



HAL
open science

Prise en compte d'effets de mouillage dans la simulation d'écoulements dans des milieux fibreux.

Loïc Chevalier, Julien Bruchon, Pierre-Jacques Liotier, Sylvain Drapier

► To cite this version:

Loïc Chevalier, Julien Bruchon, Pierre-Jacques Liotier, Sylvain Drapier. Prise en compte d'effets de mouillage dans la simulation d'écoulements dans des milieux fibreux.. Journées Nationales sur les Composites 2017, École des Ponts ParisTech (ENPC), Jun 2017, 77455 Champs-sur-Marne, France. hal-01623671

HAL Id: hal-01623671

<https://hal.science/hal-01623671v1>

Submitted on 25 Oct 2017

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.

Prise en compte d'effets de mouillage dans la simulation d'écoulements dans des milieux fibreux

Numerical simulation of flows in fibrous media taking into account wetting effects

L. Chevalier¹, J. Bruchon¹, P.-J. Liotier¹ et S. Drapier¹

¹ : Chaire Hexcel - Mines Saint-Étienne
Centre SMS & LGF UMR CNRS 5307 Mines Saint-Étienne - Université de Lyon
158, Cours Fauriel, CS 62362 F-42023 Saint-Étienne cedex 2
e-mail : loic.chevalier@emse.fr, bruchon@emse.fr, liotier@emse.fr, drapier@emse.fr

Résumé

Dans le contexte de la simulation de l'élaboration de composites structuraux par des procédés de type infusion, ce travail propose une stratégie numérique pour la prise en compte des tensions de surface dans les équations de Stokes afin de traiter les effets capillaires. Le problème fluide est résolu par la méthode des éléments finis, stabilisée par une méthode sous-grille. La tension de surface sera considérée comme une condition de Neumann puis comme une force motrice imposée sur un front de fluide décrit par une approche *level-set*. Une réécriture mathématique de cette force évitera d'imposer fortement l'angle de contact, permettant de considérer directement l'équation des forces sur la ligne triple.

Abstract

Numerical simulation is a crucial asset for high performance composite manufacturing. This study will focus on the capillary effects investigated at the fibre scale. The two fluids (air-resin) Stokes problem is solved using a finite element method. The fluid problem is solved with linear approximations for both velocity and pressure. Though this approximation does not satisfy the Ladyzenskaia-Babushka-Brezzi, hence an *Algebraic SubGrid Scale* method [7] is used to ensure the existence and uniqueness of the solution. Furthermore, the front of resin is followed by a *level-set* function [9] which is convected by the flow velocity at each increment of the staggered couple approach. The surface tension force is considered as a Neumann condition on this *level-set* and does not required to imposed the contact angle as an input.

Mots Clés : Tensions de surface, procédé par infusion (LRI), Stokes, discontinuités

Keywords : Surface tensions, Liquid Resin Infusion (LRI), Stokes, weak and strong discontinuities

1. Introduction

Les travaux présentés s'inscrivent dans le cadre d'une chaire industrielle entre Mines Saint-Étienne et l'entreprise Hexcel pour la modélisation des procédés de fabrication par infusion LRI (Liquid Resin Infusion) de structures composites. La spécificité du travail, présenté ici, consiste à prendre en compte, à l'échelle des fibres, les effets capillaires dans la modélisation numérique du procédé. La modélisation a pour but de comprendre les mécanismes locaux qui régissent la création, coalescence, et transport de porosités lors de l'imprégnation.

2. Modélisation de l'écoulement de la résine

Afin de simuler l'écoulement local de la résine autour d'une fibre, deux problèmes doivent être résolus. Le premier est la description de l'écoulement du système résine/air ou résine/vide prenant en compte la phase solide et les effets capillaires. Le second est la capture et le transport du front de résine (interface résine/air) par une méthode de type *level-set*. La partie solide est décrite par une partie du bord du maillage (interface ψ) où s'appliqueront donc deux tensions de surface (Solide/Liquide et Solide/Gaz) alors que le front de fluide (φ) Liquide/Gaz sera décrit par une fonction *level-set* sur le maillage. Le problème est résolu sur le domaine Ω ayant pour frontière Γ . Les indices D, N et M

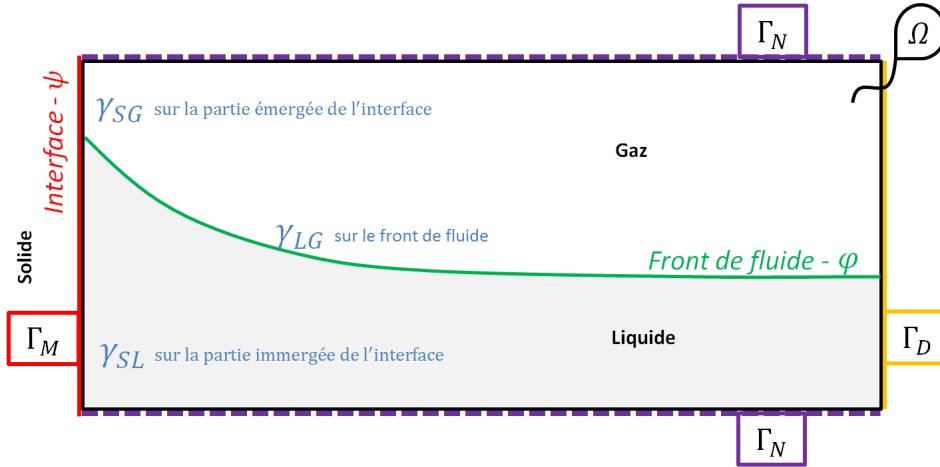


Fig. 1. Domaine de résolution

signifient Dirichlet, Neumann et condition Mixte. Ces trois parties ne s'intersectent pas et sont des partitions de la frontière du domaine Ω (voir Figure 1).

γ est la tension de surface variant en fonction des phases qu'elle sépare (Liquide/Gaz, Solide/Liquide ou Solide/Gaz). Les fluides sont supposés Newtoniens et incompressibles. Les effets d'inertie sont négligés et par conséquent l'équation de conservation de quantité de mouvement sera résolue sous la contrainte de conservation de la masse, donnant lieu au système de Stokes en vitesse et pression (\mathbf{v}, p) avec $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy évalué respectivement pour chacun des fluides, μ la viscosité et ρ la densité égales respectivement à celle de chaque fluide (gaz ou liquide) ainsi que g l'accélération de la pesanteur.

2.1. Conditions aux bords

Pour résoudre le problème bifluide (Figure 1) entre le temps initial t_0 et le temps final t_f , différentes conditions (de type Neumann *i.e* condition sur la contrainte normale $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ ou Dirichlet *i.e* condition sur la vitesse) seront imposées sur le contour du domaine, noté ici Γ .

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} && \text{sur } \Gamma_D \times (t_0, t_f) \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= -p_{\text{ext}} \mathbf{n} && \text{sur } \Gamma_N \times (t_0, t_f) \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0, \mathbf{S}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = r_1, \mathbf{S}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = r_2 &&& \text{sur } \Gamma_M \times (t_0, t_f) \end{aligned} \quad (\text{Eq. 1})$$

où les vecteurs \mathbf{S}_1 et \mathbf{S}_2 (en trois dimensions) engendrent l'espace tangent à Γ_M et \mathbf{n} est la normale extérieure au domaine.

De plus, dû à la présence de trois phases, l'équation de Laplace doit être vérifiée sur chaque interface pour décrire le saut de contrainte

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}|_{\text{interface } (\psi) + \text{front de fluide } (\varphi)} = \gamma C \mathbf{n} \quad (\text{Eq. 2})$$

avec C la courbure et γ la tension de surface entre deux des phases. γ est une notation générique et se déclinera dans la suite en fonction du couple considérée (Liquide/Gaz, Solide/Gaz et Solide/Liquide). La ligne à l'intersection entre les différentes phases, liquide, gaz et solide est appelée ligne triple (ou point triple en deux dimensions). La condition d'équilibre des forces le long de la ligne triple s'écrit

$$\gamma_{LG} \mathbf{t}_1 + \gamma_{SG} \mathbf{t}_2 + \gamma_{SL} \mathbf{t}_3 = 0 \quad (\text{Eq. 3})$$

où les γ_{ij} représentent les différentes tensions de surface (voir Figure 2). Cette équation doit être vérifiée au point triple.

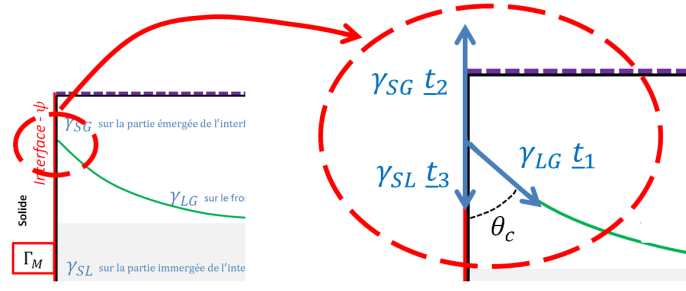


Fig. 2. Équilibre des forces au point triple où θ_c représente l'angle de contact.

2.2. Formulation faible

Pour résoudre le problème par éléments finis, la formulation faible mixte est écrite en vitesse/pression. Les espaces de résolution sont classiquement les espaces de Lebesgue des fonctions de carré intégrables $\mathcal{L}^2(\Omega)$ et l'espace de Sobolev $\mathcal{H}^1(\Omega)^d = \{\mathbf{v} \in \mathcal{L}^2(\Omega)^d \mid \nabla \mathbf{v} \in \mathcal{L}^2(\Omega)^{d \times d}\}$ avec d la dimension du domaine. Le problème à résoudre s'écrit : trouver $\mathbf{v} \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)^d = \{\mathbf{w} \in \mathcal{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{w} = 0 \text{ sur } \Gamma_D \text{ et } \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_M\}$ et $p \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ telles que

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} \, dV + \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{w} \, dV - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV \\ = & \int_{\Gamma_M} (r_1 \mathbf{S}_1 + r_2 \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{w} \, dS + \int_{\Gamma_N} -p_{ext} \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} \, dS + \int_{\Gamma_{\psi+\varphi}} \gamma C \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} \, dS + \int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{w} \, dV \end{aligned} \quad (\text{Eq. 4})$$

pour tout $\mathbf{w} \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)^d$ et $q \in \mathcal{L}^2(\Omega)$.

Les tensions de surface sur les interfaces (Solide/Gaz et Solide/Liquide) sont appliquées sur le bord du maillage. Cependant, le front de fluide, doit être représenté explicitement pour pouvoir y appliquer la force de tension de surface. Cela est obtenu par l'utilisation d'une fonction *level-set* et la méthode SLR (Surface Local Reconstruction) consistant à approcher le front de fluide par une surface linéaire par morceaux. Le choix d'utiliser une méthode d'intégration exacte, au lieu d'une méthode de transformation de l'intégrale surfacique en une intégrale volumique (méthode CSF) est motivé par les travaux de D. Pino-Minoz *et al.* [10].

Enfin, l'équation de Stokes sera résolue par éléments finis en utilisant des approximations linéaires en vitesse et pression au sein de l'élément. Ces éléments ne vérifiant pas la condition de stabilité de Ladyzenskaia-Babushka-Brezzi, une stabilisation *Algebraic SubGrid Scale* décrite par R. Codina *et al.* [7] sera utilisée. L'idée directrice de la stabilisation est de décomposer la vitesse et la pression comme la somme d'une solution aux échelles éléments finis et sous-grille. La solution sous-grille doit alors être modélisée. Par choix, la vitesse à l'échelle sous-grille s'écrit proportionnellement au résidu éléments finis de l'équation de conservation de mouvement et le terme de pression sous-grille est pris proportionnel au résidu éléments finis de l'équation de conservation de la masse.

2.3. Calcul du terme de tension de surface

Écrire la tension de surface en fonction de la courbure génère le problème numérique du calcul de cette dernière. En effet, la courbure est la divergence du gradient de la fonction *level-set*, et son calcul nécessite donc une approximation au minimum quadratique de la fonction *level-set*. Une intégration par partie supplémentaire permet de retrouver la formulation donnée par G.C. Buscaglia *et al.* [6] se lisant

$$\sum_i \int_{\Gamma_i} \gamma_i C \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} \, dS = \int_{\partial \Gamma_{\text{ligne triple}}} (\gamma_{LG} \mathbf{t}_1 + \gamma_{SG} \mathbf{t}_2 + \gamma_{SL} \mathbf{t}_3) \cdot \mathbf{w} \, dl - \sum_i \int_{\Gamma_i} \gamma_i (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) : \nabla \mathbf{w} \, dS \quad (\text{Eq. 5})$$

où la \sum_i décrit la somme sur les différentes interfaces (entre Liquide/Gaz, Solide/Gaz et Solide/Liquide). L'intégrale linéique représente la condition d'équilibre du point triple. Cette intégrale sera choisie nulle pour imposer faiblement l'équilibre mécanique au point triple.

Enfin l'équation (Eq. 4) sera résolue au temps $n + 1$ sur la configuration calculée à t_n . Afin d'éviter les limitations sur le pas de temps dues à cette approche explicite, une approche semi-implicite décrite par G.C. Buscaglia *et al.* [6], reprenant les travaux de E. Bänsch [3] et G. Dziuk *et al.* [8] sur l'opérateur de Laplace-Beltrami, sera utilisée. La modification est donnée par l'équation

$$\int_{\Gamma_i^{n+1}} \gamma_i (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})^{n+1} : \nabla \mathbf{w} \, ds \approx \int_{\Gamma_i^n} \gamma_i (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})^n : \nabla \mathbf{w} \, ds + \Delta t \int_{\Gamma_i^n} \gamma_i (\nabla \mathbf{v}^{n+1} (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})^n) : \nabla \mathbf{w} \, dS$$

où les indices n et $n + 1$ représentent les temps auxquels les quantités sont évaluées et Δt le pas de temps.

2.4. Sauts de pression et du gradient de pression

La physique sous-jacente que l'on cherche à capturer comporte des sauts de pression et de gradient de pression. Le saut de contrainte au front de fluide s'écrit

$$\left[- (p_2 - p_1) \mathbf{I} + 2(\mu_2 - \mu_1) \dot{\epsilon}(\mathbf{v}) \right] \mathbf{n} = \gamma_{LG} \mathbf{C} \mathbf{n} \quad (\text{Eq. 6})$$

la vitesse au front étant continue et $\dot{\epsilon}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v})$. Par conséquent, un saut de pression peut avoir deux sources : une tension de surface (lorsque la courbure est non nulle) ou un saut de viscosité (en présence de cisaillement).

Une autre spécificité d'un écoulement bifluide est le saut de gradient de pression. En effet, le saut de masse volumique au front de fluide entraîne une discontinuité du gradient de pression. Par exemple, à l'équilibre et sous l'effet de la gravité, la pression dans les deux fluides est égale à $\rho g z$, avec pour gradient ρg , d'où la discontinuité lors du changement de masse volumique.

Connaissant la physique à capturer, *i.e.* sauts de pression et de son gradient, il apparaît que l'approximation linéaire en pression classique ne sera pas suffisante pour capter ces spécificités. La formulation présente conduit à l'apparition de courants parasites venant interférer avec la solution numérique. Afin de les limiter, la méthode d'enrichissement de la pression proposée par R.F. Ausas *et al.* [2] est utilisée. Elle consiste à enrichir le champ de pression en ajoutant deux degrés de liberté, associés à des fonctions de forme discontinues, qui seront re-condensés dans l'élément. Uniquement les éléments coupés par le front liquide/gaz auront un espace de pression enrichi.

3. Applications

3.1. Montée capillaire contre une paroi

Pour vérifier le modèle, le premier cas test est une montée capillaire contre une paroi constituée de cellulose. Le liquide est du diiodométhane et le gaz est de l'air. Le choix des matériaux est motivé par la connaissance de valeurs expérimentales issues de la même équipe [12] et d'un cas avec une mouillabilité moyenne, l'angle de contact étant compris entre 0 et 90°. Ce cas test présente l'avantage de posséder une solution analytique connue.

$$x - x_0 = \kappa^{-1} \cosh \left(\frac{2\kappa^{-1}}{y} \right) - 2\kappa^{-1} \left(1 - \frac{y^2}{4\kappa^{-2}} \right)^{1/2} \quad (\text{Eq. 7})$$

où x_0 est la distance telle que l'équation donne $z = h = \sqrt{2}\kappa^{-1}(1 - \sin\theta_c)^{1/2}$, la hauteur, à la position $x = 0$ (*i.e.* contre le mur), avec θ_c l'angle de contact (voir Figure 3). La longueur capillaire κ^{-1} se

calculé par la formule $\kappa^{-1} = \sqrt{\gamma/\rho g}$.

Initialement, le front entre le liquide et le gaz est une ligne horizontale à l'altitude $y = 0,5$ cm. Les données du modèle sont des données expérimentales antérieures de M.F. Pucci *et al.* [12].

Tab. 1. Valeurs d'entrée du modèle

	Solide/Gaz	Liquide/Gaz	Solide/Liquide
Tension de surface (N/m)	$54,7 \times 10^{-3}$	$50,8 \times 10^{-3}$	$25,9 \times 10^{-3}$

	Gaz	Liquide
Viscosité (Pa.s)	$1,71 \times 10^{-5}$	$2,76 \times 10^{-3}$
Densité (kg/m^3)	1,292	$3,325 \times 10^3$

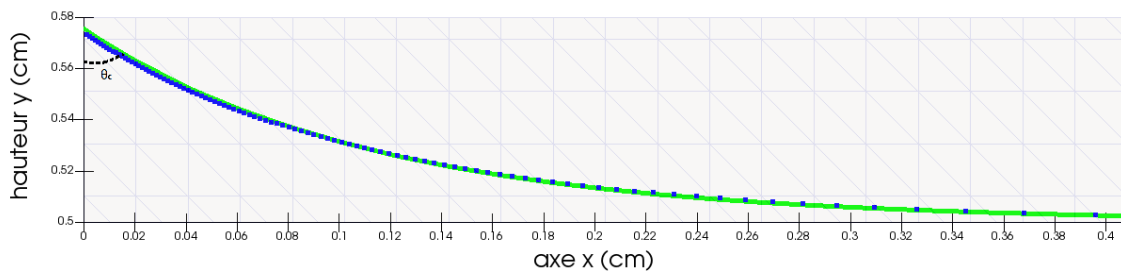


Fig. 3. Ménisque contre une paroi (à gauche), comparaison entre la solution éléments finis (verte) et la solution analytique (bleue).

Comme le montre la Figure 3, il y a une bonne concordance entre le ménisque calculé et le ménisque théorique. Par ailleurs l'angle de contact n'est pas directement imposé dans la formulation présentée, mais pris en compte uniquement via les valeurs des tensions surfaciques. Il est important de constater que l'équilibre de Young donne un angle de contact théorique de $55,4^\circ$ et que le ménisque calculé forme un angle de contact de $56,3^\circ$. Il est aussi essentiel de noter que ce résultat est obtenu sur un maillage qui n'est pas particulièrement raffiné (taille de maille $\approx 0,02$ cm) et que la forme du ménisque converge vers la forme analytique lorsque le maillage est raffiné.

Le Tableau 2 montre la convergence de la forme du ménisque lors du raffinement du maillage (le maillage $i + 1$ est raffiné deux fois dans chaque direction par rapport au maillage i). L'erreur est calculée avec la formule $\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N |x_i^{\text{théorique}} - x_i^{\text{calculé}}|$ où N représente le nombre de points discrétisés sur l'intervalle $[0; 0,4]$.

Tab. 2. Convergence du ménisque avec raffinement du maillage

	Maillage1	Maillage2	Maillage3
Erreur (cm)	$4,1 \times 10^{-3}$	$3,8 \times 10^{-4}$	$7,6 \times 10^{-5}$

3.2. Montée capillaire entre deux parois

Le deuxième cas test est une montée capillaire entre deux parois constituées de cellulose, suffisamment rapprochées (distance < longueur capillaire) pour permettre au fluide de monter par effet capillaire. Le liquide est du diiodométhane et le gaz est de l'air. La forme du ménisque n'étant pas connue analytiquement, le résultat numérique à l'équilibre sera comparé au résultat d'une autre méthode

numérique (voir Figure 4) : une méthode de point fixe pour résoudre l'équilibre statique des forces. Connaissant la forme du ménisque, il est alors possible de remonter aux champs de pression et vitesse dans le domaine.

3.2.1. Point fixe - Équilibre des forces

L'équation d'équilibre du ménisque s'écrit

$$-\gamma \frac{f''(x)}{(1 + f'(x)^2)^{3/2}} + \rho g f(x) = 0. \quad (\text{Eq. 8})$$

avec $y = f(x)$ la fonction décrivant le ménisque. Une approche itérative est choisie pour résoudre l'équation (Eq. 8) en évaluant à chaque itération le dénominateur de la fraction à l'itération précédente. L'équation est ainsi linéarisée et peut-être résolue par différences finies. Une condition sur la dérivée de la fonction f est utilisée $f'(0) = -1/\tan\theta_c$ et $f'(0.1) = 1/\tan\theta_c$ avec θ_c l'angle de contact théorique de 55.4° qui ici est une donnée.

3.3. Comparaison des résultats

La Figure 4 montre une bonne corrélation entre les valeurs issues du calcul par éléments finis en dynamique et l'approche du problème statique en différences finies. En effet, l'angle de contact vaut $56,6^\circ$ avec la méthode éléments finis. Le maillage utilisé en éléments finis est raffiné, 0.002 cm dans la direction x et 0.005 cm dans la direction y , par rapport au cas test précédent, 0.02 cm .

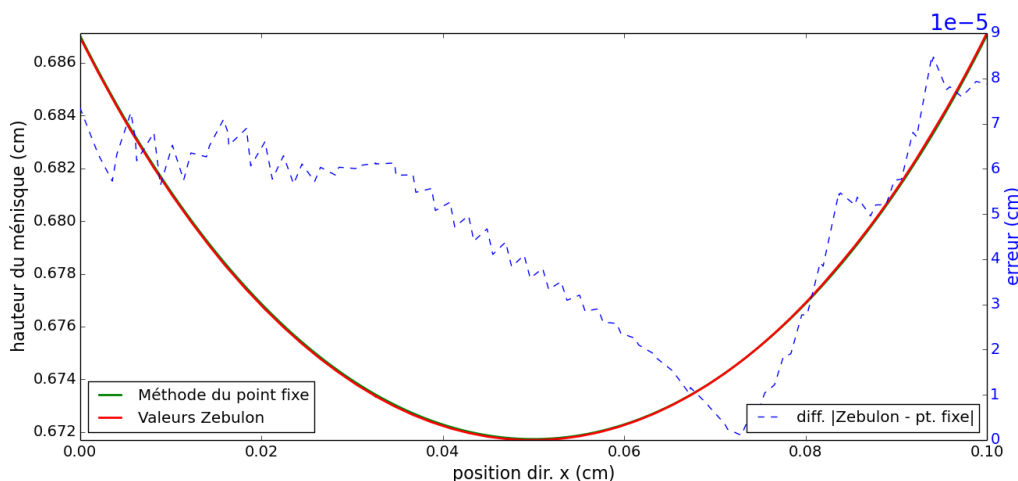


Fig. 4. Comparaison de la forme du ménisque entre deux parois obtenue avec les différentes méthodes numériques.

4. Perspectives

Dans ce papier, une méthode permettant de prendre en compte les tensions de surface a été exposée. La force de cette formulation est qu'elle ne nécessite pas le calcul de la courbure et permet ainsi de traiter les fibres non cylindriques comme c'est le cas pour les fibres naturelles. Les travaux actuels portent sur la modélisation d'une montée capillaire dans un Volume Élémentaire Représentatif (VER) d'un arrangement de fibres en deux dimensions. La hauteur d'équilibre permet alors de déduire une pression capillaire équivalente dans un milieu homogène tout en comparant à des valeurs identifiées expérimentalement à cette échelle [11]. Cette pression capillaire pourra ensuite être intégrée dans des simulations numériques à l'échelle de la pièce. Les écoulements dans des VER donneront aussi accès à des perméabilités numériques. Des formules de perméabilité existent pour des arrangements simples de fibres. Avec un modèle numérique robuste, il pourra être possible de calculer des perméabilités dans divers microstructures pouvant être vérifiées expérimentalement. Dans la continuité de la partie

numérique, un choix pourra être fait entre inclure dans le modèle de Darcy des pressions capillaires ou alors augmenter la perméabilité pour rendre compte des forces capillaires.

Références

- [1] K. Andriamananjara, N. Moulin, J. Bruchon, S. Drapier *Comparaison des modèles de Darcy et de Brinkman pour la prise en compte des effets capillaires locaux dans la simulation des écoulements macroscopiques en milieux poreux*, Actes du 13^{ème} Colloque National en Calcul des Structures, O. Allix, P. Le Tallec, et L. Rota, actes électroniques, 2017, sciencesconf.org :csma2017 :124273.
- [2] R.F. Ausas, G.C. Buscaglia *A new enrichment space for the treatment of discontinuous pressures in multi-fluid flows*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 70 :829-850, 2011.
- [3] E. Bänsch *Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface*, Numerische Mathematik, 88(2) :203-235, 2001.
- [4] J. Besson, R. Foerch *Large scale object-oriented finite element code design*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 142(1-2) :165–187, 1997.
- [5] M. Blais, N. Moulin, P.-J. Liotier, and S. Drapier *Resin infusion-based processes simulation : coupled Stokes-Darcy flows in orthotropic preforms undergoing finite strain*, International Journal of Material Forming, 10(1) :43-54, 2015.
- [6] G.C. Buscaglia, R.F. Ausas *Variational formulations for surface tension, capillarity and wetting*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 200(45-46) :3011-3025, 2011.
- [7] R. Codina *A stabilized finite element method for generalized stationary incompressible flows*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 190(20-21) :2681-2706, 2001.
- [8] G. Dziuk, C. Elliott *Finite elements on evolving surfaces*, IMA Journal of Numerical Analysis, 27(2) :262-292, 2006.
- [9] S. Osher et J.A. Sethian *Fronts propagating with curvature-dependant speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*, Journal of Computational Physics, 79(1) :12-49, 1988.
- [10] D. Pino-Munoz, J. Bruchon, S. Drapier, F. Valdivieso *Sintering at particle scale : an Eulerian computing framework to deal with strong topological and material discontinuities*, Archives of Computational Methods in Engineering, 21 :141-187, 2014.
- [11] M.F. Pucci, P.-J. Liotier, S. Drapier *Capillary wicking in a fibrous reinforcement - Orthotropic issues to determine the capillary pressure components*, Composites Part A : Applied Science and Manufacturing, 77 :133-141, 2015.
- [12] M.F. Pucci, P.-J. Liotier, S. Drapier *Tensiometric method to reliably assess wetting properties of single fibers with resins : validation on cellulosic reinforcements for composites*, Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects, 512(1) :26-33.