and diffusion in injection moulding. *IJFP*, 2003 - Accepté pour publication.

-
- [14] E. Bigot. *Simulation tridimensionnelle du remplissage de corps mince par injection*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [15] E. Bigot and T. Coupez. Capture of 3D moving free surfaces and material interfaces by mesh deformation. In *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, 2000.
- [16] K. Brakke. The Surface Evolver. *Experimental Mathematics*, 1(2) :141–165, 1992.
- [17] K. Brakke. The Surface Evolver and the stability of liquid surfaces. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 354 :2143–2157, 1996.
- [18] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle. Théorie et applications*. Masson, 1983.
- [19] G.A. Campbell. Polyurethane Foam Process Development. A Systems Engineering Approach. *Journal of Applied Polymer Science*, 16 :1387–1402, 1972.
- [20] F. Chinesta, G. Chaidron, M. Godet, and A. Bermudez. Evaluation d’un modèle numérique simplifié de l’expansion des mousses. *Les Cahiers de Rhéologie*, 17(1) :403–411, 2000.
- [21] T. Coupez. Stable-stabilized finite element for 3D forming calculation. Technical report, CEMEF, Sophia Antipolis, 1996.
- [22] T. Coupez and E. Bigot. 3D Anisotropic mesh generation and adaptation with applications. In *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, 2000.
- [23] T. Coupez and S. Marie. From a direct solver to a parallel iterative solver in 3D forming simulation. *International Journal of Supercomputer and Application*, 11 :205–211, 1997.
- [24] S.J. Cox, D. Weaire, and M. Fátima Vaz. The transition from two-dimensional to three-dimensional foam structures. *Eur. Phys. J. E*, 7 :311–315, 2002.
- [25] R. Dautray and J-L Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique. Tome 4, Méthodes variationnelles*. Masson, 1988.
- [26] G. Duvaut. *Mécanique des milieux continus*. Masson, 1990.
- [27] Brezzi F. On the existence, uniqueness and approximation of saddle point problems arising from lagrangian multipliers. *RAIRO Modélisation Mathématique Analyse Numérique*, 8 :129–151, 1974.
- [28] R. Fulchiron. Comportement des matériaux sous pression. In *Ecole Thématique CNRS - Injection des Polymères. Approche thermomécanique, structure et propriétés*, 2002.
- [29] V. Girault and P.A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer-Verlag, 1986.
- [30] F. Graner. La mousse. *La Recherche*, 345 :46–49, 2001.
- [31] C.D Han. *Multiphase Flow in Polymer Processing*. Academic Press, 1981.
- [32] J.H. Han and C.D. Han. Bubble Nucleation in Polymeric Liquids. i. bubble Nucleation in Concentrated Polymer Solutions. *Journal of Polymer Science : Part B : Polymer Physics*, 28 :711–741, 1990.
-

- [33] J.H. Han and C.D. Han. Bubble Nucleation in Polymeric Liquids. ii. theoretical Considerations. *Journal of Polymer Science : Part B : Polymer Physics*, 28 :743–761, 1990.
- [34] T.J.R. Hughes and G.M. Hulbert. Space-time finite element methods for elastodynamics : formulations and error estimates. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 66 :339–363, 1988.
- [35] S. Hutzler, D. Weaire, and F. Bolton. The effects of Plateau borders in the two-dimensional soap froth. iii. further results. *Philosophical Magazine B.*, 71 :277–289, 1995.
- [36] S. Hutzler, D. Weaire, and F. Bolton. Model simulations of two-dimensional liquid and solid foams. In *18th IMACS world congress scientific computation modelling applied mathematics*, volume 3, pages 277–282, 1997.
- [37] C. Isenberg. *The science of films and soap bubbles*. Dover publications, 1992.
- [38] K. Joshi, J.G. Lee, M.A. Shafi, and R.W. Flumerfelt. Prediction of cellular structure in free expansion of viscoelastic media. *Appl. Polym. Sci.*, 67 :1353–1368, 1998.
- [39] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679, 2003.
- [40] O. Karakashian and C. Makridakis. A space-time finite element method for the nonlinear Schrödinger equation : the discontinuous Galerkin method. *Mathematics of computation*, 67(222) :479–499, 1998.
- [41] R. Keunings and L. Lefebvre. Simulation of chemically-reacting processing flows. In *European Regional Meeting of the Polymer Processing Society*, 1992.
- [42] A.M. Kraynik. Foam Flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1988.
- [43] L. Lefebvre. *Simulation numérique de l'expansion des mousses de polyuréthane*. PhD thesis, Université Catholique de Louvain - Faculté des Sciences Appliquées, 1993.
- [44] L. Lefebvre and R. Keunings. Numerical simulation of chemically-reacting polymer flows. *Computational Fluid Dynamics*, 2, 1992.
- [45] P. Lesaint and P.A. Raviart. On a Finite Element method for solving the neutron transport equation. *C. Boor, ed., Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations (Academic Press, New-York)*, 1974.
- [46] A. Üngör and A. Sheffer. Tent-pitcher : a meshing algorithm for space-time discontinuous Galerkin methods. *International Journal of Foundations of Computer Science*, 13(2) :201–221, 2002.
- [47] D. Niyogi, R. Kumar, and K.S. Gandhi. Modeling of Bubble-Size Distribution in Free Rise Polyurethane Foams. *AIChE Journal*, 1992.
- [48] E. Onate and M. Manzan. A general procedure for deriving stabilized space-time finite element methods for advective-diffusive problems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 31 :203–221, 1999.

-
- [49] R. Phelan, D. Weaire, and K. Brakke. Computation of Equilibrium Foam Structures Using the Surface Evolver. *Experimental Mathematics*, 4(3) :181–192, 1995.
- [50] E. Pichelin. *Calcul par éléments finis du remplissage 3D pour des fluides visqueux incompressibles. Application à l'injection*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1998.
- [51] E. Pichelin and T. Coupez. Finite element solution of the 3D mold filling problem for viscous incompressible fluid. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 1997.
- [52] E. Pichelin and T. Coupez. A Taylor discontinuous Galerkin method for the thermal solution in 3D mold filling. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 1998.
- [53] I. Prigogine and D. Kondepudi. *Thermodynamique. Des moteurs thermiques aux structures dissipatives*. Editions Odile Jacob, 1999.
- [54] N.S. Ramesh, D.H. Rasmussen, and G.A. Campbell. Numerical and experimental studies of bubble growth during the microcellular foaming process. *Polymer Engineering and Science*, 31(23) :1657–1664, 1991.
- [55] P.A. Raviart and J.M. Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Dunod, 1998.
- [56] M. Schatzman. *Analyse numérique. Cours et exercices pour la licence*. InterEditions, 1991.
- [57] M.A. Shafi, K. Joshi, and R.W. Flumerfelt. Bubble size distributions in freely expanded polymer foams. *Chemical Engineering Science*, 52(4) :635–644, 1997.
- [58] M.A. Shafi, J.G. Lee, and R.W. Flumerfelt. Prediction of cellular structure in free expansion polymer foam processing. *Polymer Engineering and Science*, 36(14) :1950–1960, 1996.
- [59] F.A. Shutov. Foamed Polymers. Cellular Structure and Properties. *Adv. in Polym. Sci.*, 1983.
- [60] L. Silva and T. Coupez. A unified model of the filling and post-filling stages in 3D injection moulding simulation. In *Polymer Processing Society - 18*, 2002.
- [61] T.E. Tezduyar, M. Behr, and J. Liou. A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces - the deforming-spatial-domain / space-time procedure : I. The concept and preliminary numerical tests. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 94 :339–351, 1992.
- [62] P. Thibaux. *Comportement mécanique d'un acier C-Mn microallié lors du laminage intercritique*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [63] L.L. Thompson and P.M. Pinsky. A space-time finite element method for the exterior acoustics problem. *J. Acoust. Soc. Am.*, 99(6) :3297–3311, 1996.
- [64] D.C. Venerus, N. Yala, and B. Bernstein. Analysis of diffusion-induced bubble growth in viscoelastic liquids. *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.*, 75 :55–75, 1998.
-

- [65] S. Vincent and J-P Caltagirone. Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. *International Journal for numerical methods in fluids*, 30 :795–811, 1998.
- [66] S.F. Wang and A.A. Ogale. Structural foam modeling : modeling of bubble-growth resulting from chemical blowing agent. *POLYM.-PLAST. TECHNOL. ENG.*, 1990.
- [67] D. Weaire, S.J. Cox, and F. Graner. Uniqueness, stability and Hessian eigenvalues for two-dimensional bubble clusters. *Eur. Phys. J. E*, 7 :123–127, 2002.
- [68] D. Weaire and S. Hutzler. *The Physics of Foams*. Oxford, 1999.
- [69] D. Weaire and R. Phelan. A counter-exemple to Kelvin’s conjecture on minimal surfaces. *Philosophical Magazine Letters*, 2 :107–110, 1994.

Résumé : Ce travail est consacré au développement d'un outil numérique simulant l'expansion d'une mousse polymère. Un volume de mousse est décrit par un ensemble de bulles de gaz évoluant dans une matrice polymère. Son expansion est provoquée par la surpression du gaz. Un système d'équations décrivant les champs de vitesse et de pression est établi dans le liquide et dans le gaz. Le calcul de la pression du gaz, homogène dans chaque bulle, nécessite de connaître individuellement l'emplacement de chaque bulle : notre approche est multidomaine. Dans un contexte eulérien, chaque domaine est suivi par sa fonction caractéristique, laquelle est solution d'une équation de transport. Cette équation, purement convective, est résolue par une méthode éléments finis espace-temps Galerkin discontinu. Cette méthode est implicite : sa stabilité ne dépend pas du pas de temps. Une technique de r-adaptation de maillage diminue la diffusion liée à la discrétisation, et améliore la description des interfaces. Enfin, le domaine de calcul croît avec les bulles. Cette expansion globale préserve la géométrie du domaine, ainsi que la quantité de liquide contenue dans ce domaine. Cette méthodologie permet de simuler la formation d'une structure cellulaire : le taux de gaz passe de quelques pourcent à 80%, le liquide est piégé entre les bulles, et les cellules adoptent des formes polyédriques. L'approche locale développée est appliquée pour établir l'évolution de la viscosité et de la vitesse d'expansion d'un échantillon de mousse en fonction de sa structure. Un passage micro-macro permet d'utiliser ces lois pour simuler l'expansion macroscopique d'une mousse.

Mots-clés : Couplage liquide - gaz ; expansion de bulles ; expansion de mousse ; méthode Galerkin discontinu ; méthode espace-temps ; couplage micro-macro.

Abstract : In this contribution, a numerical tool is developed in order to simulate the inflation of a polymer foam. A sample of foam is considered as a set of gas bubbles growing in a polymer matrix. This growth is due to a difference of pressure. A velocity - pressure formulation is established over the liquid and the gaseous parts. The computation of the gas pressure, uniform in each bubble, requires to follow individually each bubble : our approach is multidomain. In an eulerian framework, each domain is represented by its characteristic function, which is solution of a transport equation. A space-time discontinuous Galerkin method has been developed to solve this kind of purely convective equations. The stability of this implicit method does not depend on the time step. Furthermore, the interface location is improved by a r-adaptation technique. Finally, in order to preserve the amount of liquid along the expansion, a global expansion motion is introduced : the computation volume grows with the foam. Using this methodology, the formation of a foam structure can be simulated : bubbles, occupying initially few percents of the whole volume, grow to occupy, finally, more than 80% of this volume. The liquid is then trapped between bubbles, creating polyhedric cells. This local approach is used to determinate evolution laws of the viscosity and growth rate of a foam sample, with respect to its structure. Using a micro-macro transition, these laws are employed to simulate the macroscopic expansion of a polymer foam.

Keywords : liquid - gaz coupling ; bubble growth ; foam expansion ; discontinuous Galerkin method ; space-time method ; micro-macro transition.