

# Simulations numériques d'écoulements de fluides complexes à l'échelle microscopique : un nouvel outil de rhéologie

Grégory Beaume, Patrice Laure, Thierry Coupez

► **To cite this version:**

Grégory Beaume, Patrice Laure, Thierry Coupez. Simulations numériques d'écoulements de fluides complexes à l'échelle microscopique : un nouvel outil de rhéologie. 40ème colloque annuel du Groupe Français de Rhéologie, Oct 2005, Nice, France. 4 p. hal-00578626

**HAL Id: hal-00578626**

**<https://hal-mines-paristech.archives-ouvertes.fr/hal-00578626>**

Submitted on 21 Mar 2011

**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.

# Simulations numériques d'écoulements de fluides complexes à l'échelle microscopique : un nouvel outil de rhéologie

G. Beaume<sup>1,2</sup>, P. Laure<sup>3</sup> et T. Coupez<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Schneider Electric-Technocentre, 38 TEC Grenoble*

<sup>2</sup> *CEMEF, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, UMR CNRS 7635, 06904, Sophia Antipolis*

<sup>3</sup> *Institut Non-Linéaire de Nice-UMR 6618 CNRS- Université de Nice Sophia Antipolis, 06560 Valbonne*

**Résumé** : Une méthode de simulation numérique directe a été développée pour l'écoulement de fluides fortement chargés, avec plusieurs populations de particules (fibres et sphères), pouvant entrer en collision. Ce fluide complexe modélise les écoulements de BMC (Bulk Molding Compound) utilisés par Schneider Electric. Une approche par domaines fictifs, avec des conditions limites périodiques, a été utilisée.

**Mots-clé** : Rhéologie, BMC, Fluides chargés, Fibres, Simulation numérique directe, Domaines fictifs, Eléments finis

## 1. Introduction

### 1.1 Objectif

L'étude présentée dans cet article porte sur la modélisation et la simulation d'écoulements de fluides complexes. L'objectif est de développer un outil de simulation pour l'écoulement d'un fluide modèle, représentatif d'une catégorie de matériaux utilisés par Schneider Electric pour la fabrication de pièces moulées par le procédé d'injection. Les matériaux considérés sont les BMC (Bulk Molding Compound). Ce sont des résines thermodurcissables contenant divers types de charges, en grande concentration : de l'alumine, des charges minérales, des nodules thermoplastiques, des fibres de renforts ... Les BMC sont ici modélisés par une matrice fluide newtonienne, fortement chargée de plusieurs populations de particules : des particules longitudinales (fibres) et des sphères de diverses tailles (les autres charges).

### 1.2 Simulation Numérique Directe : principe et intérêt

Il existe dans la littérature de nombreux modèles de comportement macroscopiques pour les fluides newtoniens chargés de fibres et/ou de particules sphériques, mais uniquement pour des concentrations faibles ou modérées (un récapitulatif de ces modèles est proposé dans [1]). Ces modèles sont construits par homogénéisation : les différentes grandeurs (définies à l'échelle microscopique) sont moyennées sur un volume élémentaire représentatif (macroscopique) ou sur toutes les orientations possibles (description macroscopique de l'orientation). Aucun de ces modèles ne parvient à représenter le comportement de fluides fortement chargés. En effet, ils ne prennent pas en compte les

interactions à courte portée (hydrodynamiques ou de contact) existant entre les particules. Une première alternative à cette difficulté théorique consiste à construire des modèles de comportement approximatifs (fluide à seuil, loi puissance,...) à partir d'observations expérimentales. Cette approche est aussi limitée avec les BMC, dont la rhéologie est particulièrement difficile (matériaux très pâteux, vieillissement de la résine...). Une seconde approche, retenue et présentée dans cet article, consiste à construire une loi de comportement à partir de simulations numériques directes : il s'agit ici de simuler directement l'écoulement du fluide et des particules qu'il contient à l'échelle microscopique [2]. On peut ensuite moyenniser les différentes grandeurs qui nous intéressent (viscosité effective, tenseur d'orientation des fibres,...) sur un volume élémentaire et obtenir une loi de comportement macroscopique : on parle alors d'homogénéisation numérique.

Dans cet article nous présentons la méthode numérique que nous avons développée pour la simulation numérique directe d'écoulements fortement chargés, avec plusieurs populations de particules, de formes différentes. Nous présentons ensuite les résultats préliminaires obtenus en 2D, avec des concentrations solides importantes (de 30 à 65 %) et une seule population de charges.

## 2. Positionnement du problème

On va résoudre l'écoulement considéré sur un domaine spatial  $\Omega$  de géométrie simple (généralement parallélépipédique), séparé en deux sous-domaines, désignant respectivement les domaines fluide  $\Omega_f$  et solide  $\Omega_s$ . Le domaine solide s'écrit comme la réunion des domaines

associées à chaque particule  $i$  présente dans le domaine total :

$$\Omega_s = \bigcup_{i=1}^n \Omega_s^i \quad (1)$$

Chaque sous-domaine est régi par des équations d'évolution qui lui sont propres.

## 2.1 Domaine fluide

Le fluide est supposé newtonien et incompressible. En injection, les forces d'inertie et de gravité sont négligées et le mouvement du fluide est correctement décrit par les équations de Stokes :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{u}} = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \vec{0} \quad (3)$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\eta_f \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\underline{\underline{u}}) \quad (4)$$

## 2.2 Domaine solide

Chaque particule est caractérisée par sa masse  $M_i$ , la position de son barycentre  $\vec{X}_i$  (et sa vitesse barycentrique  $U_i$ ) et, pour les particules non-sphériques (donc les fibres), par son vecteur orientation  $\vec{p}_i$  (et le vecteur rotation  $\vec{\omega}_i$ ). En négligeant les forces d'inertie et de gravité pour les particules, nous supposons que nous sommes en régime hydrodynamique, malgré les grandes concentrations en charges considérées : on parle alors de régime lubrificationnel. Les particules ne sont donc soumises, en théorie, qu'aux seules forces hydrodynamiques. Néanmoins, dans la littérature [3], d'autres auteurs ont constaté la formation d'amas de particules au cours de leurs simulations. Ces amas n'ont aucun sens physique; ils sont d'origine numérique : pour des pas de temps trop grands, les forces lubrificationnelles, fortement répulsives à très courte portées, sont sous-estimées lors du rapprochement de deux particules. Pour s'affranchir de ce phénomène, une méthode consiste à rajouter des forces correctives entre particules. Ainsi, les équations du mouvement pour la particule  $i$  sont les suivantes :

Pour une sphère :

$$M_i \frac{d^2 \vec{X}_i}{dt^2} = \vec{F}_h^i + \vec{F}_{cp}^i \approx \vec{0} \quad (5)$$

$F_h^i$  désigne la force hydrodynamique et  $F_{cp}^i$  la force corrective subie par la particule  $i$  du fait de sa proximité des particules voisines. Pour une fibre, deux équations supplémentaires sont nécessaires pour suivre l'évolution de l'orientation :

$$\begin{cases} \frac{d(J_i \vec{\omega}_i)}{dt} = \vec{\Gamma}_h^i + \vec{\Gamma}_{cp}^i \approx \vec{0} \\ \frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{\omega}_i \times \vec{p}_i \end{cases} \quad (6)$$

$\Gamma_h^i$  et  $\Gamma_{cp}^i$  désignent respectivement les couples associés aux forces hydrodynamiques et correctives.

## 2.3 Conditions limites

Sur la frontière  $\Gamma$  du domaine, les conditions limites choisies correspondent à un écoulement de Couette. On impose donc la vitesse du fluide aux parois horizontales de façon à avoir un taux de cisaillement moyen indépendant du temps dans le domaine :

$$\begin{cases} u_x = \dot{\gamma} y \\ u_y = 0 \end{cases} \quad (7)$$

On impose par ailleurs des conditions limites pseudo-périodiques dans la direction  $x$ . En réalité, la périodicité ne porte que sur l'évolution des particules : toute particule sortant d'un côté du domaine est réintroduite de l'autre côté avec la même vitesse. Le champ de vitesse sur les parois verticales est laissé libre (d'où le terme pseudo-périodicité). De manière générale, les conditions limites périodiques permettent de ramener un calcul sur un domaine spatial infini (donc sans effets de bord) à un domaine spatial plus petit. Ce type de conditions est parfaitement adapté pour l'homogénéisation numérique.

Enfin, les conditions limites aux interfaces fluide/particules traduisent le mouvement de corps rigide des charges. On a donc la relation suivante :

$$\underline{\underline{u}} = \vec{U}_i + \vec{\omega}_i \times (\vec{x} - \vec{X}_i) \quad \text{sur } \partial\Omega_s^i \quad (8)$$

## 3. Méthode numérique

On simule donc l'écoulement du fluide et des particules qu'il contient, sur le domaine et sur un intervalle de temps donné, qui sont discrétisés pour la résolution numérique. Le problème spatial à chaque pas de temps est résolu par éléments finis.

### 3.1 Méthode avec remaillage

La méthode intuitive pour ce type de problème consiste à découper la résolution à chaque pas de temps en deux étapes : le calcul du champ de vitesse sur  $\Omega_f$ , puis le déplacement des particules à partir du champ de vitesse fluide et des forces correctives à courte portée. La formulation variationnelle en éléments finis mixtes s'écrit de façon classique [4] :

Trouver  $(\vec{u}, p)$  tel que pour tout  $(\vec{v}, q)$  dans  $H(\Omega_f) \times L_0^2(\Omega_f)$  :

$$\int_{\Omega_f} 2\eta_f \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{u}}) : \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{v}}) d\Omega - \int_{\Omega_f} p \nabla \cdot \underline{\bar{v}} d\Omega = - \int_{\Gamma} (\underline{\sigma} \cdot \underline{\bar{n}}) \underline{\bar{v}} d\Gamma - \sum_i \int_{\partial\Omega_s^i} (\underline{\sigma} \cdot \underline{\bar{n}}) \underline{\bar{v}} d\Gamma \quad (9)$$

avec :

$$H(\Omega_f) = \left\{ \underline{\bar{v}} \in H^1(\Omega_f) \mid \underline{\bar{v}} = \underline{\bar{U}}_i + \underline{\bar{\omega}}_i \times (\underline{\bar{x}} - \underline{\bar{X}}_i) \text{ sur } \partial\Omega_s^i \right\}$$

Cette approche nécessite un remaillage du domaine fluide à chaque pas de temps, puisque  $\Omega_f$  évolue, et est donc lourde numériquement. C'est pourquoi on lui préfère la méthode sans remaillage dite "par domaine fictif".

### 3.2 Méthode sans remaillage : technique des domaines fictifs

La technique des domaines fictifs consiste à étendre la formulation variationnelle à  $\Omega$  tout entier, en faisant disparaître les intégrales aux interfaces fluide/particule [4]. En effet, la condition limite à ces interfaces, et les approximations de l'injection permettent d'écrire :

$$\int_{\partial\Omega_s^i} (\underline{\sigma} \cdot \underline{\bar{n}}) \cdot \underline{\bar{v}} = \underline{\bar{U}}_i \cdot \underline{\bar{F}}_h^i + \underline{\bar{\omega}}_i \cdot \underline{\bar{\Gamma}}_h^i = -\underline{\bar{U}}_i \cdot \underline{\bar{F}}_{cp}^i - \underline{\bar{\omega}}_i \cdot \underline{\bar{\Gamma}}_{cp}^i \quad (10)$$

Pour étendre le champ de vitesse au domaine solide, on peut remarquer que la condition de mouvement de corps rigide est équivalente aux deux conditions d'incompressibilité et d'indéformabilité [5]. Sur  $\Omega_s$  nous avons donc :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \underline{\bar{u}} = 0 \\ \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{u}}) = 0 \end{cases} \quad (11)$$

Ces 2 conditions sont des contraintes à imposer au champ de vitesse sur  $\Omega_s$  pour avoir un mouvement de corps rigide. La première est déjà imposée sur  $\Omega_f$  et doit donc être vérifiée sur tout le domaine. Elle est imposée à l'aide du multiplicateur pression  $p$ . Nous avons choisi de pénaliser la contrainte d'indéformabilité, à l'aide du facteur de pénalisation  $\alpha$ . Nous obtenons ainsi la formulation suivante :

Trouver  $(\underline{\bar{u}}, p)$  tel que pour tout  $(\underline{\bar{v}}, q)$  dans  $H^1(\Omega) \times L_0^2(\Omega)$  :

$$\int_{\Omega} 2\eta_f I_{\Omega_f} \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{u}}) : \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{v}}) d\Omega + \int_{\Omega} 2\alpha I_{\Omega_s} \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{u}}) : \underline{\dot{\varepsilon}}(\underline{\bar{v}}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \underline{\bar{v}} d\Omega = - \int_{\Gamma} (\underline{\sigma} \cdot \underline{\bar{n}}) \underline{\bar{v}} d\Gamma + \sum_i \underline{\bar{U}}_i \cdot \underline{\bar{F}}_{cp}^i + \sum_i \underline{\bar{\omega}}_i \cdot \underline{\bar{\Gamma}}_{cp}^i \quad (12)$$

Aux termes correctifs près, nous avons à résoudre un problème de Stokes multi-domaines ; le facteur de pénalisation joue le rôle d'une viscosité, grande devant celle du fluide. Le problème étant formulé sur un domaine fixe, le remaillage n'est pas

nécessaire. En contrepartie, l'évolution des sous-domaines est décrite à l'aide des fonctions caractéristiques  $I_{\Omega_f}, I_{\Omega_s}$  que l'on doit mettre à jour à chaque pas de temps.

Dans notre formulation variationnelle, nous n'avons pas tenu compte des deux derniers termes du membre de droite de (12), correspondant aux forces correctives à courte portée. Nous avons pris en compte ces interactions au cours du déplacement des particules, en ajoutant simplement des termes correctifs dans les équations d'évolution de  $\underline{\bar{X}}_i$  et de  $\underline{\bar{P}}_i$ .

### 3.4 Evolution du domaine solide

Le calcul des fonctions caractéristiques au pas de temps suivant passe par deux étapes importantes : le calcul des nouvelles positions et orientations des particules, puis la projection des particules dans le maillage global. Les vitesses des particules sont simplement interpolées à partir du champ de vitesse calculé dans toute la cavité, et corrigées en fonction des interactions courte portée. Nous avons pour la position:

$$\underline{\bar{X}}_i(t + \Delta t) = \underline{\bar{X}}_i(t) + \Delta t \left[ \underline{\bar{u}}(\underline{\bar{X}}_i) + \underline{\delta \bar{u}}_{cp}^i \right] \quad (13)$$

$$\text{avec } \underline{\delta \bar{u}}_{cp}^i = \frac{\Delta t}{M_i} \sum_{j \neq i} \underline{\bar{F}}^{j \rightarrow i} \quad (14)$$

$\underline{\bar{F}}_{cp}^{i \rightarrow j}$  désigne la force corrective à courte portée exercée par la particule  $j$  sur la particule  $i$ . Pour des sphères, nous avons pris la force modèle suivante :

$$\underline{\bar{F}}_{cp}^{i \rightarrow j} = \begin{cases} \kappa(2R - \|\underline{\bar{X}}_j - \underline{\bar{X}}_i\| + d) \underline{\bar{n}}_{j \rightarrow i} & \text{si } \|\underline{\bar{X}}_j - \underline{\bar{X}}_i\| < 2R + d \\ \bar{0} & \text{si } \|\underline{\bar{X}}_j - \underline{\bar{X}}_i\| \geq 2R + d \end{cases} \quad (15)$$

$\kappa$  est un paramètre ajustable,  $R$  le rayon des particules et  $d$  la distance limite entre les deux points les plus proches de la particules, en dessous de laquelle l'interaction est non nulle. Pour des fibres, le centre  $\underline{\bar{X}}_i$  est remplacé par le point  $\underline{\bar{P}}_{ij}$  de l'axe de la fibre  $i$  le plus proche de la fibre  $j$ . De la même façon, on peut évaluer la nouvelle orientation des particules. Si  $\underline{\bar{X}}_i^1$  et  $\underline{\bar{X}}_i^2$  désignent les extrémités de la fibre  $i$  (avec, par convention,  $\underline{\bar{p}}_i = \underline{\bar{X}}_i^2 - \underline{\bar{X}}_i^1$ ), nous avons :

$$\begin{aligned} \underline{\bar{p}}_i(t + \Delta t) &= \underline{\bar{p}}_i(t) + \Delta t \left[ \underline{\bar{\omega}}_i + \underline{\delta \bar{\omega}}_{cp}^i \right] \times \underline{\bar{p}}_i(t) \\ &= \underline{\bar{p}}_i(t) + \Delta t \underline{\delta \bar{\omega}}_{cp}^i \times \underline{\bar{p}}_i(t) \\ &\quad + \Delta t \frac{\underline{\bar{u}}(\underline{\bar{X}}_i^2) - \underline{\bar{u}}(\underline{\bar{X}}_i^1)}{\|\underline{\bar{X}}_i^2 - \underline{\bar{X}}_i^1\|} \end{aligned} \quad (16)$$

avec :

$$\delta \bar{\omega}_{cp}^i = \frac{\Delta t}{J_i} \sum_{j \neq i} (\bar{P}_{ij} - \bar{X}_i) \times \bar{F}_{cp}^{j \rightarrow i} \quad (17)$$

L'impression des particules dans le maillage du domaine (c'est-à-dire le calcul direct des fonctions caractéristiques) se fait par une méthode de voxelisation [6]. La fonction caractéristique  $I_{\Omega_s}$  est calculée par élément, comme étant le taux de remplissage de l'élément par la phase solide (approximation  $P_0$ ).

#### 4. Résultats préliminaires en 2D

Les premières simulations ont été effectuées en 2D, avec une seule population de charge (uniquement des fibres ou des sphères). A concentration modérée (jusqu'à 30 %), l'ajout de termes correctifs pour les forces de courte portée permet d'empêcher le chevauchement de particules. En l'absence de ces forces, on observe une fusion progressive des particules, qui n'a aucun sens physique.

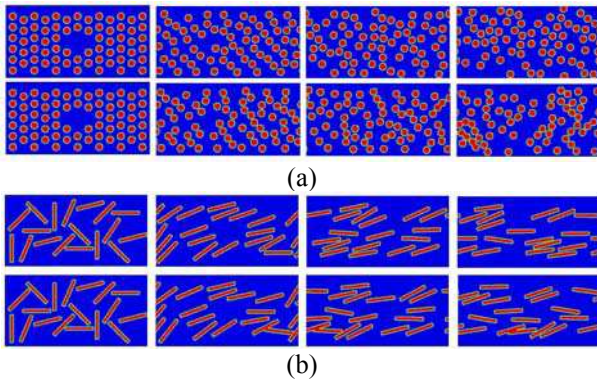


Fig. 1 : Ecoulement de sphères (a) et de fibres (b); en haut, nous avons l'évolution avec prise en compte des interactions de courte portée, en bas sans.

A grande concentration (64 %), ces chevauchements de particules réapparaissent (Fig. 2). La vitesse de cisaillement est dirigée vers la droite. On s'aperçoit que les chevauchements apparaissent préférentiellement en entrée de zone. La formation d'amas est donc probablement liée aux conditions limites choisies ("pseudo périodiques").

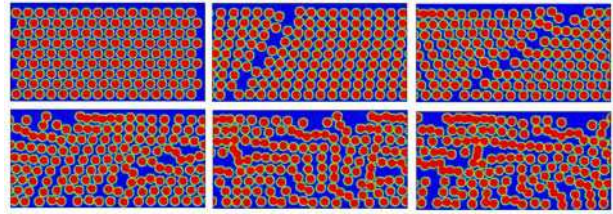


Fig. 2 : Ecoulement de sphères à grande concentration; en haut, nous avons l'évolution avec prise en compte des interactions de courte portée, en bas sans.

#### 5. Conclusion et perspectives

Les premières simulations ont permis de valider notre outil de simulation à concentration modérée en charges. Nos travaux actuels visent à améliorer notre méthode, pour pouvoir travailler à des concentrations encore plus élevées. Une majeure partie de ces travaux concerne les conditions limites : ajout de conditions limites pseudo-périodiques sur les autres bord (pour s'affranchir de l'effet de confinement dû à la proximité des parois horizontales), périodicité du champ de vitesse selon la direction de l'écoulement (imposé sous la forme d'une contrainte supplémentaire dans la formulation variationnelle). Une autre partie concerne les forces de courte portée : modèles de forces correctives plus réalistes (notamment en fonction des vitesses relatives) à tester, et prise en compte des forces dans la formulation variationnelle.

#### 6. Références

- [1] Ancey, C. Coussot, P. *Rhéophysique des pâtes et des suspensions*, EDP Sciences (1999).
- [2] Hu, H.H., Joseph, D.D., Crochet, M.J. Direct simulations of flows of fluid particle motions, *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 3: 285-306 (1992).
- [3] Hu, H.H. Direct simulations of flows of solid-liquid mixtures, *Int. J. Multiphase Flow*, 22, 335-352 (1996).
- [4] Glowinski, G., Pan, T-W., Hesla, T.I., Joseph, D.D. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 25, 755-794 (1999).
- [5] Diaz-Goano, C., Minev, P. D., Nandakumar, K. A fictitious domain/finite element method for particulate flows. *J. Comput. Physics*, 192, 105-123 (2003).
- [6] Megally A. Etude et modélisation de l'orientation de fibres dans les thermoplastiques renforcés, Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.