



HAL
open science

Modélisation et simulation en trois dimensions d'un réseau fibreux en vue de prédire ses propriétés physiques

Rémi Vincent

► **To cite this version:**

Rémi Vincent. Modélisation et simulation en trois dimensions d'un réseau fibreux en vue de prédire ses propriétés physiques. Génie des procédés. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2006. Français. NNT: . tel-00193223

HAL Id: tel-00193223

<https://theses.hal.science/tel-00193223>

Submitted on 2 Dec 2007

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.

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

N° attribué par la bibliothèque

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'INPG

Spécialité : *GÉNIE DES PROCÉDÉS*

préparée au laboratoire LGP2, dans le cadre de l'École doctorale
MATÉRIAUX ET GÉNIE DES PROCÉDÉS

présentée et soutenue publiquement par

Rémi VINCENT

le 6 novembre 2006

Titre :

**Modélisation et simulation en trois dimensions
d'un réseau fibreux
en vue de prédire ses propriétés physiques**

Directeurs de thèse :

Martine RUEFF et Christian VOILLOT

Composition du jury :

M.	Didier CHAUSSY	Président
Mme	Ana Maria RAMOS	Rapporteur
M.	Christian MOYNE	Rapporteur
Mme	Marie-José VILLETTE	Responsable Industriel
M.	Christian VOILLOT	Directeur de thèse
Mme	Martine RUEFF	Co-directeur de thèse

Table des matières

Avant-Propos et Remerciements	7
Introduction	9
1 Morphologie des fibres	11
1.1 Introduction	11
1.2 Le bois, les fibres, les pâtes à papier	11
1.2.1 Le bois	11
1.2.2 Les fibres	13
1.2.3 Les pâtes à papier	16
1.2.4 Les fines	16
1.2.5 Le raffinage	17
1.2.6 Caractérisation de la dimension des fibres	18
1.3 Caractérisation de la morphologie des fibres en vue d'une simulation 3D .	18
1.3.1 Choix des paramètres morphologiques prépondérants	19
1.3.2 Mesure de la morphologie des fibres à partir des appareils automa- tiques	20
1.3.3 Corrélation entre la longueur et la largeur des fibres	22
1.3.4 Corrélation entre la largeur et l'épaisseur des fibres	25
1.3.5 Simulation en trois dimensions des fibres représentatives d'une pâte à papier	28
1.4 Conclusion	31
2 Simulation de la structure fibreuse	33
2.1 Introduction	33
2.2 Fabrication du papier sur machine industrielle	34
2.3 Fabrication du papier sur une formette de laboratoire	37
2.4 Méthodes d'étude de la structure du papier	37
2.5 Revue des précédentes simulations	39
2.6 Modèle et simulation	41
2.6.1 Identification du problème	42
2.6.2 Choix des outils informatiques	42
2.7 Identification des entrées et des sorties du modèle	43
2.7.1 Les entrées	43
2.7.2 Les sorties	43
2.7.3 Détermination de la précision	43

2.8	Construction du modèle	44
2.8.1	Simulation d'une fibre	45
2.8.2	Formation de la feuille	46
2.8.3	Conformation	46
2.8.4	Détermination des grandeurs géométriques	49
2.8.5	Détermination de la taille minimum du réseau	50
2.8.6	Répétabilité du modèle	50
2.9	Interrogation du modèle	51
2.9.1	Validation qualitative	51
2.9.2	Validation des grandeurs géométriques	53
2.9.3	Simulation de l'influence des fines sur la structure	55
2.9.4	Simulation de structure composite à base de fibres de verre et de fibres cellulosiques	58
2.10	Caractérisation de la topographie de surface	60
2.11	Prédiction de l'influence de la morphologie des fibres sur la structure	69
2.12	Conclusion	73
3	Prédiction de la résistance à la traction	75
3.1	Introduction	75
3.2	Mesure de la résistance à la traction	75
3.3	Etude de la résistance à la rupture	76
3.4	Modèle de Page	79
3.5	Modèle de Shallhorn et Karnis	83
3.6	Analyse et commentaire des modèles	85
3.7	Introduction du modèle de Shallhorn et Karnis dans la simulation	86
3.8	Détermination de la valeur du RBA simulée	88
3.9	Résultats de la simulation	89
3.10	Remarque sur la force nécessaire pour arracher une fibre	92
3.11	Conclusion	93
4	Prédiction de la perméabilité	95
4.1	Introduction	95
4.2	Ecoulement au travers d'un milieu poreux	95
4.3	Modèles empiriques	96
4.4	Méthode numérique de "Lattice Boltzmann"	98
4.4.1	Méthode des gaz sur réseau	99
4.4.2	Modèle de "Lattice Boltzmann" LBE	101
4.4.3	Conditions aux limites	103
4.4.4	Etablissement de l'écoulement	103
4.5	Validation de la simulation	104
4.5.1	Introduction de la structure dans la simulation	108
4.6	Résultats de la simulation par la méthode de "Lattice Boltzmann"	109
4.6.1	Simulation de l'écoulement au travers de structures composées de pâtes brutes	109
4.6.2	Remarque sur l'importance de la prise en compte des fines	111

4.6.3	Simulation de l'écoulement au travers de structures composées d'un mélange de fibres cellulosiques et de fibres de verre	112
4.7	Conclusion	114
	Conclusion générale	117
	Bibliographie	118
	Publications pendant la thèse	125

Avant-Propos et Remerciements

Ce travail a été réalisé en collaboration avec la société TEMBEC S.A dans le cadre d'une convention CIFRE. Cette société est l'un des grands producteurs de pâtes à papier à partir de plusieurs essences de bois. Son objectif fixé dans le cadre de ce travail est de disposer d'un outil rapide lui permettant de simuler la réalisation d'une feuille de laboratoire, appelée "formette", afin d'en anticiper les propriétés en fonction de l'essence de bois utilisée et du procédé de traitement de ce bois.

J'aimerais en premier lieu remercier Madame Martine Rueff, pour son soutien, sa présence et sa disponibilité. Ses remarques et idées ont permis un gain de temps important à ces travaux de recherche.

J'exprime une grande gratitude à Monsieur Christian Voillot, qui a su gérer avec panache ce projet de recherche.

Je remercie également Madame Marie-José Villette, qui a suivi ce travail au sein de la société Tembec, pour sa compréhension et son ouverture d'esprit.

Je tiens à exprimer tout particulièrement ma reconnaissance à Monsieur Christian Moyne, directeur de recherches au CNRS à Nancy, à Madame Ana Maria Ramos, professeur à l'université de Beira Interior (Portugal) ainsi qu'à Monsieur Didier Chaussy, professeur à l'INPG (EFPG) pour avoir évalué mon travail.

Et bien entendu un grand merci à Jean-pierre Gervasoni, Bertine Kelhifi, Christophe Mercier et Marc Benesse.

Introduction

Le papier est un matériau très commun, chaque jour 280 000 tonnes sont produites et un Français en utilise en moyenne 184 kg par an. Sa disparition fut annoncée avec l'émergence de l'informatique et d'Internet mais la place et les fonctions qu'il a toujours occupées lui ont permis de résister et de continuer à se développer. Avant de vouloir sa disparition, c'est la technologie qui a permis son expansion en passant, en moins de deux siècles, d'un mode artisanal à une industrie lourde mettant en œuvre des machines totalement automatisées qui peuvent atteindre une centaine de mètres de long et produire en une heure une surface de papier équivalente à 200 terrains de football, ceci avec moins de dix personnes pour les contrôler.

L'histoire de l'industrie papetière est constituée d'un enchaînement d'étapes visant à augmenter la production, minimiser les coûts, améliorer la qualité et la spécificité de chaque papier. C'est dans cette problématique que la recherche en papeterie intervient. La compréhension des phénomènes complexes mis en jeu lors des opérations unitaires du procédé papetier (raffinage, formation de la feuille, pressage, séchage, etc.) mais aussi l'influence des matières premières (fibres, charges, etc.) sur les caractéristiques finales du matériau sont deux des objectifs importants de ce secteur de la recherche.

Le travail de recherche présenté dans ce document se situe entre ces deux problématiques. Son but est de proposer un outil de représentation en trois dimensions de la structure du papier, représentation qui permet de caractériser la structure du papier en fonction des entrées du modèle (morphologie des fibres). La deuxième partie de ce travail consiste à utiliser cette structure virtuelle et lui appliquer différents modèles pour prédire certaines propriétés physiques du papier.

Cette simulation, dont les perspectives sont nombreuses pour la recherche fondamentale, doit avoir des applications dans le domaine industriel. L'exigence industrielle amène une contrainte supplémentaire non négligeable, le temps de calcul. Le choix d'outils performants comme le langage C et les bibliothèques OpenGL, aujourd'hui largement utilisés, a donc été fait pour le développement informatique.

La fabrication d'un papier met en jeu un nombre important de phénomènes physiques particulièrement complexes, comme la formation, le pressage et le séchage. De plus, il faut prendre en compte l'influence de la morphologie des fibres dont l'impact sur la structure du matériau est encore mal quantifié. Dans le but de concevoir une simulation de la structure du papier, on doit tenir compte de chacun de ces phénomènes. Ce mémoire explique la manière dont chaque phénomène a été abordé et les choix qui

ont été faits pour les modéliser. Il s'organise en quatre chapitres. Le premier chapitre présente la matière première cellulosique utilisée par les papetiers, la problématique de la caractérisation morphologique des fibres et la méthode choisie pour simuler ces fibres en trois dimensions. Le deuxième chapitre porte sur la conception de la simulation, il est donc le plus important de ce document. La manière dont les phénomènes liés à la fabrication du papier sont pris en compte et leur modélisation y sont détaillées. De plus la validation de la simulation à partir de paramètres de contexture (volume massique, rugosité) y est démontrée. Ce chapitre se termine par la mise en évidence de phénomènes et de paramètres prépondérants tels que l'auto-cicatrisation du réseau lors de la formation et le facteur de forme des fibres. Les deux derniers chapitres présentent les simulations de deux caractéristiques importantes du papier. Le troisième chapitre aborde la modélisation de la résistance à la rupture en traction, basée sur le modèle de Shallhorn modifié pour une prise en compte de l'hétérogénéité des fibres. Le dernier chapitre s'appliquera à présenter les méthodes envisagées pour prédire la perméabilité des structures virtuelles, notamment à partir de la méthode de Boltzmann sur réseau, "Lattice Boltzmann". Le mémoire se termine par des conclusions et les perspectives sur l'application de la simulation.

Chapitre 1

Morphologie des fibres

1.1 Introduction

Un rappel sur le bois et ses caractéristiques est important. En effet, les fibres utilisées en papeterie subissent un nombre important d'opérations (cuisson, raffinage, pressage, séchage) pour former une feuille de papier mais à l'origine elles avaient des fonctions bien différentes. Les millions d'années d'évolution des végétaux permettent aujourd'hui la récolte de fibres aux caractéristiques morphologiques très différentes, dont les caractéristiques ont un impact direct sur le matériau papier. Ainsi, une présentation détaillée des matières premières fibreuses et de leurs caractéristiques morphologiques sera tout d'abord effectuée dans ce chapitre. Ensuite, les méthodes manuelle et automatique de caractérisation morphologique des fibres et leur pertinence vis-à-vis de la problématique de la simulation seront abordées. Enfin, un modèle permettant de déterminer les dimensions de chaque fibre d'une pâte sera proposé. Ce modèle sera utilisé dans la simulation du réseau, qui fait l'objet du deuxième chapitre.

1.2 Le bois, les fibres, les pâtes à papier

1.2.1 Le bois

La structure d'un arbre est constituée d'un empilement de cônes qui correspondent à la production de matière pendant un an. Comme on peut le voir sur la figure 1.1, cet accroissement annuel entraîne une augmentation simultanée de la hauteur et du diamètre.

La production de matière est localisée dans une zone nommée cambium. La matière végétale est produite dans deux directions à partir du cambium :

- vers l'intérieur de l'arbre, où les constituants du bois secondaire (trachéides, vaisseaux, rayons ligneux) sont produits ;
- vers l'extérieur, où les constituants du phloème secondaire ou de l'écorce interne sont produits.

Lors de leur développement, les cellules créées par le cambium sont constituées essentiellement de cellulose. L'imprégnation de lignine, qui pénètre leur paroi et les scelle

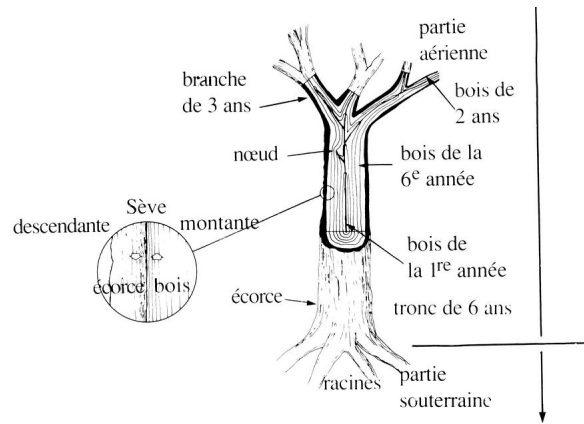


FIG. 1.1 – Schéma de croissance de l'arbre [1].

entre elles, marque la fin de leur développement. Ces cellules ont trois fonctions principales : conduction de la sève, soutien de l'arbre et stockage des matières nutritives.

Les résineux, qui ont précédé les feuillus de plusieurs centaines de millions d'années, se différencient par leur système de conduction de la sève. En effet, chez les résineux, les fibres (appelées trachéides) ont une double fonction, assurer la circulation de la sève et assurer le soutien mécanique de l'arbre, alors que chez les feuillus les fibres jouent seulement le rôle de soutien et les vaisseaux celui de conduction. Ceci peut expliquer en partie la différence de morphologie entre les fibres des feuillus et celles des résineux, ces dernières ayant une section plus importante pour limiter les pertes de charges liées à l'écoulement de la sève. Cette distinction entre feuillus et résineux est largement utilisée par les papetiers lors de la composition de leurs produits. On voit sur la figure 1.2 la différence de constitution entre le bois de feuillu et le bois de résineux. Les vaisseaux et les fibres sont facilement différenciables, les fibres apparaissent comme de petits tubes creux, scellés entre eux par la lignine.

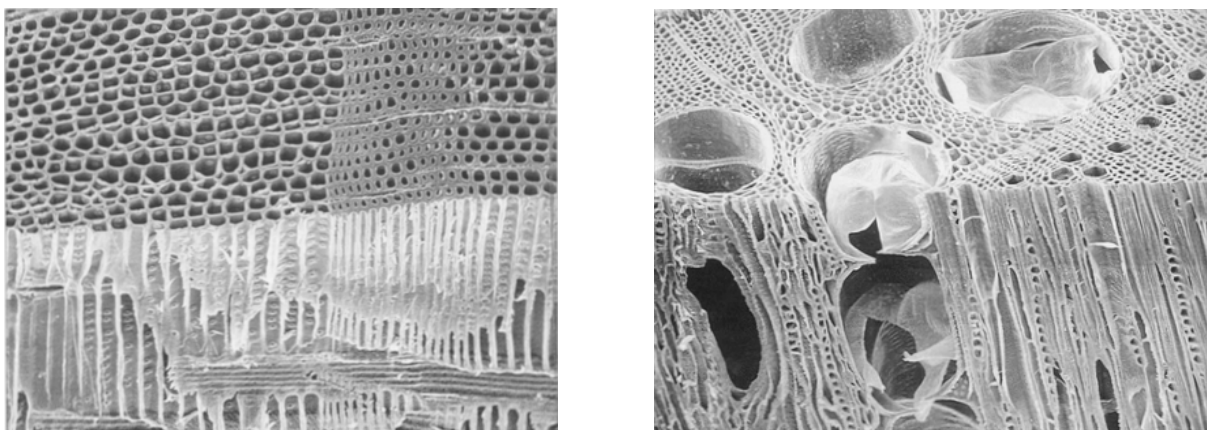


FIG. 1.2 – Images MEB de bois de résineux (à gauche) et de feuillu (à droite) [1]. Coupes transversale et longitudinale-radiale.

1.2.2 Les fibres

Les trachéides des résineux, qui dans tout le reste de cette étude seront appelées fibres, et les fibres des feuillus représentent en masse la majorité des constituants du bois. Ce sont elles qui vont constituer le papier et lui donner ses caractéristiques. Les fibres sont généralement de forme tubulaire, avec des extrémités étroites. Elles sont composées de quatre parties [2][3] (figure 1.3) :

- la lamelle mitoyenne qui assure la liaison inter-fibres. Elle est composée principalement de lignine et est majoritairement détruite pendant la cuisson du bois (Kraft, bisulfite).
- La paroi primaire, très mince, forme une gaine de protection. Lors de la cuisson ou du raffinage elle peut être partiellement détruite et donner des fibrilles ou des fines.
- La paroi secondaire, composée en grande partie de cellulose agencée en microfibrilles, constitue la plus grande partie de la fibre après cuisson. Ses caractéristiques influencent donc directement celles du papier.
- Le lumen est le canal vide au centre de la fibre, par où circule la sève.

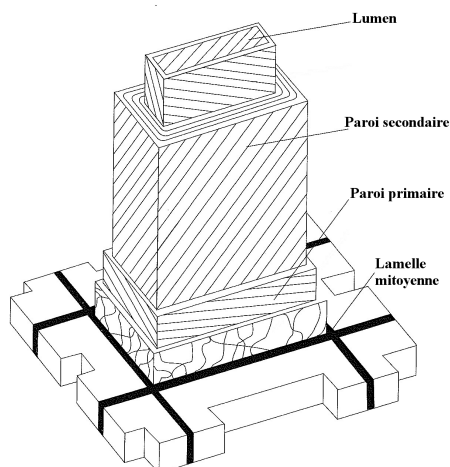


FIG. 1.3 – Schéma de la structure d'une fibre [3].

La résistance du papier est due aux liens inter-fibres. Ces liens sont obtenus grâce aux liaisons hydrogènes permises par la cellulose, alors que dans l'arbre c'est la lignine qui permet de sceller les fibres (heureusement car on imagine mal un arbre s'écrouler aux premières pluies).

Bien que toutes les fibres aient une structure commune, leur morphologie peut varier de manière importante en fonction de plusieurs facteurs. Par exemple, dans un même arbre, on trouve des variations de dimension des fibres en fonction des zones de prélèvement. Les fibres présentes dans les branches ont tendance à être plus courtes que les fibres du tronc (tableau 1.1), tout comme les fibres formées pendant les premières années, généralement plus courtes que celles formées lorsque l'arbre est adulte (tableau 1.2). La saison de formation des fibres influence aussi leurs dimensions. Chez les résineux, les fibres de printemps ont une section plus importante que les fibres d'été [1] pour faciliter l'écoulement de la sève alors que les fibres d'été ont plutôt une vocation de soutien de la structure.

	CHÊNE		CHARME		HÊTRE	
	Tronc	Branche	Tronc	Branche	Tronc	Branche
Longueur moyenne (mm)	1.25	0.66	1.34	1.19	1.32	0.80
Largeur moyenne (μm)	20.5	14.7	25.2	22.7	20.8	14.2
Épaisseur de paroi (μm)	6.10	5.20	5.80	5.40	7.90	4.70

TAB. 1.1 – Comparaison pour 3 essences de feuillus de la longueur moyenne, de la largeur moyenne et de l'épaisseur de paroi des fibres dans le tronc et les branches.

	Longueur (mm)			Épaisseur (μm)		
	CHÊNE	CHARME	HÊTRE	CHÊNE	CHARME	HÊTRE
3 - 4 ans	0.70	1.05	0.75	3.90	4.70	4.60
10 - 12 ans	0.84	1.15	0.88	4.70	5.00	4.70
Adulte	1.25	1.34	1.32	6.10	5.80	7.90

TAB. 1.2 – Comparaison pour 3 essences de feuillus de la longueur moyenne et de l'épaisseur de paroi des fibres en fonction de l'âge des arbres.

Malheureusement, ces variations morphologiques, présentes dans un même arbre et dans la même essence, sont difficilement contrôlables dans le procédé papetier. Elles constituent une hétérogénéité préjudiciable à la stabilité de la qualité d'une pâte à papier. Mais les papetiers ont une action possible sur le choix des essences, où les différences de morphologie peuvent être plus importantes (tableau 1.3). Ils peuvent donc piloter les caractéristiques de leurs papiers en fonction du mélange de pâtes qu'ils opèrent.

	Résineux	Feuillus
Longueur (mm)	2.4 - 4.0	0.8 - 1.6
Largeur (μm)	32 - 48	16 - 38
Épaisseur de paroi (μm)	3.2 - 8.0	4.0 - 7.3

TAB. 1.3 – Plages de variation des dimensions des fibres chez les résineux et les feuillus [4][5].

Comme cela a déjà été présenté dans la figure 1.3, les fibres ont une structure complexe. En plus de leurs dimensions, d'autres paramètres morphologiques influencent leurs caractéristiques physiques. C'est le cas des microfibrilles de cellulose qui sont présentes dans paroi des fibres et dont l'orientation influence les caractéristiques mécaniques de la fibre (figure 1.4). Rappelons que les fibres de bois n'ont pas été conçues à l'origine pour faire du papier bien qu'elles aient une capacité exceptionnelle à se conformer et à se lier

entre elles pour former une feuille relativement homogène. Certaines caractéristiques de leur structure peuvent être considérées comme des défauts lorsque l'on désire optimiser leur utilisation dans le procédé papetier. Les hétérogénéités de la structure de la fibre constituent localement des points faibles. Par exemple, les ponctuations aréolées (figure 1.6), qui sont de larges orifices ayant comme fonction, dans l'arbre, de permettre la circulation de la sève entre les fibres, deviennent des points faibles pour une application papetière. Cette absence locale de paroi entraîne une concentration des contraintes lors d'une sollicitation mécanique de la fibre [6][7]. Forgacs [8] précise que les fibres gonflent, plient et se cassent préférentiellement au niveau d'une ponctuation aréolée.

La présence de défauts de type "coude" ou "vrille" sur une fibre constitue aussi une source de points faibles. Ces défauts sont généralement dus au procédé papetier ou à la présence d'un taux de cellulose amorphe important [7]. Mohlin [9] montre ainsi la diminution de la force de rupture du papier avec l'augmentation du nombre de défauts de ce type par fibre (figure 1.5).

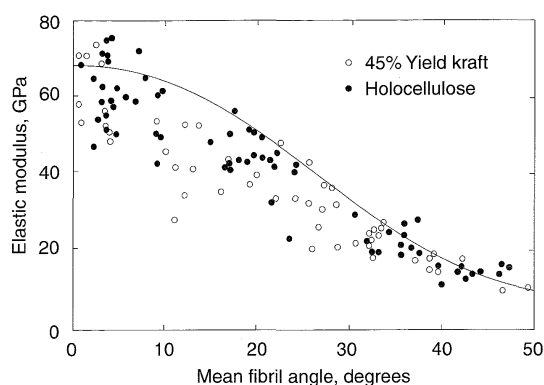


FIG. 1.4 – Module d'élasticité des fibres en fonction de l'angle moyen d'orientation des fibrilles dans la couche S2 [10].

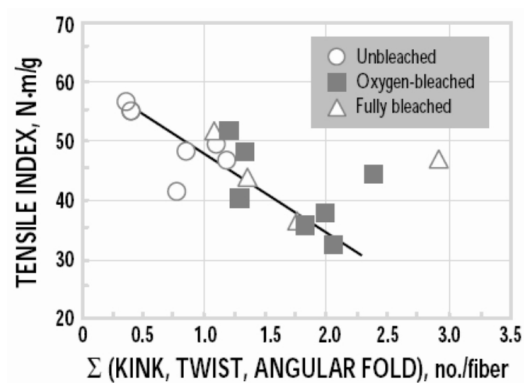


FIG. 1.5 – Indice de rupture de pâtes non raffinées en fonction du nombre de déformations déviant l'axe de la fibre [9].

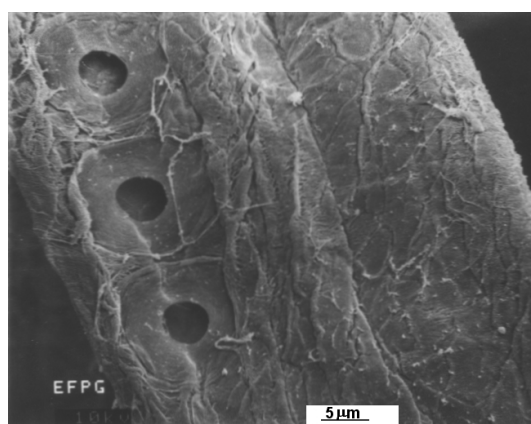


FIG. 1.6 – Ponctuations aréolées d'une trachéide de printemps, bois de résineux.

La structure complexe des fibres augmente la difficulté de compréhension et de prédiction de leur influence sur le matériau papier. L'objectif de ce travail est de réussir à isoler les paramètres prépondérants de la morphologie des fibres et de modéliser le changement d'échelle qui permettra de mettre en évidence l'impact de ces paramètres sur la structure globale du papier.

1.2.3 Les pâtes à papier

Pour une utilisation papetière, les fibres doivent être dissociées les unes des autres. Dans ce but, plusieurs procédés sont utilisés industriellement, chaque procédé étant utilisé pour une application et des produits finis précis.

Pâtes mécaniques

Ce procédé consiste à râper des rondins de bois ou des copeaux sur une meule ou sur des disques de raffineur. Il permet d'obtenir un rendement de matière important (environ 95%) car il conserve toute la matière végétale. Les pâtes obtenues possèdent des fibres rigides car encore en partie entourées par la lamelle mitoyenne composée de lignine. La présence de cette lignine à la surface des fibres limite les possibilités de liaison hydrogène lors de contacts fibre-fibre ce qui diminue les caractéristiques mécaniques du papier.

Pâte chimique, procédé au sulfate

C'est le procédé actuellement le plus utilisé pour l'obtention de pâte à papier. Plus couramment appelé procédé Kraft, il consiste à faire cuire des copeaux de bois dans une liqueur contenant de la soude caustique et du sulfate de sodium. Après la cuisson, la pâte peut être utilisée soit telle quelle et sera dite "écru", soit après une étape de blanchiment et sera dite "blanchie". La cuisson donne un rendement de matière bien inférieur aux procédés mécaniques (environ 45%), par contre l'élimination de la lignine donne aux fibres cellulosiques une plus grande souplesse et une capacité à former des liaisons plus importante, donc un papier plus résistant. Les figures 1.7 et 1.8 montrent les fibres présentes dans une pâte Kraft et une pâte mécanique. On remarque que le procédé de fabrication utilisé influence de façon importante les caractéristiques morphologiques des fibres.

Pâte chimique, procédé au bisulfite

Ce procédé utilise des composés de l'acide sulfureux pour dissoudre la lignine. Son rendement en matière est équivalent au procédé Kraft, mais avec une blancheur après cuisson plus élevée.

1.2.4 Les fines

Les fines cellulosiques sont en masse le deuxième constituant des pâtes à papier. Leurs formes sont très variables et mal connues. Elles sont définies comme étant l'ensemble des éléments cellulosiques traversant un tamis de 200 mesh [11]. On peut généralement les classer en deux catégories :

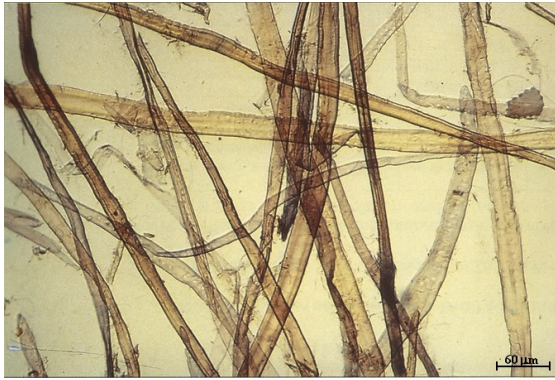


FIG. 1.7 – Image en microscopie optique d'une pâte Kraft de pin maritime.



FIG. 1.8 – Image en microscopie optique d'une pâte mécanique de meule d'épicéa.

- les fines provenant du bois (cellules de parenchyme) (figure 1.9). Elles sont obligatoirement présentes dans la pâte et leur quantité peut varier de 3 à 15% en masse selon les essences d'arbres.
- Les fines générées par le procédé papetier et plus précisément par le raffinage. Ce sont des morceaux de fibres coupées ou des fragments de parois externes de fibres. Leur quantité est fonction du temps de raffinage.

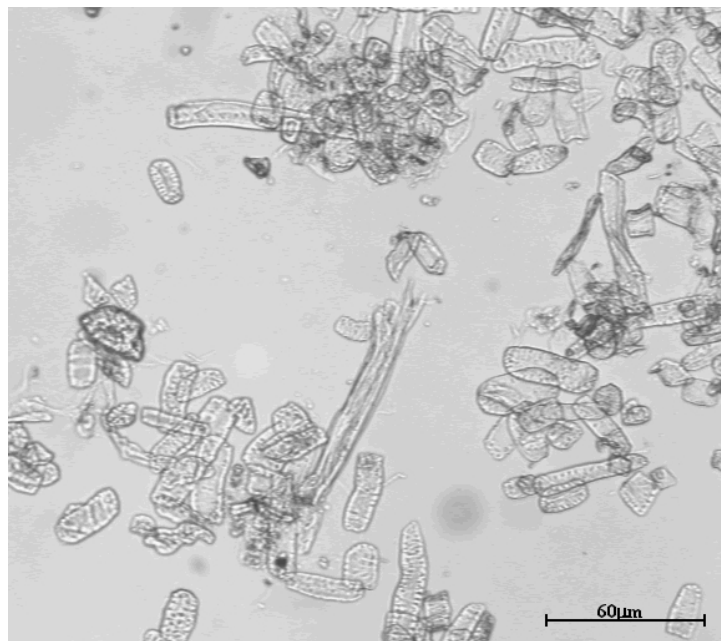


FIG. 1.9 – Fines présentes dans une pâte brute de feuillus.

1.2.5 Le raffinage

Le raffinage est une étape importante pour les propriétés finales du papier. Il consiste à hydrater, fibriller et, dans certains cas, à couper les fibres en les faisant passer en suspension entre de grands disques cannelés en rotation l'un par rapport à l'autre. Le

raffinage entraîne habituellement une amélioration des caractéristiques mécaniques, une augmentation de la masse volumique et une diminution de la perméabilité du papier.

1.2.6 Caractérisation de la dimension des fibres

On peut classer les méthodes de mesure des dimensions des fibres en deux catégories, les méthodes manuelles et les méthodes automatiques. Les méthodes manuelles utilisent des microscopes pour visualiser les fibres et permettent une mesure directe de leurs dimensions. Ces méthodes (figure 1.10) sont généralement fastidieuses, mais ont pour avantage d’obtenir, pour chaque fibre, la mesure des trois principales dimensions, longueur, largeur et épaisseur de paroi.

Les méthodes automatiques font appel à différents types de capteurs (optique, caméra CCD, etc.) effectuant les mesures automatiquement sur les fibres en suspension lors de leur passage dans un capillaire ou entre deux plaques de verre (figure 1.11). Ces méthodes ont l’avantage de mesurer un grand nombre de fibres et de donner les distributions en fréquence permettant ainsi une étude statistique. Actuellement, seule une partie des appareils automatiques donne accès à l’épaisseur de paroi des fibres. Il faut préciser que, dans ces deux cas, ce sont les dimensions des fibres hydratées qui sont mesurées.

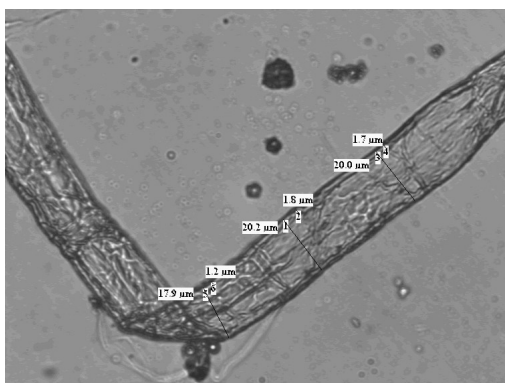


FIG. 1.10 – Image en microscopie optique d’une fibre.



FIG. 1.11 – Image obtenue par l’analyseur automatique “Morfi”

1.3 Caractérisation de la morphologie des fibres en vue d’une simulation 3D

Les papetiers utilisent, pour fabriquer leurs produits, des fibres cellulosiques qui n’ont pas à l’origine cette vocation. C’est grâce au procédé de mise en pâte que ces fibres deviennent utilisables, chaque mode de mise en pâte donnant aux fibres des caractéristiques différentes influençant celles du papier. Toute l’expertise papetière est de mélanger les différents types de pâtes et les différentes essences d’arbres pour obtenir, à moindre coût, un produit final ayant les caractéristiques désirées.

Les possibilités sont nombreuses, de même les champs d'investigations sont très larges. Cette étude n'abordera que le cas des pâtes Kraft blanchies qui représentent une large partie de la consommation mondiale. Une large gamme d'essences d'arbres et de morphologies de fibres a été choisie, dans le but d'étudier l'influence des dimensions des fibres sur la structure et les caractéristiques du papier. Toutes les pâtes étudiées dans ce travail sont des pâtes industrielles. Leurs noms font tous référence à des essences (peuplier, eucalyptus, acacia, pin radiaire...), seule la pâte dénommée pin du Sud est un mélange de diverses variétés de pins du sud des États-Unis.

Pour simuler la structure du papier en trois dimensions, il faut pouvoir simuler une fibre et donc connaître avec précision ses dimensions. C'est dans ce but qu'une étude sur la morphologie des fibres a été menée, sur les pâtes industrielles choisies.

1.3.1 Choix des paramètres morphologiques prépondérants

L'étude présentée, nommée "simulation 3D de la structure d'un matelas fibreux en vue de prédire ses propriétés physiques", a pour objectif premier de simuler en trois dimensions, une structure qui se rapproche le plus possible de la structure du papier et, plus précisément, de la structure d'une formette, papier de laboratoire dont le procédé d'obtention sera décrit dans le chapitre suivant. Pour cela, les éléments qui constituent cette structure doivent être caractérisés et discrétisés précisément. Au vu des travaux précédents, Wang [12] et Barratte [13], et des possibilités de mesures morphologiques des fibres, le choix des paramètres morphologiques se limite à la longueur, la largeur et l'épaisseur de paroi de chaque fibre, la courbure des fibres pouvant aussi être prise en compte. Certains paramètres comme les ponctuations, la présence de défauts (coude, vrille, etc.), l'orientation des micro-fibrilles de la paroi secondaire, la présence de fibrilles en partie décrochées de la fibre ne sont pas représentés pour cause d'une trop grande difficulté de mesure ou de limites informatiques (mémoire et temps de calcul).

Il est important de remarquer que le premier objectif de la simulation est de créer une structure virtuelle la plus proche possible d'une structure réelle, validée par les paramètres de contexture comme la masse volumique, la porosité ou l'épaisseur de la structure. Pour la réalisation de cet objectif, les paramètres morphologiques de petite échelle (ponctuation, fibrilles, etc.) n'ont que peu d'influence. Le choix des paramètres morphologiques de taille supérieure (longueur, largeur, épaisseur) pour le développement d'une première simulation s'appuie aussi sur ce constat.

La simulation de la structure d'un papier nécessite de représenter des fibres sèches. Or les mesures morphologiques des fibres sont généralement réalisées en milieu aqueux. Une solution serait de déterminer une corrélation entre les dimensions sèches et humides, une autre est d'utiliser une méthode mesurant directement les dimensions sèches des fibres.

La pâte à papier est un ensemble d'éléments comprenant principalement les fibres cellulosiques et les fines. La simulation de la structure du papier commence par la simulation de la pâte. La volonté de prendre en compte toute l'hétérogénéité morphologique des

fibres pose un certain nombre de problèmes. L'idéal serait d'avoir un appareil de mesure automatique, fournissant la longueur, la largeur et l'épaisseur de la paroi de chaque fibre, ce qui actuellement n'existe pas. Pour atteindre l'objectif fixé, qui est de prédire la morphologie de chaque fibre d'une pâte donnée, une étude de corrélation entre les différentes dimensions d'une fibre a été menée pour déterminer s'il existe un lien entre longueur et largeur et entre largeur et épaisseur des fibres individuelles. La détermination du nombre de paramètres minimum pour la simulation d'une pâte permettra ainsi d'utiliser les données des appareils automatiques de mesures de la morphologie des fibres pour simuler en 3D des fibres représentatives de la population d'une pâte.

Ce chapitre présentera les méthodes permettant d'obtenir pour chaque fibre d'une pâte à papier les trois dimensions à l'état sec. Ces dimensions seront par la suite directement utilisées comme valeurs d'entrée de la simulation du réseau fibreux.

1.3.2 Mesure de la morphologie des fibres à partir des appareils automatiques

Les appareils de mesures automatique de la morphologie des fibres utilisent des capteurs optiques ou des caméras CCD pour déterminer la morphologie des fibres. Malheureusement aucun de ces appareils ne permet d'obtenir, pour chaque fibre mesurée, la longueur, la largeur et l'épaisseur de paroi. Certains, comme le Fiberlab [14], fournissent les distributions en fréquence des trois dimensions, d'autres comme le Morfi [15] et le Fibermaster ne mesurent pas l'épaisseur de paroi et fournissent des tableaux ou des graphiques donnant la répartition de la longueur et de la largeur des fibres. Dans le but de mettre en évidence une éventuelle corrélation entre la longueur et la largeur des fibres, plusieurs pâtes d'essences d'arbres différentes ont été testées avec l'appareil Morfi.

Mesures sur l'appareil Morfi

Après introduction d'une masse connue de l'échantillon à analyser, la pâte est diluée pour constituer une suspension de fibres qui est mise en circulation pour homogénéisation. La cellule de mesure est constituée d'une veine transparente de géométrie déterminée permettant l'écoulement de la suspension fibreuse et la prise d'images par une caméra haute résolution. Les images acquises sont analysées par un logiciel spécifique de traitement d'image basé sur des algorithmes de morphologie. Les données statistiques ainsi recueillies sont notamment les distributions en fréquence de la longueur et de la largeur des fibres (figures 1.12 et 1.13). L'appareil fournit un tableau représentant la fréquence des fibres dans les différentes classes de longueur et de largeur (tableau 1.4).

S'il existe une corrélation entre longueur et largeur de fibre, la moyenne et/ou l'écart type des distributions de largeur de fibre devraient évoluer en fonction des classes de longueur. En d'autres termes, il faut recueillir dans le tableau 1.4, les distributions en fréquence de la largeur des fibres (colonnes du tableau) pour chaque classe de longueur (ligne du tableau) et analyser les distributions. Pour rechercher une éventuelle variation, les histogrammes de distribution en fréquence des largeurs de fibres pour différentes classes de longueur a été tracé (figure 1.14) à partir des données recueillies dans le tableau 1.4.

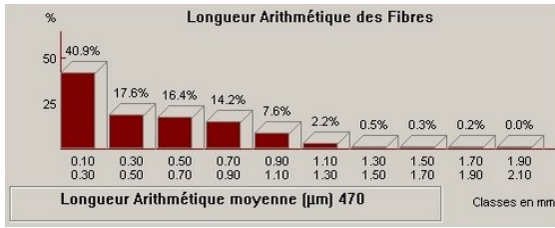


FIG. 1.12 – Distribution en fréquence de la longueur des fibres, pâte d'acacia.

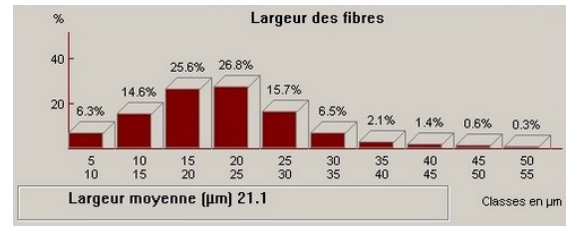


FIG. 1.13 – Distribution en fréquence de la largeur des fibres, pâte d'acacia.

Longueur (mm)	Repartition fibres en % (Non pondérée)										Niveau	
	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50		
1.90-2.10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1.70-1.90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1.50-1.70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1.30-1.50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
1.10-1.30	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	
0.90-1.10	0	1	2	3	1	0	0	0	0	0	0	
0.70-0.90	1	2	4	4	3	1	0	0	0	0	0	
0.50-0.70	1	2	5	5	3	1	0	0	0	0	0	
0.30-0.50	1	2	5	5	3	1	0	0	0	0	0	
0.10-0.30	4	7	9	9	6	3	1	1	0	0	0	
	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50		
	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55		

Nombre de fibres analysées (dern. analyse): 5038

Largeur (μm)

TAB. 1.4 – Répartition en fréquence de la longueur et de la largeur des fibres d'une pâte d'acacia.

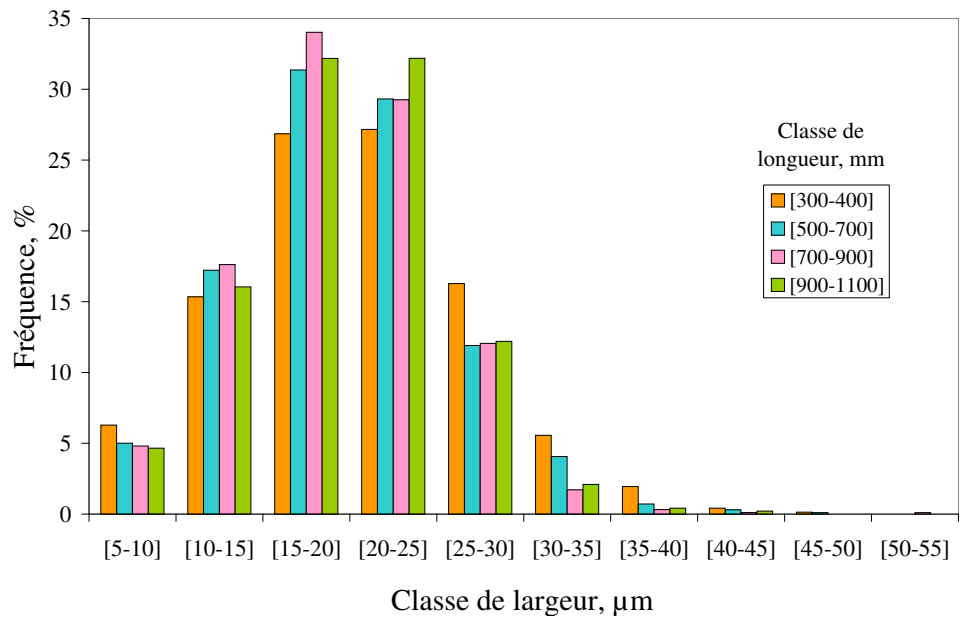


FIG. 1.14 – Distribution en fréquence de la largeur des fibres pour les différentes classes de longueur d'une pâte d'acacia.

La classe [100-300] micromètres n'est pas tracée car elle représente en partie les fines qui, comme indiqué précédemment, ont des dimensions différentes de celles des fibres. Les classes de longueur extrêmes ont aussi été supprimées car, par exemple pour l'acacia, le nombre de fibres de longueur supérieure à 1100 micromètres est trop faible pour tracer une distribution en fréquence représentative.

La lecture de cet histogramme permet de penser qu'il n'y a pas de corrélation entre la longueur et la largeur des fibres d'acacia car, quelle que soit la classe de longueur, la distribution de largeur semble être toujours la même. Une étude statistique permettra de dire si les distributions de largeur des fibres peuvent être assimilées à une seule distribution moyenne et, de plus, s'il s'agit d'une distribution en loi normale. Cette étude conduite sur différentes pâtes permettra de dire si, dans un cas général, l'hypothèse d'indépendance entre longueur et largeur des fibres est acceptable.

1.3.3 Corrélation entre la longueur et la largeur des fibres

Pour valider l'hypothèse de non corrélation entre la longueur et la largeur des fibres, la procédure est d'utiliser un test d'adéquation pour comparer la distribution de largeur des fibres par classe de longueur avec la distribution moyenne des largeurs de fibres. Si, pour toutes les distributions de largeurs de toutes les classes de longueurs, l'écart avec la distribution de largeur moyenne est assez faible pour être considérée comme seulement fonction du hasard, alors on peut valider l'hypothèse de non corrélation entre la longueur et la largeur des fibres.

Test d'adéquation

Les tests d'adéquation ont pour fonction de comparer une distribution répartie en fréquences observées avec une répartition théorique ou de comparer deux distributions réparties en fréquences observées [16]. Pour cette étude le test du χ^2 est adapté. On appelle χ^2 la somme des quotients des carrés des écarts par les effectifs théoriques (équation 1.1) :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n \cdot p_i - Xr)^2}{n \cdot p_i} \quad (1.1)$$

avec :

- p_i , probabilité théorique que la valeur X suivant la loi L prenne une valeur sur le domaine définissant la classe C_i .
- n , effectif total.
- Xr , nombre d'observations faites dans la classe C_i .

Intuitivement, il est logique de caractériser la divergence de résultats par la somme du carrés des écarts car la somme des écarts est bien sûr nulle. La distribution théorique de χ^2 a été étudiée par Pearson qui a établi des tables permettant de connaître la probabilité pour que χ^2 dépasse une valeur donnée, table tirée de l'équation 1.2 :

$$Prob(\chi^2 \leq \alpha^2) = \frac{\int_0^\alpha e^{-\frac{\alpha^2}{2}v-1} d\alpha}{\int_0^\alpha e^{-\frac{\alpha^2}{2}v-1} d\alpha} \quad (1.2)$$

où v est le nombre de degrés de liberté.

Pour que la loi de l'indicateur d'écart tende effectivement vers une loi du χ^2 , il faut que l'effectif Xr d'une classe Ci soit supérieur à 5%. Dans le cas contraire, il faudra procéder à un regroupement des classes jusqu'à ce que cette contrainte soit satisfaite.

Dans la pratique on admet que si la valeur de χ^2 a une probabilité au moins égale à 5% d'être dépassée, le hasard seul est responsable de l'écart entre les valeurs observées et les valeurs théoriques. Entre 5% et 1% on n'en tire aucune conclusion et l'on dit que les écarts constatés ne sont pas significatifs. Enfin si cette probabilité est inférieure à 1%, alors on est convenu d'admettre que le hasard n'est pas le seul responsable de l'écart. Par exemple, on peut lire dans les tables de Pearson que la probabilité théorique pour que χ^2 dépasse 7.82 est de 5%, pour un degré de liberté égal à 3. Lors d'une étude d'adéquation avec un degré de liberté de 3 on peut considérer que le hasard seul est responsable de l'écart si la valeur de χ^2 est inférieure à 7.82.

Analyse des données

Le graphique (figure 1.15) représente d'une manière différente les données de l'histogramme (figure 1.14), avec en plus la distribution moyenne de la largeur des fibres, pour permettre la comparaison visuelle entre les différentes distributions et la distribution moyenne.

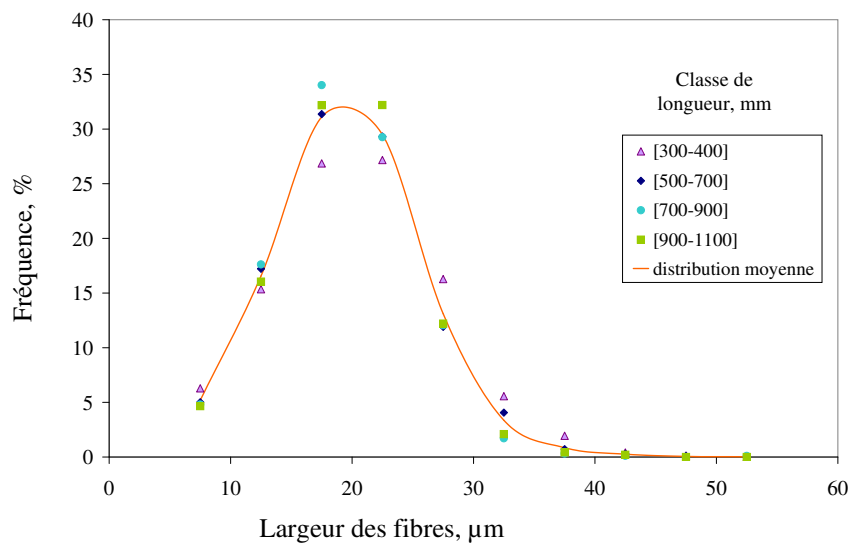


FIG. 1.15 – Distribution en fréquence de la largeur des fibres pour les différentes classes de longueur.

Ce sont les données de ce graphique qui ont été utilisées lors du test d'adéquation et qui ont permis la constitution du tableau 1.5. Par exemple pour la pâte d'acacia, le degré de liberté du test d'adéquation est de 4, car pour respecter les 5% minimum d'effectif par classe, certaines classes ont dû être fusionnées. En se référant aux tables de Pearson pour valider l'hypothèse selon laquelle le hasard seulement crée l'écart entre les distributions testées, la valeur du χ^2 doit être inférieure à 9.49.

Les données répertoriées dans les tableaux 1.5 et 1.6 représentent les valeurs du χ^2 pour les différentes distributions de largeur correspondantes aux classes de longueur, pour six pâtes. Ces valeurs sont toutes très inférieures à 9.49 dans le cas des feuillus (tableau 1.5) et 14.07 dans le cas des résineux (tableau 1.6). Il est donc possible de valider pour toutes ces pâtes l'hypothèse selon laquelle, pour toutes les classes de longueur, la distribution de largeur des fibres peut être assimilée à la distribution moyenne et donc valider la non corrélation entre la longueur et la largeur des fibres pour ces pâtes. Les résultats des tests de statistiques de non corrélation de toutes les pâtes utilisées dans cette étude ne sont pas tous présentés mais toutes les pâtes ont été testées et donnent toutes le même résultat : il n'y a pas de corrélation entre longueur et largeur de fibre.

Classe de longueur (μm)	[300-500]	[500-700]	[700-900]	[900-1100]
Pâte d'acacia	1.85	0.15	0.46	0.42
Pâte de chêne châtaignier	1.39	0.48	0.54	0.92
Pâte d'eucalyptus	1.54	1.20	0.20	2.10

Valeur limite de validité de l'hypothèse de non-corrélation : 9.49

TAB. 1.5 – Résultats du test d'adéquation (χ^2) pour les pâtes de feuillus.

Classe de longueur (μm)	[478-856]	[856-1233]	[1233-1611]	[1611-1989]	[1989-2367]	[2367-2744]
Pâte de cèdre rouge	6.62	1.92	3.89	2.26	6.12	4.24
Pâte d'épicéa	8.52	1.43	0.10	1.14	2.77	3.52
Pâte de pin	12.92	3.35	2.16	1.80	3.11	5.80

Valeur limite de validité de l'hypothèse de non-corrélation : 14.07

TAB. 1.6 – Résultats du test d'adéquation (χ^2) pour les pâtes de résineux.

Les paramètres morphologiques choisis en vue de simuler une structure fibreuse sont la longueur, la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres. L'appareil d'analyse automatique de la morphologie des fibres "Morfi" permet d'obtenir les distributions réparties en fréquence de la longueur et de la largeur de fibre. L'analyse statistique qui vient d'être faite montre que pour une pâte donnée on ne peut pas trouver de corrélation entre la longueur et la largeur des fibres. Cette conclusion permet d'affirmer que pour simuler en trois dimensions une fibre, il suffit de tirer au hasard les valeurs de longueur et de largeur des fibres dans leurs distributions respectives.

1.3.4 Corrélation entre la largeur et l'épaisseur des fibres

Les valeurs d'épaisseur de paroi et de largeur des fibres sont également nécessaire à la simulation. Il est important de définir s'il existe un lien entre la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres pour les raisons évoquées dans la partie précédente.

Malheureusement, aucun appareil automatique ne fournit de tableau équivalent à celui de l'appareil "Morfi" pour la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres. Dans le meilleur des cas, les appareils fournissent la distribution moyenne d'épaisseur de paroi. Pour valider ou réfuter l'hypothèse de corrélation entre la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres, seules les méthodes de mesures manuelles sont possibles.

Bien entendu, les méthodes manuelles ne permettent pas un nombre aussi important de mesures que les appareils automatiques. Il ne sera donc pas possible de comparer les distributions d'épaisseur de paroi pour différentes classes de largeur de fibre, d'autres méthodes seront utilisées pour valider ou réfuter la corrélation de ces deux dimensions.

Il existe notamment deux méthodes de mesures manuelles qui donnent accès à la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres. La première, la plus classique et la moins onéreuse, est l'utilisation d'un microscope optique. Cette méthode permet, pour chaque fibre observée, de déterminer sa largeur et son épaisseur de paroi (figure 1.16). La mesure s'effectue sur des fibres hydratées en suspension aqueuse et placées entre deux plaques de verre.

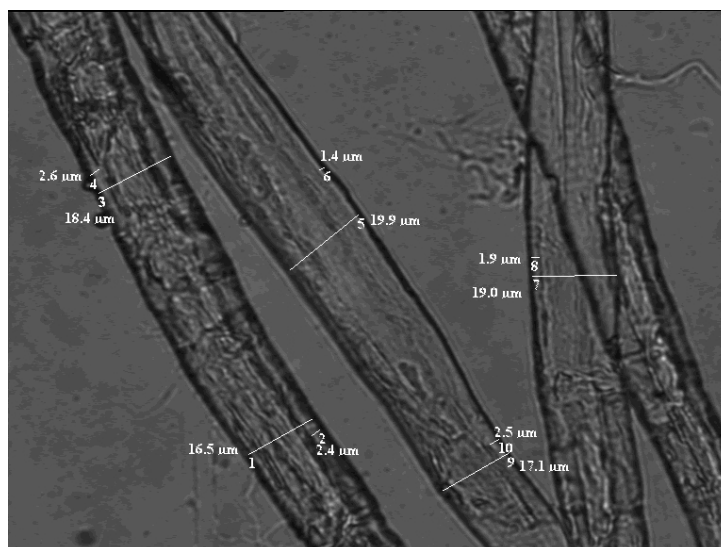


FIG. 1.16 – Mesure de la largeur et de l'épaisseur de paroi de fibres par la méthode manuelle utilisant le microscope optique.

La deuxième méthode, qui a été choisie lors de cette étude, est de visualiser des coupes de papier au microscope électronique à balayage (figure 1.17). Comme le montre la photographie, il est facile de mesurer avec un logiciel d'analyse d'image la largeur et l'épaisseur des fibres.

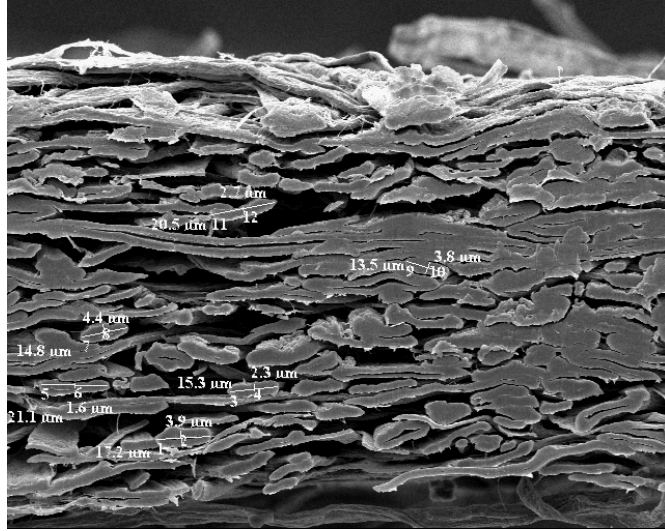


FIG. 1.17 – Mesure de la largeur et de l'épaisseur de paroi de fibres de la pâte d'acacia par la méthode utilisant le microscope électronique à balayage.

Une précaution doit toutefois être prise, ne mesurer que les fibres perpendiculaires à la coupe, sous peine de surestimer la largeur des fibres car l'erreur relative sur la largeur de la fibre, l , dépend de l'angle α de la fibre par rapport au plan de coupe :

$$\Delta l/l = 1/\cos(\alpha) - 1 \quad (1.3)$$

Un angle de 10° par rapport au plan de coupe entraîne une erreur de 1.54 % et un angle de 20° une erreur de 6.41%. Les mesures doivent donc d'être réalisées sur des fibres ayant un angle inférieur à 10° . L'avantage de cette méthode est l'obtention des valeurs de largeur et d'épaisseur de fibre directement à l'état sec. Cela permet d'éliminer une étape de la simulation pour passer des dimensions humides des fibres aux dimensions sèches.

Le graphique (figure 1.18) représente le nuage de points obtenus par la mesure simultanée de la largeur et de l'épaisseur de paroi des fibres d'une pâte d'acacia. L'étude de ce nuage de points par le calcul du coefficient de variation et le test de signification de ce coefficient de corrélation permet de valider ou de réfuter l'hypothèse de non corrélation entre la largeur et l'épaisseur des fibres [17], l'observation du graphique permet d'ores et déjà de dire que, s'il existe une corrélation, elle est relativement faible.

Pour ces tests statistiques, l'hypothèse de distribution gaussienne des variables doit être validée, cette validation sera présentée dans les paragraphes suivants. Le test du χ^2 sera utilisé en comparant les distributions mesurées à une distribution en loi gaussienne de même moyenne et de même écart type. Le coefficient de corrélation de Pearson, r , est utilisé pour déterminer la relation entre deux propriétés et se calcule comme suit :

$$r = \frac{cov(x, y)}{\sigma_x \cdot \sigma_y} \text{ avec } cov(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \quad (1.4)$$

où σ est l'écart-type, \bar{x} et \bar{y} sont les moyennes arithmétiques des variables x et y .

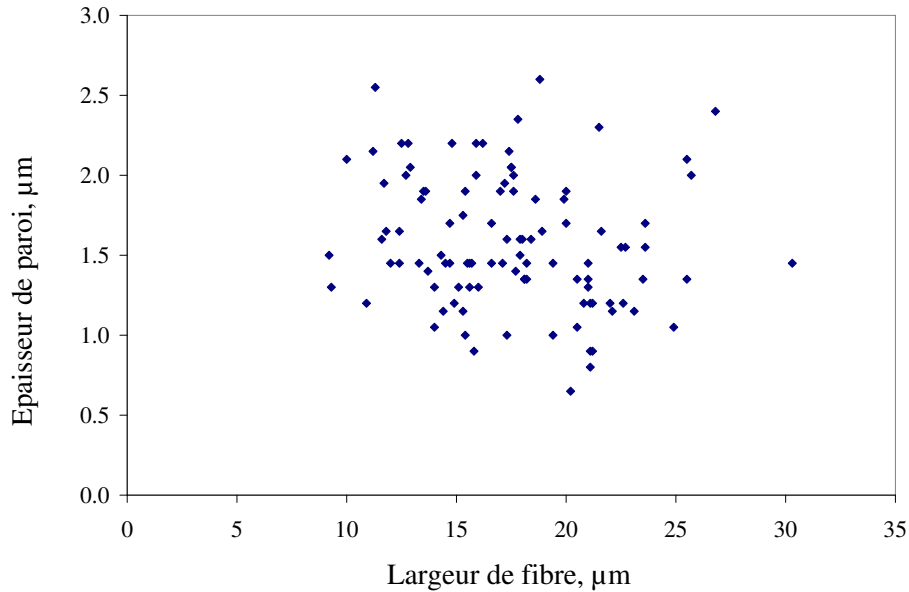


FIG. 1.18 – Nuage de points de la largeur et de l'épaisseur de paroi des fibres de la pâte d'acacia.

Le test de signification statistique du coefficient de corrélation permet dans ce cas de valider ou réfuter l'hypothèse selon laquelle il n'y a pas de corrélation entre les deux grandeurs. Il est défini comme suit :

$$t = r\sqrt{(n-2)/(1-r^2)} \quad (1.5)$$

avec n nombre d'échantillons. Si la valeur de t est inférieure à la valeur de t critique de la loi de Student, l'hypothèse de non-corrélation dans la population est acceptée.

Pour les 103 mesures réalisées sur la pâte d'acacia le coefficient de corrélation est de -0.18. Le coefficient de détermination (r^2) est de 0.032, soit 3% des variations de l'épaisseur de paroi pourraient être expliquées par les variations de la largeur. Même si le coefficient de corrélation a statistiquement un sens, l'évolution qu'il explique est très faible. La valeur de t du test de signification est de 1.83 et la valeur du t critique de la loi de Student est de 1.98, le coefficient de corrélation n'est donc pas significatif malgré le nombre important de mesures. On peut donc considérer qu'il n'y a pas de corrélation entre largeur et épaisseur de paroi des fibres d'acacia.

Le graphique (figure 1.19) présente les résultats obtenus pour une pâte de cèdre rouge. On peut tirer de ce nuage de points les mêmes conclusions que pour la pâte d'acacia, il n'y a pas de corrélation entre la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres. Cette hypothèse est validée par un coefficient de corrélation de -0.049 et un test de Student permettant de considérer la signification de ce coefficient de corrélation comme nulle. Bien entendu les 15 pâtes pures simulées dans cette étude ont été testées. Elles ne présentent pas de corrélation entre la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres.

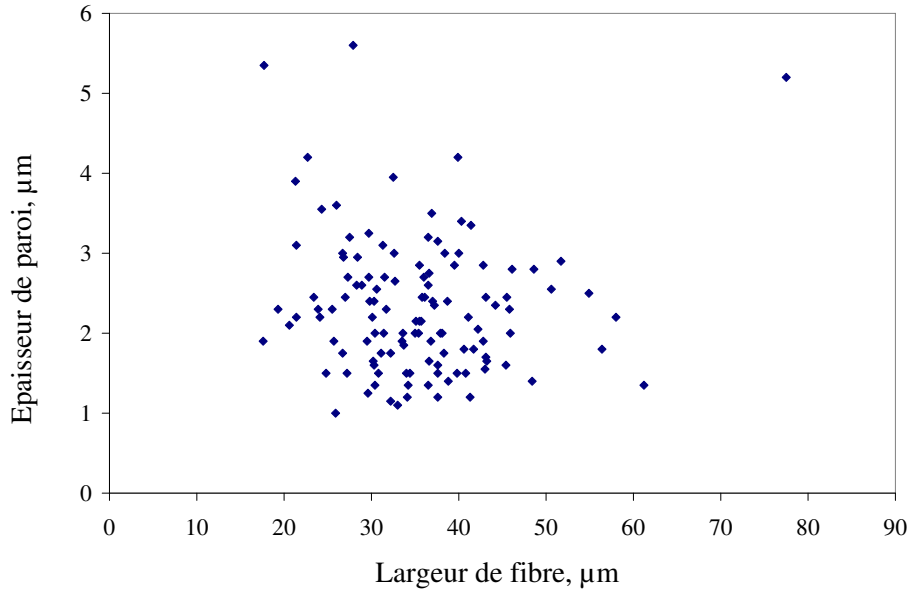


FIG. 1.19 – Nuage de points de la largeur et de l’épaisseur de paroi des fibres de la pâte de cèdre rouge.

1.3.5 Simulation en trois dimensions des fibres représentatives d’une pâte à papier

Les études de corrélation entre la longueur et la largeur des fibres et entre la largeur et l’épaisseur de paroi des fibres ont mis en évidence qu’il n’existe aucune corrélation entre ces trois grandeurs. La simulation des fibres représentatives d’une pâte se résume en un tirage aléatoire dans les trois distributions réparties en fréquence. Comme données d’entrée de la simulation de la structure du papier, on utilisera la distribution de longueur des fibres (fournie par l’appareil “Morfi”), figure 1.20, la moyenne et l’écart-type de la largeur et de l’épaisseur de paroi des fibres déterminées à partir d’observations au MEB.

Les deux distributions de largeur et d’épaisseur de paroi sont assimilée à des gaussiennes, adéquation validée par le test du χ^2 , (figures 1.21 et 1.22). Une étude plus approfondie pourrait donner une meilleure corrélation entre la loi gaussienne et la distribution réelle de largeur et d’épaisseur, en recherchant la moyenne et l’écart-type qui minimisent l’écart au sens des moindres carrés mais, comme cela sera présenté plus tard, les erreurs commises dans ce cas n’ont qu’une faible influence sur les résultats de la simulation. L’analyse des figures 1.20 à 1.22 permet de voir que la différence de morphologie entre les pâtes de feuillus et de résineux est largement plus grande que l’erreur commise.

Les graphiques des figures 1.23 et 1.24 représentent, pour la largeur et l’épaisseur de paroi des fibres, les mesures obtenues pour la méthode au MEB ainsi qu’une série de 100 fibres simulées. Pour la pâte d’acacia et la pâte de cèdre rouge, on peut remarquer dans les deux cas le bon recouvrement des nuages de points. L’utilisation de la moyenne et de l’écart-type comme valeur d’entrée pour la largeur et l’épaisseur des fibres est donc valable.

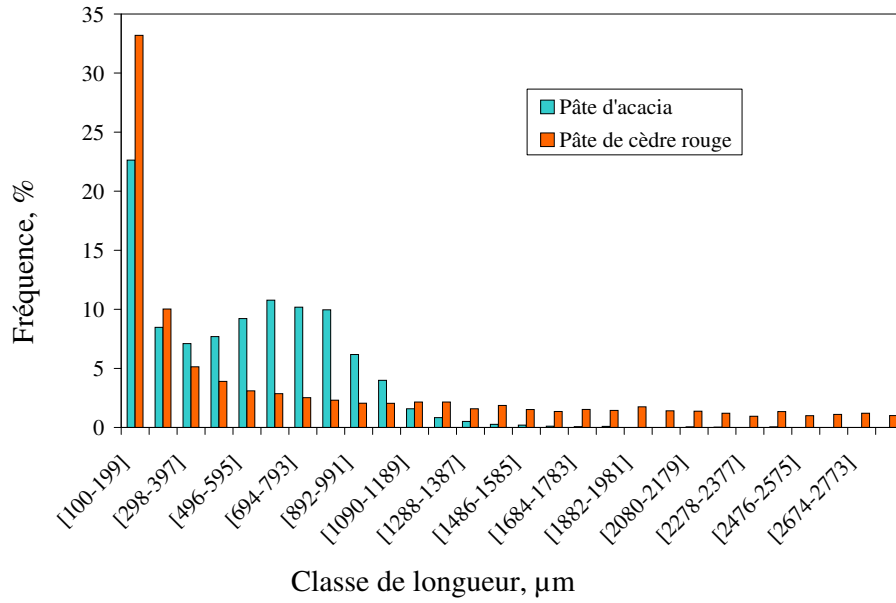
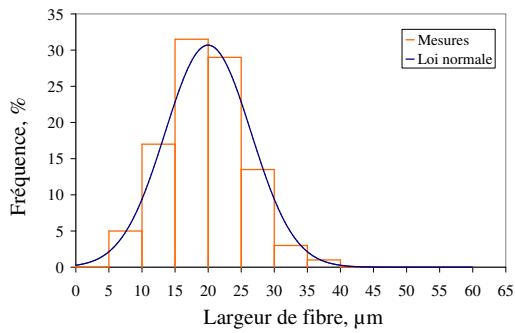
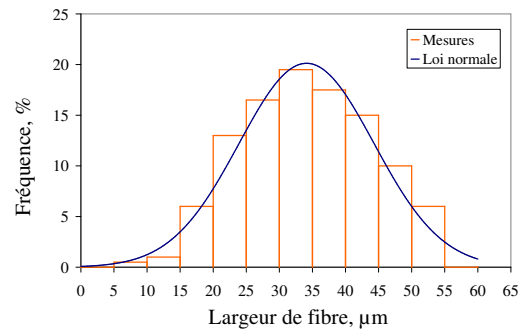


FIG. 1.20 – Répartition en fréquence des longueurs de fibres pour deux pâtes à papier.

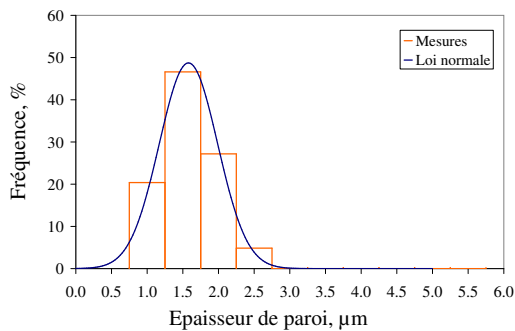


(a) Acacia

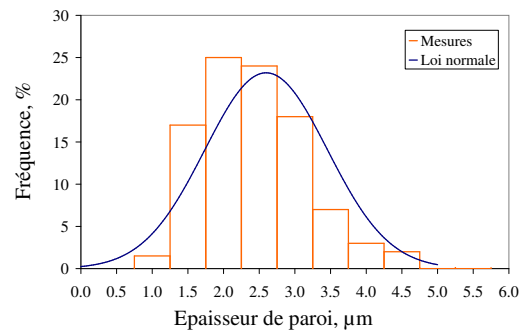


(b) Cèdre rouge

FIG. 1.21 – Distributions de la largeur des fibres de deux pâtes à papier comparées à une loi normale.



(a) Acacia



(b) Cèdre rouge

FIG. 1.22 – Distributions de l'épaisseur de paroi des fibres de deux pâtes à papier comparées à une loi normale.

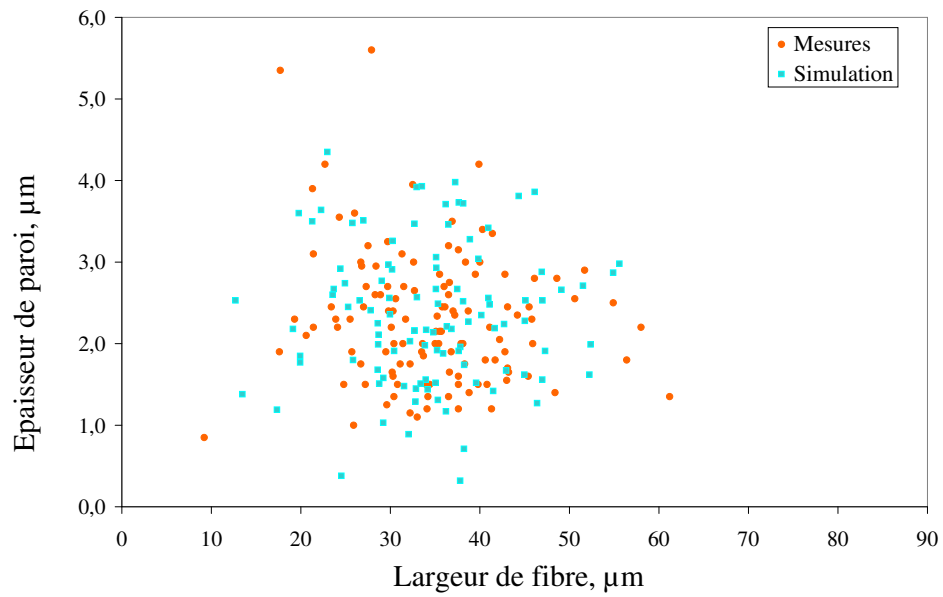


FIG. 1.23 – Comparaison entre les nuages de points des mesures et de la simulation de la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres d'acacia.

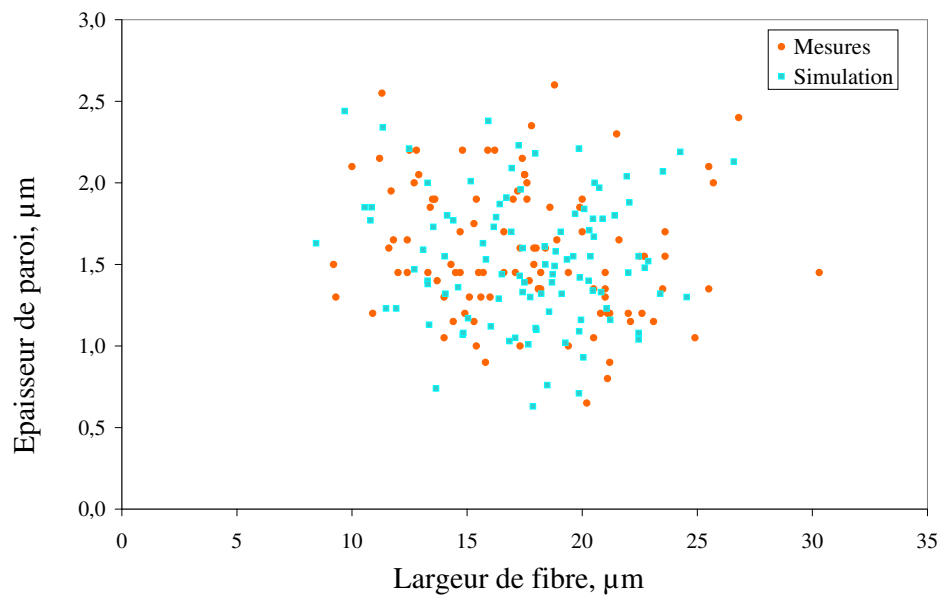


FIG. 1.24 – Comparaison entre les nuages de points des mesures et de la simulation de la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres de cèdre rouge.

Les données d'entrées de la simulation, comme la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres, sont obtenues grâce à une méthode qui fournit ces dimensions à l'état sec alors que la longueur des fibres est mesurée à l'état humide, mais il est couramment admis que lors du séchage le retrait en longueur des fibres est relativement faible. De plus les procédés de séchage d'un appareil à formette et souvent d'une machine à papier maintiennent la feuille pour réaliser ce que l'on appelle un séchage à retrait nul [18]. Il est donc possible dans ces conditions de supposer que la longueur des fibres sèches dans la feuille est très proche de la longueur humide mesurée.

1.4 Conclusion

Cette étude, qui est la simulation de la structure du papier en trois dimensions, nécessite au préalable une modélisation de la pâte à papier. Comme cela a été présenté dans ce chapitre, cette simulation n'est pas implicite. En effet une pâte à papier peut être définie par un grand nombre de facteurs comme son procédé d'obtention, (kraft, bisulfite, mécanique), procédé ayant une influence directe sur les fibres et donc le produit final. L'essence d'arbre utilisée est aussi un facteur prépondérant, car selon le type d'arbre (feuillu ou résineux) les dimensions des fibres peuvent varier du simple au triple. De la même manière que la taille des grains de sable influence un tas de sable, la taille des fibres influence la structure du papier. Les constituants secondaires de la pâte comme les fines et les vaisseaux présents initialement dans la pâte ou créés par le procédé ont aussi une influence à prendre en compte.

En plus de simuler une structure la plus proche possible de celle du papier, l'ambition de cette étude est de caractériser et quantifier l'influence de la morphologie des fibres sur les caractéristiques de cette structure comme la porosité, la densité, l'épaisseur, la longueur de rupture, la perméabilité, etc. Pour cela, la simulation d'une pâte se doit de prendre en compte l'hétérogénéité de la morphologie des fibres présentes. Les études de corrélations présentées dans ce chapitre ont permis de mettre en évidence que chaque dimension d'une fibre (longueur, largeur, épaisseur de paroi) était indépendante des autres.

La simulation de la structure du papier utilisera donc comme valeurs d'entrée les données mesurées par l'appareil "Morfi" pour la longueur des fibres, la moyenne et l'écart type pour la largeur et l'épaisseur de paroi des fibres, obtenues grâce aux images MEB.

Une partie du chapitre suivant, consacré à la simulation de la structure du papier, présentera les méthodes de simulation de la pâte à papier, c'est-à-dire les algorithmes utilisés pour simuler en trois dimensions un ensemble représentatif de fibres à partir des données d'entrées de la simulation. La problématique de la prise en compte des fines sera aussi développée.

Chapitre 2

Simulation de la structure fibreuse

2.1 Introduction

La simulation informatique s'est imposée depuis plusieurs années comme un outil indispensable à la pratique des sciences, trouvant sa place entre l'observation, la théorie et l'expérience. Loin d'être un substitut à l'expérience, la simulation informatique se révèle un outil précieux pour choisir quelle expérience il convient de réaliser. Le développement de modèles prédictifs permet une diminution considérable du nombre de mesures mais aussi l'obtention de paramètres difficilement mesurables.

Le papier qui, à l'échelle du centimètre semble très simple, révèle sa complexité à l'échelle du micromètre. Pour s'en convaincre, il suffit de voir l'importante diversité des papiers, tous ayant comme constituant principal des fibres cellulosiques. Actuellement, l'expérience est l'outil de développement principal pour la création ou l'amélioration de nouveaux papiers. Le nombre d'expériences est bien entendu important pour atteindre les objectifs fixés. Dans la plupart des cas même si les caractéristiques escomptées sont atteintes, il est impossible de dire s'il s'agit d'un optimum et très peu d'informations sur la microstructure sont recueillies.

L'utilisation de la simulation informatique en vue de prédire la structure du papier a pour objectif :

- de caractériser l'influence de la morphologie des fibres ;
- d'améliorer la compréhension de la microstructure ;
- d'obtenir des valeurs de paramètres difficilement mesurables.

L'influence de la morphologie des fibres sur la microstructure et sur les caractéristiques physiques du papier est assez mal connue. Même s'il existe des corrélations entre la longueur des fibres et la résistance à la traction du papier [19] [20], l'influence de la longueur des fibres sur la masse volumique apparente, la porosité, la perméabilité n'est pas clairement définie. De même, l'influence de la largeur et de l'épaisseur des fibres sur les différentes propriétés des papiers est assez mal connue.

La simulation en trois dimensions d'une structure virtuelle fournit une visualisation en temps réel de toutes les parties du media. En plus d'une validation qualitative, cette visualisation permet ainsi de mieux aborder les phénomènes liés au changement d'échelle de la dimension des fibres vers celle du papier.

Certains paramètres de la structure comme le RBA (relative bonded area ou aire de la surface liée), qui représente la valeur de la surface relative de contact entre les fibres, est une grandeur délicate à obtenir avec précision par des mesures conventionnelles [21] [22] [23], alors qu'une simulation de la microstructure peut fournir cette grandeur facilement. La détermination du RBA, qui est une grandeur pertinente dans l'étude de caractéristiques mécaniques du papier, sera présentée dans le chapitre suivant.

Le choix de la simulation informatique par rapport à l'utilisation d'un modèle statistique s'appuie particulièrement sur la volonté d'une compréhension de la structure. Un modèle statistique pourrait assez aisément prédire l'influence des dimensions des fibres sur les caractéristiques du papier mais les deux derniers objectifs de la simulation, une meilleure compréhension de la structure et la détermination de paramètres difficiles à mesurer, sont beaucoup plus délicats à obtenir avec un modèle statistique.

De plus, l'approche physique du problème permet l'utilisation de modèles déjà publiés dans la littérature pour la prédiction des caractéristiques physiques du papier, comme la perméabilité ou la longueur de rupture.

Toutes ces raisons expliquent le choix de la simulation informatique mais ce choix implique un certain nombre d'étapes pour arriver à l'objectif final :

- le développement ou l'utilisation de modèles prédisant les comportements physiques à chaque étape de la formation de la structure fibreuse ;
- l'introduction de ces modèles dans des algorithmes de calcul, pour permettre l'itération de ces modèles et ainsi la création de la structure virtuelle ;
- la validation de la simulation par la comparaison de différents paramètres mesurés et simulés (masse volumique apparente, rugosité) et pour différents cas comme l'introduction de fines ou de fibres de verre.

Ce chapitre reprendra dans l'ordre toutes ces étapes, du développement de la simulation à sa validation. Finalement, une partie présentant des prédictions de la simulation en fonction de la morphologie des fibres sera introduite en fin de chapitre.

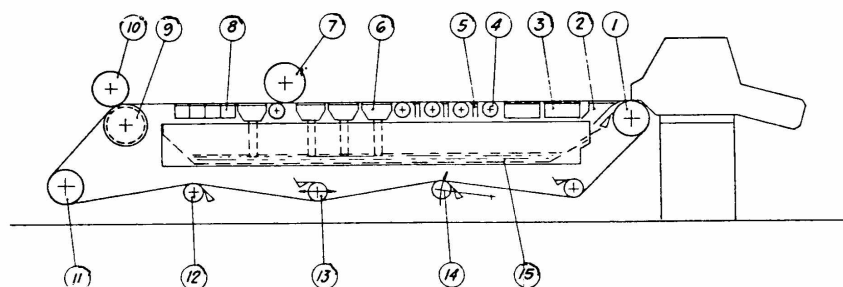
2.2 Fabrication du papier sur machine industrielle

Le procédé papetier peut se résumer en quatre étapes :

- la mise en suspension des fibres cellulosiques ;
- la formation de la structure fibreuse ;
- la consolidation de la structure par essorage (opération de pressage) ;
- la consolidation de la structure par évaporation (opération de séchage).

Comme on peut le remarquer, les trois dernières étapes de la fabrication du papier consistent à éliminer l'eau introduite lors de la première étape. Toute l'expertise du papetier consiste à éliminer cette eau tout en donnant au papier les caractéristiques désirées. Dans le domaine papetier, le terme "formation" définit à la fois le procédé par lequel les fibres sont distribuées dans un plan pour constituer une structure fibreuse et le résultat de cette distribution.

La formation est un processus dynamique de filtration d'une suspension fibreuse au travers d'une toile (figure 2.1). La caisse de tête située en amont de la toile de formation a pour rôle de fournir une suspension suffisamment défloculée pour obtenir une répartition homogène de la matière. C'est lors de l'étape de formation qu'une partie de l'aspect final du papier (épaisseur) est déterminée.



- | | | |
|---------------------|-----------------------------|----------------------------------|
| 1 - rouleau de tête | 6 - caisse aspirante humide | 11 - cylindre entraineur |
| 2 - marbre | 7 - rouleau égoutteur | 12 - rouleau de toile |
| 3 - racles (foils) | 8 - caisses aspirantes | 13 - rouleau guide |
| 4 - pontuseaux | 9 - cylindres aspirants | 14 - rouleau tendeur |
| 5 - déflecteurs | 10 - cylindre presseur | 15 - bacholles des eaux blanches |

FIG. 2.1 – Schéma de la section de formation.

Le pressage consiste à éliminer une grande partie de l'eau présente dans le matelas fibreux obtenu après l'étape de formation. Pour éliminer cette eau, le matelas fibreux est introduit dans l'entrefer de deux rouleaux en rotation sur lesquels s'exerce une pression importante (figure 2.2). En plus d'éliminer de l'eau, le pressage permet la consolidation de la structure fibreuse en créant un grand nombre de liaisons interfibres. La figure 2.3 montre l'augmentation du module d'élasticité et de la masse volumique apparente du papier avec l'augmentation de la pression exercée sur les presses.

Le séchage du papier consiste à éliminer l'eau qui reste dans le matelas fibreux après pressage. Cette opération consiste à faire circuler la feuille de papier sur des cylindres sècheurs chauffés avec de la vapeur (figure 2.4). Ce procédé de transfert de chaleur par conduction permet un séchage progressif sur toute la surface de contact feuille-cylindre tout en favorisant un bon aplat du papier. Le séchage du papier provoque un retrait de la structure. Lorsqu'on limite le retrait, des précontraintes sont créées dans la structure, ayant un impact direct sur les caractéristiques mécaniques [24].

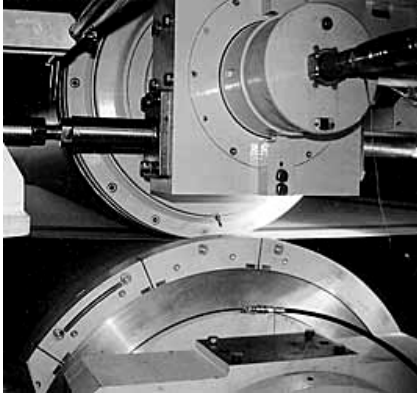


FIG. 2.2 – Vue d’une presse.

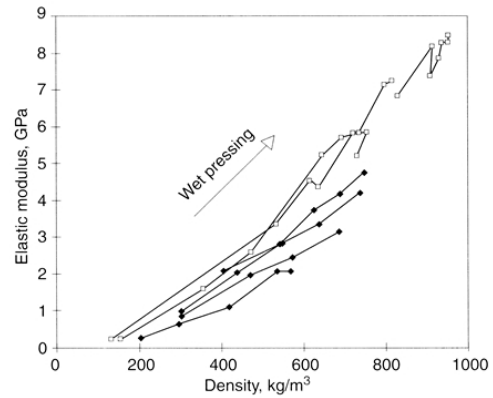


FIG. 2.3 – Influence du pressage humide sur le papier[3].

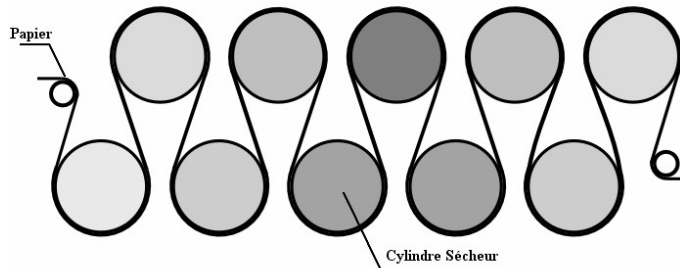


FIG. 2.4 – Schéma de la section de séchage.

Toutes les étapes de la formation du papier font appel à des phénomènes physiques complexes :

- écoulement tri phasiques ;
- consolidation de la structure ;
- changement de phase ;
- conduction thermique dans une structure tri ou quadri phasique.

Outre les phénomènes physiques intervenant directement dans la réalisation continue d’une feuille de papier, la conception et les caractéristiques de la machine à papier ont également leur influence propre. Ainsi les constructeurs proposent-ils des machines adaptées à chaque type de papier (impression écriture, emballage, sanitaire et domestique, etc.). Cependant, afin de tenter de prédire les diverses influences de la matière première et des adjuvants, les papetiers réalisent des feuilles tests sur des appareils de laboratoire dénommés formette, dans des conditions généralement normalisées. Afin de nous affranchir des caractéristiques propres des machines à papier, le choix de simuler la réalisation de formettes de laboratoire a été fait.

2.3 Fabrication du papier sur une formette de laboratoire

Un appareil à formette, figure 2.5, est constitué d'une chambre de remplissage positionnée au dessus d'un tamis. La chambre et le tamis sont conçus de manière à assurer une étanchéité lors du fonctionnement.

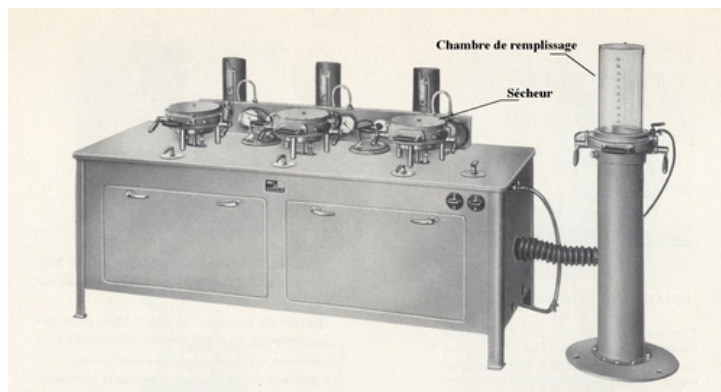


FIG. 2.5 – Appareil à formette.

La fabrication d'une formette peut être décomposée en plusieurs étapes [25]. Tout d'abord l'eau est introduite dans la chambre de remplissage jusqu'à 4 dm^3 . A ce moment, l'opérateur verse la suspension fibreuse préalablement préparée. L'eau monte dans la chambre jusqu'à atteindre 7 dm^3 . Le cycle automatique coupe l'eau et introduit des turbulences d'air pendant 5 secondes afin d'homogénéiser la suspension. A la suite d'une période de repos de quatre secondes, l'eau est aspirée vers le bas au travers du tamis ; les fibres restent en majorité à sa surface pour former un matelas fibreux relativement homogène. Ce matelas fibreux, pour donner une feuille de papier, est pressé sur le tamis sous l'action d'un rouleau de masse fixée. Ainsi deux mouvements de "va et vient" sont réalisés. Le séchage de la feuille se fait dans le sécheur, la température de séchage est de 93°C et la pression exercée sur la feuille pour éviter son retrait est d'environ un bar.

La prise en compte de ce procédé plutôt que celui du procédé industriel permet de soustraire de la simulation certains problèmes complexes comme la floculation des fibres dans la suspension. En effet, celle-ci n'a pas lieu du fait d'une importante dilution. Le pressage et le séchage de la structure, réalisées de manière normée et constante, permet de faire l'hypothèse que leurs actions sur la structure sont toujours les mêmes. Les différences de structure et de caractéristiques entre les formettes se retrouvent donc principalement fonction de la morphologie des fibres et des traitements comme le raffinage.

2.4 Méthodes d'étude de la structure du papier

L'étude de la structure du papier ne passe pas nécessairement par la simulation informatique. Le microscope électronique à balayage (MEB) permet de réaliser des images

de coupes ou de surfaces (figures 2.6, 2.7). Cette méthode souvent utilisée de manière qualitative permet de mettre en évidence l'effet de différents procédés comme le raffinage ou le couchage sur la structure.

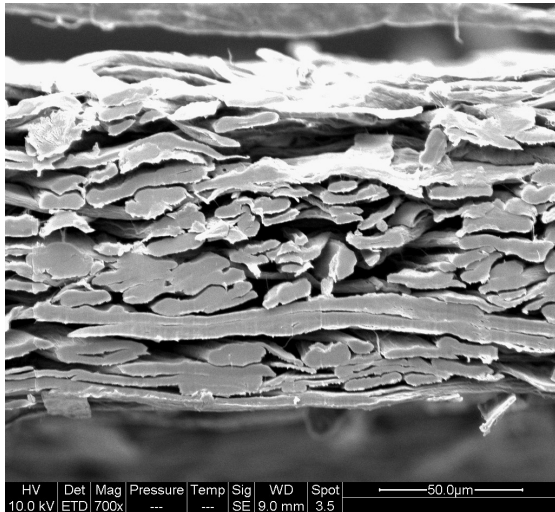


FIG. 2.6 – Image MEB d'une coupe transversale de papier, à base de pâte de feuillus.



FIG. 2.7 – Image MEB de la surface du même papier avec un angle d'observation de 60°.

D'autres méthodes permettent une analyse éventuellement quantitative plus fine de la structure tridimensionnelle du papier. Par exemple la microtomographie aux rayons X [26] [27] (figure 2.8) et l'inclusion dans la résine avec la réalisation de coupes sériées [28] sont des méthodes qui permettent d'obtenir une matrice en trois dimensions de la structure. Malheureusement, ces méthodes ne permettent que très difficilement d'isoler chaque fibre ou élément constituant la structure. Le lien entre la morphologie des fibres et la structure elle-même est donc délicat à faire.

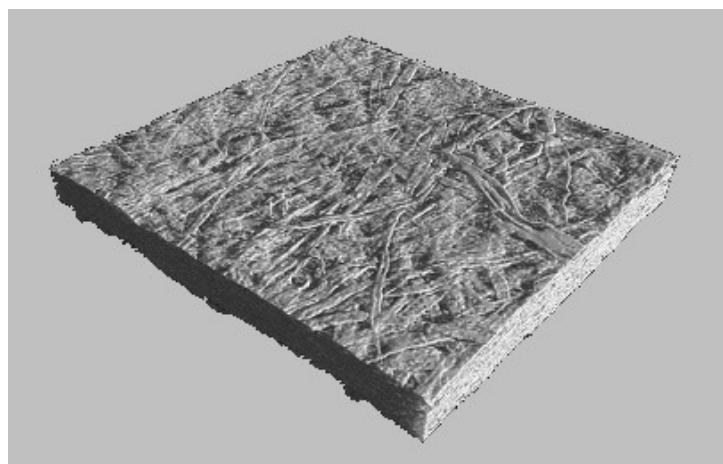


FIG. 2.8 – Image d'un papier buvard obtenue par microtomographie aux rayons X [29].

Ces méthodes coûteuses, lourdes ou laborieuses, sont réservées actuellement à la recherche fondamentale et nécessitent un investissement en temps et en argent important pour tirer des tendances quantitatives pertinentes. La simulation informatique révèle un de ses intérêts dans cette problématique. Elle ne se substitue pas à l'expérience mais peut être un outil précieux pour une meilleure analyse et une meilleure compréhension de la structure, en orientant le choix des expériences à réaliser. De plus, le développement d'un modèle prédictif permet d'envisager une optimisation de la structure en fonction des caractéristiques désirées.

2.5 Revue des précédentes simulations

Le choix de simuler des réseaux fibreux pour mieux comprendre leur structure a débuté en 1960 avec Corte et Kallmes [30] [31]. Le développement du premier modèle en deux dimensions (figure 2.9), son étude statistique et sa comparaison avec de réelles feuilles de papier grâce à des mesures microscopiques ont permis d'améliorer la compréhension de la formation aléatoire du papier et plus spécialement des formettes. Selon ces travaux, la position de dépôt des fibres n'est ni fonction de leur position dans la suspension par rapport aux autres, ni de l'écoulement au travers de la structure qui se forme.



FIG. 2.9 – Image d'un réseau 2D, avec une formation aléatoire.

Contrairement à l'hypothèse d'un dépôt aléatoire des fibres, Norman et Görres [32] [33] soutiennent l'idée d'une "auto-cicatrisation" de la feuille de papier générée par les forces d'égouttage. En opposition à un dépôt aléatoire des fibres, l'idée d'auto-cicatrisation considère que les fibres, lors de leur dépôt à la surface de la structure en formation, sont attirées par les courants et viennent recouvrir les pores les plus grands de la structure. Ce dilemme n'a toujours pas été tranché, d'autant plus que d'autres phénomènes comme la percolation et la floculation [34] viennent complexifier le problème.

La structure du papier n'est pas seulement fonction de la formation, bien qu'à l'échelle du centimètre le papier semble n'avoir que deux dimensions. Son épaisseur est un paramètre important dont dépendent, à grammage constant, la porosité et les caractéristiques mécaniques comme la rigidité. Une approche précise de la structure du papier par simulation nécessite donc de tenir compte de la troisième dimension. Les limitations liées à la puissance de calcul informatique ont reculé la création du premier vrai modèle en 3D jusqu'en 1994, où Niskanen [35] [36] simule la structure d'un réseau, plus ou moins poreux en fonction de la flexibilité des fibres. Malheureusement, les fibres de ce modèle sont toutes identiques et se croisent perpendiculairement (figures 2.10 et 2.11) ce qui ne correspond pas à la réalité.

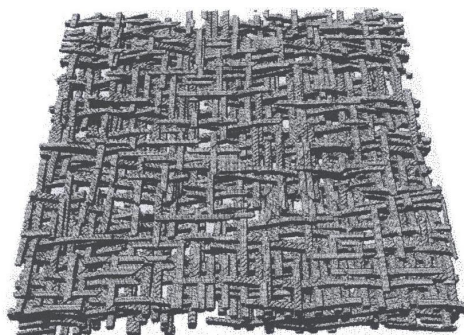


FIG. 2.10 – Image de la simulation développée par Niskanen.

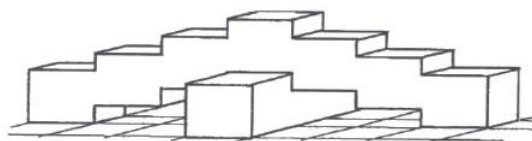


FIG. 2.11 – Conformation d'une fibre dans la simulation développée par Niskanen.

En 1998, Wang et Shaler [12] furent les premiers à développer un modèle en trois dimensions tentant de prendre en compte la morphologie des fibres. Modélisées comme des cylindres rigides, les fibres sont déposées aléatoirement sur une surface plane (figure 2.12). La déformation des fibres n'étant pas simulée, ce modèle accepte une importante interpénétration des objets pour atteindre les valeurs de masse volumique désirées. En 2001, Barratte [37] développe aussi un modèle en 3 dimensions simulant la déformation des fibres (figure 2.13). Malheureusement, ni le modèle de Barratte, ni celui de Wang ne furent validés par des mesures réelles.

D'autres modèles de structures fibreuses en trois dimensions [38] [39] furent dédiés à d'autres matériaux à base de fibres cellulosiques (panneaux de fibres, pâte Fluff). Bien entendu les procédés sont différents et, donc, les modèles développés aussi mais les méthodes de simulation restent proches et il est intéressant de s'en inspirer pour le choix des moyens informatiques et des méthodes de simulation utilisés.



FIG. 2.12 – Image de la simulation développée par Wang.



FIG. 2.13 – Image de la simulation développée par Barratte.

2.6 Modèle et simulation

A ce stade du document, un rappel de ce qu’est un modèle et une simulation numérique paraît nécessaire. La simulation numérique a pris toute son ampleur avec l’avènement de l’informatique. Loin d’être un substitut à l’expérience, la simulation informatique se révèle utile pour le choix des expériences qu’il convient de réaliser, elle permet donc un gain de temps et d’argent. Désormais la simulation atteint le stade d’expérimentation virtuelle.

Un modèle est une simplification du monde, il explique un phénomène avec un certain nombre d’hypothèses et de règles. A ce titre, le plan du métro de Paris est un très bon modèle, il ne tient compte ni de la taille du métro, ni de sa profondeur, ni même de sa vitesse, mais permet de dire aisément que si l’on prend cette entrée et que l’on suit ce chemin, on arrivera à cette sortie.

Aucun modèle ne rend compte de la totalité des phénomènes, il répond à des phénomènes précis dans des conditions précises, avec une précision donnée. Si, en plus du cheminement on désire avec le plan du métro connaître le temps de parcours, alors de nouveaux phénomènes comme le temps moyen entre deux stations ou la vitesse du métro devront être pris en compte.

Un modèle n’est ni vrai ni faux, il fournit des valeurs plus ou moins précises dans des domaines plus ou moins étendus. Un bon modèle se doit d’être prédictif, c’est-à-dire qu’il doit pouvoir prévoir dans un certain domaine plus ou moins étendu les résultats d’une expérience.

La construction du modèle physique simulant une structure fibreuse en trois dimensions s’appuie sur le “diagramme de construction d’un modèle” représenté figure 2.14. Les paragraphes suivants s’efforceront de reprendre l’une après l’autre chaque étape de ce diagramme. Une attention particulière sera apportée aux deux dernières étapes : la construction du modèle et l’interrogation du modèle.

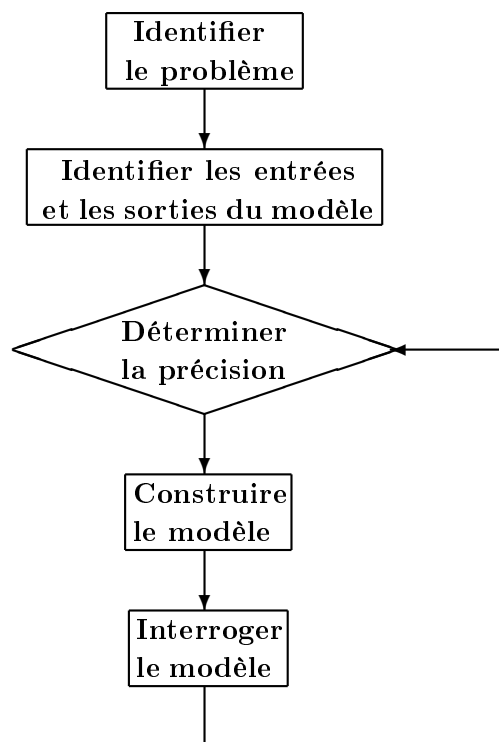


FIG. 2.14 – Diagramme de construction d’un modèle.

2.6.1 Identification du problème

L’objectif est de développer un outil qui permette de simuler une structure fibreuse et de la caractériser en fonction de la morphologie des éléments qui la constituent. Deux étapes sont nécessaires au développement de cet outil. La première étape est la caractérisation morphologique des fibres (cf. chapitre 1). La deuxième étape est la modélisation du procédé de fabrication du matelas fibreux. Dans ces conditions le choix de l’appareil à formette a été fait car certains phénomènes comme le pressage et le séchage sont gardés constants, ce qui simplifie la prise en compte de ces opérations. L’autre avantage de cet appareil est une grande simplicité d’utilisation pour la réalisation des échantillons nécessaires à la validation de la simulation. De plus notre choix s’est porté sur l’appareil à formette car lors de développement de nouveaux papiers c’est l’un des appareils les plus utilisés.

2.6.2 Choix des outils informatiques

Le choix des moyens informatiques fut aussi pris en compte dès le début du projet. Il s’est fait entre facilité de développement et performance. Le temps de calcul étant un facteur important pour des raisons d’application industrielle, le langage C^{++} a été choisi pour ses performances. La visualisation en trois dimensions nécessaire à une validation qualitative de la structure est obtenue grâce à la bibliothèque graphique VTK [40] [41] qui permet la visualisation de la structure virtuelle mais n’intervient en rien lors des calculs.

2.7 Identification des entrées et des sorties du modèle

2.7.1 Les entrées

Le premier chapitre de ce document est consacré à la caractérisation et la détermination des paramètres permettant de représenter fidèlement la morphologie des fibres présentes dans une pâte à papier. Ces paramètres ont été identifiés et serviront directement de données d'entrée de la simulation. Il s'agit :

- de la distribution répartie en fréquence de longueur des fibres ;
- de l'écart type et de la moyenne de la largeur et de l'épaisseur de paroi des fibres.

Un autre paramètre d'entrée qui sera développé et dont la valeur sera fixée dans une des parties suivantes de ce chapitre est l'aire de la surface du réseau simulé. La dernière entrée caractérise un objectif pour la simulation, comme le nombre de fibres ou le grammage final (masse surfacique).

2.7.2 Les sorties

Les sorties de la simulation sont, dans un premier temps, les caractéristiques géométriques de la structure, l'épaisseur, la masse volumique apparente, la porosité, la rugosité, la taille des pores, le RBA, l'anisotropie de la structure (plan XY, XZ, YZ). Dans un deuxième temps, l'application de modèles physiques sur la structure virtuelle permettra de prédire des grandeurs comme la longueur de rupture et la perméabilité qui font l'objet des chapitres 3 et 4.

2.7.3 Détermination de la précision

D'un point de vue industriel, la simulation doit être assez précise pour pouvoir différencier l'influence des fibres de différentes essences d'arbres pour, dans le futur, envisager une optimisation des caractéristiques de la structure par mélange de différentes essences. En plus de la précision de la simulation, d'autres erreurs doivent être prises en compte dans ce projet, notamment celles engendrées par chaque changement d'échelle. Les pâtes simulées proviennent de productions industrielles (échelle : tonne, mètre cube), la caractérisation de ces pâtes se fait sur des échantillons (échelle : gramme), la morphologie des fibres présentes dans la pâte est étudiée (échelle : micromètre) pour simuler une structure (échelle : millimètre), les résultats de la simulation s'extrapolent à la production de papier (échelle : tonne, mètre cube). Chaque changement d'échelle entraîne une erreur inéluctable qu'il est important de garder à l'esprit. Le problème du changement d'échelle est aussi celui volume élémentaire représentatif (VER), qui sera pris en compte.

Dans le cadre de la simulation informatique comparée à des essais en laboratoire, l'objectif d'une précision de 10% a été fixé.

2.8 Construction du modèle

Cette partie présente les méthodes et les hypothèses mises en place lors du développement de la simulation. Elle présente la manière dont les fibres sont définies en trois dimensions, déposées puis conformées à la surface de la structure. Les paragraphes suivants vont présenter étape par étape cette construction.

Le diagramme de la figure 2.15 représente l'algorithme principal du programme. En fonction des entrées de la simulation, les dimensions d'une nouvelle fibre sont choisies. Cette fibre est simulée en trois dimensions puis déposée et directement conformée à la surface du réseau. Ces trois opérations sont réitérées jusqu'à l'obtention d'un réseau virtuel au grammage désiré.

Bien entendu, lors du procédé de fabrication d'une formette toutes les fibres sont déposées pour ensuite être pressées. Mais pour éviter la simulation de phénomènes complexes liés au pressage de toute la structure, le choix de déformer directement et individuellement chaque fibre a été fait.

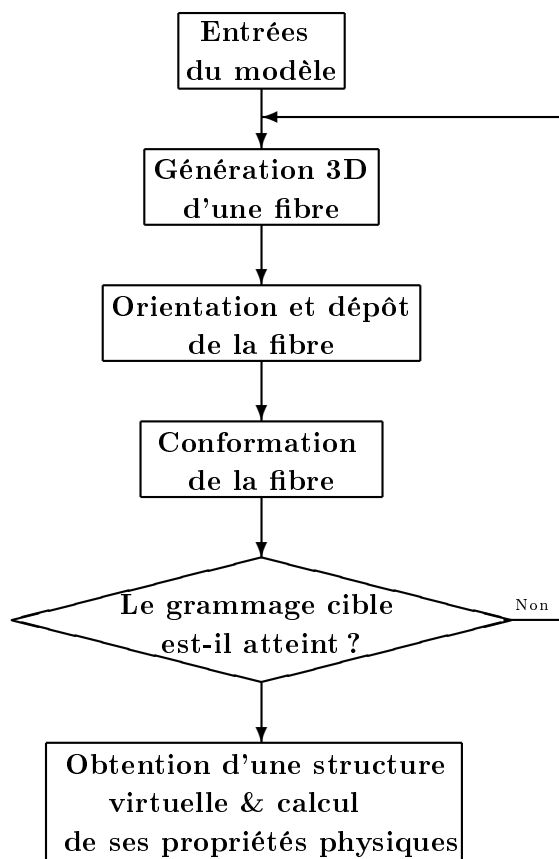


FIG. 2.15 – Algorithme principal de la simulation.

2.8.1 Simulation d'une fibre

La première étape de la simulation d'une fibre est la détermination de ses dimensions. La longueur de la fibre est tirée aléatoirement dans les classes de la distribution en fréquence de longueur. La largeur et l'épaisseur de paroi de la fibre sont aléatoirement tirées dans une distribution normale (cf. chapitre 1) en utilisant la méthode de Box-Muller [42].

Une fois ses dimensions déterminées, la fibre est maillée. Cette étape sert à sa représentation graphique mais aussi, et surtout, à son positionnement dans la structure. Un maillage suffisant est nécessaire pour donner à la fibre une forme la plus proche possible de la réalité. Par ailleurs, un maillage trop important augmenterait le temps de calcul pour un gain de précision du modèle négligeable. Une problématique de ce travail se trouve ici entre le temps de calcul et la précision de la simulation.

Comme on peut le voir sur la figure 2.16, la section de la fibre est définie par six points, pour donner un parallélépipède permettant une déformation dans la largeur. La figure 2.17 montre que la représentation par un hexagone de la section d'une fibre permet une définition suffisante pour un nombre de points réduit.

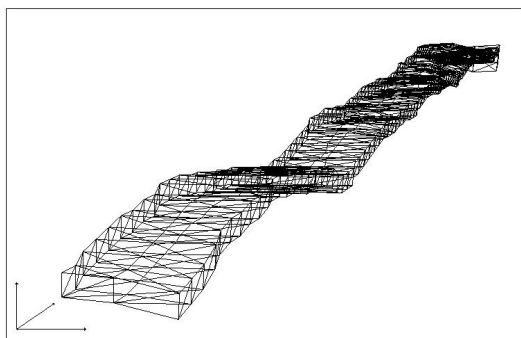


FIG. 2.16 – Discretisation d'une fibre.

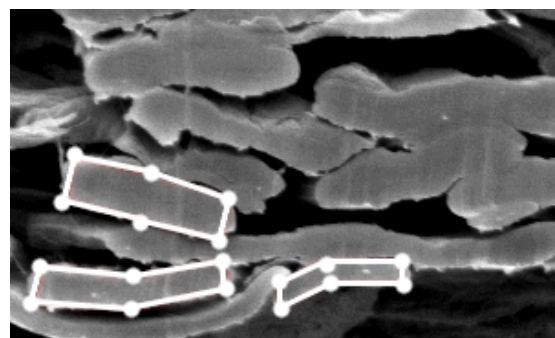


FIG. 2.17 – Coupe de fibres et superposition des 6 points de la section .

Dans un premier temps, les fibres simulées sont considérées comme totalement collap-sées (le lumen est fermé), ce qui est très souvent le cas pour des pâtes Kraft (figure 2.17). Cette hypothèse permet d'éviter la représentation d'un lumen donc un gain de temps de calcul. La masse volumique des fibres est prise égale à celle de la cellulose.

La discrétisation en longueur de la fibre est réalisée par des brins de $3 \mu\text{m}$ (figure 2.16). Il y a donc six points représentant la section, répétés tous les $3 \mu\text{m}$ le long de la fibre, soit 2000 points par millimètre de fibre. La distance de $3 \mu\text{m}$ a été choisie pour permettre à la fibre une déformation proche de la réalité et limiter au maximum les interpénétrations fibre-fibre. Les fibres les plus étroites ont une largeur aux environs de $10 \mu\text{m}$. La taille de brins de $3 \mu\text{m}$ est donc nécessaire dans ce cas pour permettre, comme le montre la figure 2.18, une déformation suffisamment précise de la fibre.

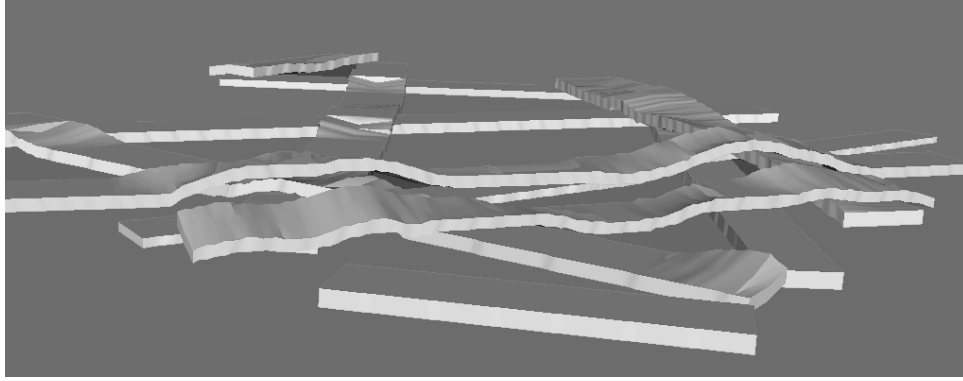


FIG. 2.18 – Image de la conformation de fibres discrétisées par des brins de $3 \mu\text{m}$.

2.8.2 Formation de la feuille

Dans le cas du procédé de fabrication d'une formette la dilution des fibres est suffisante pour limiter les phénomènes de percolation et floculation [34]. L'hypothèse que chaque fibre se dépose individuellement est donc acceptable, ce qui n'est pas le cas lors de la fabrication du papier à l'échelle industrielle.

Chaque fibre étant déposée individuellement, deux variables doivent être définies pour caractériser la formation :

- l'orientation de la fibre dans le plan XY ;
- la position du centre de gravité.

La fibre cellulosique isolée dans la suspension lors de la formation de la formette n'a bien entendu aucune orientation privilégiée [43]. Cette caractéristique se retrouve dans la structure par une orientation isotrope des fibres. Lors de la simulation de chaque nouvelle fibre, l'angle d'orientation de cette fibre dans le plan XY est donc déterminé de manière aléatoire.

En suivant l'idée de Corte et Kallmes, la position du centre de gravité des fibres est déterminée aléatoirement. Mais, pour limiter les effets de bord sur les côtés du réseau, l'aire de la surface sur laquelle les fibres se déposent est supérieure à celle de la structure (figure 2.19). Seule la partie de la fibre présente dans la surface d'analyse est gardée pour la création de la structure virtuelle (figure 2.20). Cette méthode permet de limiter les effets de bord.

2.8.3 Conformation

Lors de la consolidation du matelas fibreux, il est très difficile de connaître les forces qui s'appliquent en chaque point de la fibre. Par exemple, la pression exercée lors du pressage se décompose en une pression hydraulique (liée à la résistance à l'écoulement de l'eau) et une pression sur la structure. Pour éviter en première approche d'avoir à simuler ces phénomènes particulièrement complexes, l'idée est d'empiler les fibres les unes sur les

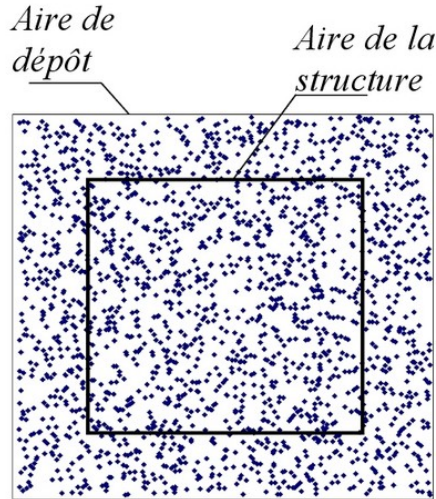


FIG. 2.19 – Positionnement aléatoire du centre de gravité de 2000 fibres générées.

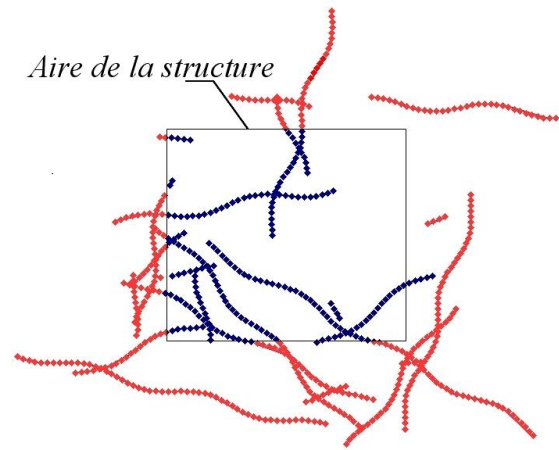


FIG. 2.20 – Découpe des fibres en fonction de la surface de simulation.

autres en les conformant à la surface de la structure de la manière la plus proche possible de ce que l'on peut voir sur les images en microscopie électronique à balayage. Comme, dans le cas du procédé de fabrication des formettes, la pression est constante, si la déformation est calibrée pour une pâte, il doit être possible de prédire les caractéristiques de la structure pour d'autres pâtes. C'est sur cette hypothèse que s'appuie, l'algorithme de conformation.

Initialement, les fibres sont déposées sur une surface plane puis, successivement, les unes sur les autres pour former le réseau fibreux. L'algorithme de conformation consiste à déposer chaque point représentant une partie de la fibre à la surface du réseau, comme si la capacité de déformation de la fibre était maximale. Ensuite, par plusieurs séries d'itérations, la forme finale est donnée à la fibre. Pour cela l'algorithme fait la différence entre deux angles θ_1 et θ_2 (figures 2.21 et 2.22). L'angle θ_1 est considéré comme l'angle de déformation mécanique d'une fibre sur une autre. Sa valeur, pour une fibre donnée, est donc supérieure à l'angle θ_2 qui représente la courbure d'une fibre sur les portions libres (c'est-à-dire sans contact avec d'autres fibres).

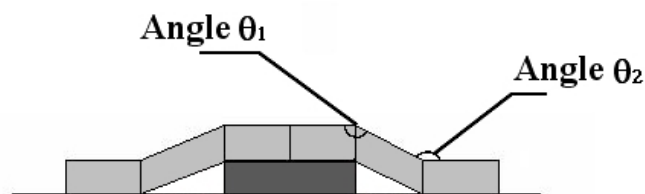


FIG. 2.21 – Angles θ_1 et θ_2 utilisés par l'algorithme de conformation.

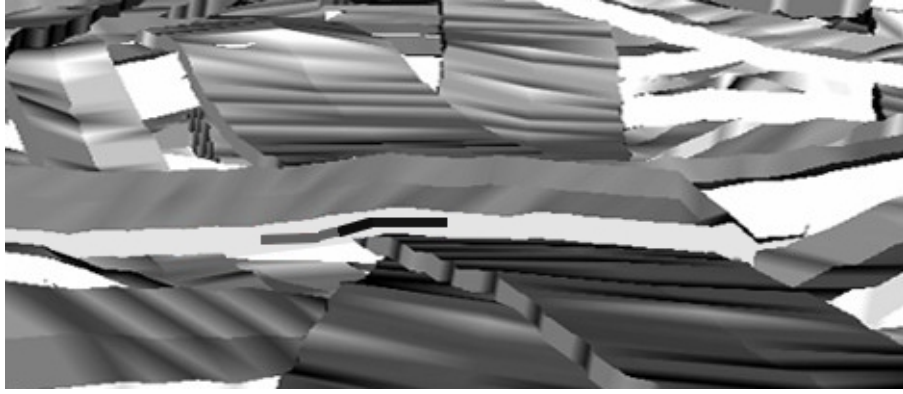


FIG. 2.22 – Fibres conformées les sur les autres (angles θ_1 en noir et θ_2 en gris).

Pour prendre en compte la rigidité de chaque fibre et les différencier entre elles, les angles θ_1 et θ_2 sont aussi calculés en fonction du moment d'inertie de la fibre, défini par $I = l \times ep^3/12$ où l est la largeur et ep l'épaisseur de la fibre. Bien entendu plus le moment d'inertie est important plus les angles se rapprochent de 180° .

Lors du dépôt, chaque nouvelle fibre vient se conformer à la surface de la structure. Après chaque conformation la matrice des points de la surface du réseau est incrémentée pour tenir compte de cette nouvelle fibre (figure 2.23). Cette matrice de surface est définie tous les micromètres ce qui signifie que la taille minimum d'une particule pouvant être simulée est de $1 \times 1 \times 1 \mu m^3$.

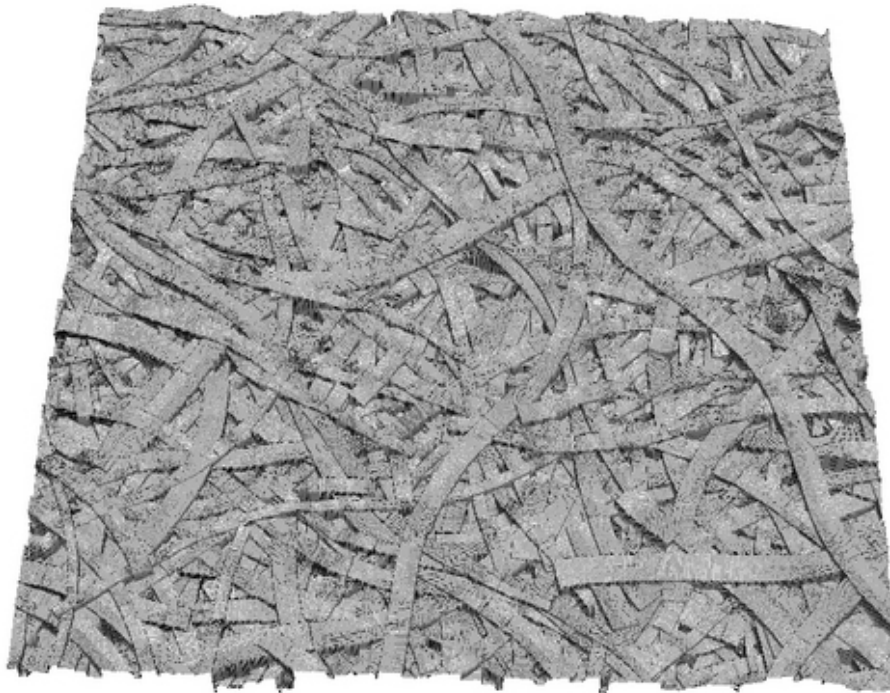


FIG. 2.23 – Matrice de la surface d'une simulation.

Cette précision importante permet d'envisager la simulation des charges minérales qui sont ajoutées à la suspension avant la formation de la feuille afin de modifier notamment les propriétés optiques des papiers. Les charges comme le carbonate de calcium, très utilisées en papeterie, ont des dimensions proches du micromètre. Elle est aussi nécessaire au bon positionnement des fibres, malheureusement une telle discrétisation est très gourmande en mémoire vive et limite la taille du réseau simulé à une surface inférieure à 1 cm^2 . La matrice de surface nécessaire pour les calculs est aussi une donnée de sortie de la simulation qui permet de caractériser la rugosité de la structure virtuelle.

2.8.4 Détermination des grandeurs géométriques

Plusieurs itérations de l'algorithme principal de la simulation permettent d'obtenir une structure fibreuse virtuelle dont les fibres sont représentées comme des coques creuses. Le passage de cette représentation virtuelle aux grandeurs géométriques comme le grammage, l'épaisseur, la masse volumique apparente, la porosité se fait, d'une part, par le calcul de la masse de chaque fibre et, d'autre part, par l'épaisseur de la structure virtuelle.

Le grammage, qui représente la masse du papier par unité de surface, est calculé après chaque dépôt d'une nouvelle fibre, la masse de la fibre étant déterminé grâce à son volume et à sa masse volumique prise comme étant égale à celle de la cellulose soit 1.54 kg/dm^3 (pâte Kraft blanchie avec une porosité intra fibre très faible).

Le grammage est souvent une donnée d'entrée de la simulation, c'est-à-dire que la simulation utilise la valeur seuil du grammage pour stopper l'ajout de nouvelles fibres.

La détermination de l'épaisseur de la structure est plus délicate car, en toute rigueur, l'épaisseur du matelas fibreux devrait être la distance entre le plan initial de dépôt et le point le plus haut de la structure mais la méthode expérimentale de mesure de l'épaisseur du papier par palpeur soumet l'échantillon de papier à une pression de 100 kPa sur une surface de 2 cm^2 , cette méthode de mesure entraîne donc une compression du matelas fibreux qui doit être prise en compte. Pour cela la valeur de l'épaisseur déterminée par la simulation a été définie comme étant la moyenne entre l'épaisseur maximum et l'épaisseur moyenne de la structure.

A partir du grammage, W , et de l'épaisseur, ep , la masse volumique apparente et la porosité, ϵ , peuvent être directement calculées (équations 2.1 et 2.2) :

$$\rho_{app} = \frac{W}{ep} \quad (2.1)$$

$$\epsilon = 1 - \frac{\rho_{app}}{\rho_{cellulose}} \quad (2.2)$$

où ρ_{app} est la masse volumique apparente de la structure et $\rho_{cellulose}$ est la masse volumique de la cellulose.

2.8.5 Détermination de la taille minimum du réseau

La taille du réseau est la dernière entrée de la simulation. Pour obtenir une bonne répétitivité de la simulation et tenir compte de l'hétérogénéité de la structure du papier et des effets de bord produits par la simulation, les structures simulées doivent avoir une taille suffisamment grande pour être représentative. Par ailleurs, des contraintes liées au temps de calcul nécessitent de déterminer la plus petite des tailles représentatives.

La figure 2.24 représente des prédictions de l'épaisseur de structures simulées en fonction de l'aire de leur surface plane. Son analyse montre que, pour obtenir une valeur stable de l'épaisseur du réseau fibreux, l'aire de la surface doit être supérieure à 4 mm^2 . Un tel matelas fibreux avec un grammage de 60 g/m^2 contient environ 4000 fibres, ce qui représente 2 millions de points calculés et demande un temps de calcul d'environ 5 minutes. Ces valeurs sont considérées comme raisonnables par rapport aux objectifs de performance et aux limites informatiques.

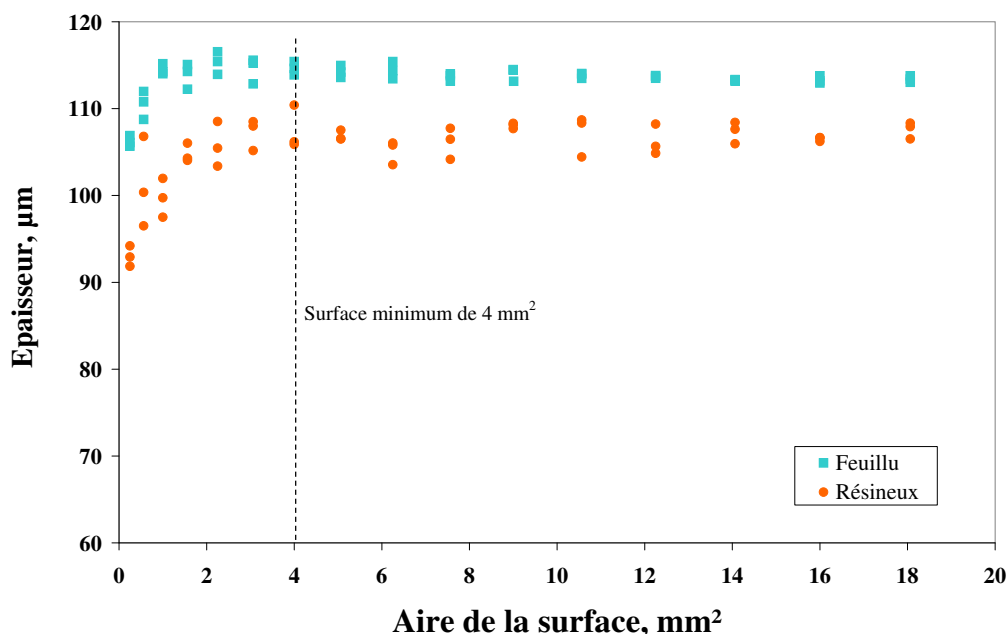


FIG. 2.24 – Influence de l'aire de la surface sur l'épaisseur du réseau pour la simulation d'une pâte de feuillu et d'une pâte de résineux.

2.8.6 Répétabilité du modèle

Comme ce fut indiqué précédemment, la simulation de la structure du papier utilise plusieurs variables contrôlées en partie par une composante aléatoire. Toutes les microstructures simulées sont donc différentes et il est très peu probable d'obtenir deux structures identiques même si les entrées de la simulation restent inchangées. Par ailleurs, pour des valeurs d'entrées constantes, les grandeurs géométriques moyennes comme la masse volumique apparente doivent rester constantes ou du moins être comprises dans

une plage de dispersion relativement restreinte. Trente réseaux de 4 pâtes différentes (soit 120 réseaux) ont été simulés dans le but de déterminer si la répétabilité des résultats était acceptable et si la morphologie des fibres avait une influence sur cette répétabilité ou non. Les réseaux simulés avaient une aire de 5.76 mm^2 et un grammage de 60 g/m^2 . Comme le montre le tableau 2.1 le plus grand coefficient de variation pour les masses volumiques apparentes des réseaux simulés est de 2.2%. Cette valeur est largement acceptable pour considérer les résultats de la simulation comme stables.

	Masse volumique apparente g/cm^3	Coefficient de variation %
Peuplier	0.52	1.08
Eucalyptus	0.49	0.83
Pin du sud	0.49	2.21
Pin radiaire	0.50	1.89

TAB. 2.1 – Valeurs de la masse volumique apparente et du coefficient de variation pour quatre pâtes différentes.

2.9 Interrogation du modèle

Un bon modèle doit être prédictif, c'est-à-dire qu'il doit permettre de prévoir dans une certaine mesure le résultat d'une expérience. Cette prédictibilité peut avoir un caractère qualitatif ou quantitatif selon que le modèle se contente de prévoir un certain comportement ou qu'il permette de prédire la valeur de telle ou telle grandeur mesurable.

La première validation du modèle présentée est une validation qualitative. La visualisation 3D du réseau permet d'obtenir des images qui peuvent être directement comparées avec des images MEB. Une validation quantitative des grandeurs comme la masse volumique apparente permettra, par la suite, de valider la simulation de la structure pour une large gamme de morphologies de fibres.

D'autres possibilités de validation du caractère prédictif de la structure seront présentées, comme l'influence de l'ajout de fines ou de fibres de verre dans la structure et la caractérisation de la topographie de surface.

2.9.1 Validation qualitative

La validation qualitative est importante car, même si elle ne compare pas des valeurs entre elles, elle permet de valider les ressemblances nécessaires pour aborder la validation quantitative. Car, si l'on simule une structure qui ne ressemble en rien à la structure réelle, il est inutile de comparer les grandeurs géométriques même si ces grandeurs sont proches.

Comme le montrent les deux images des figures 2.25 et 2.26, la forme des fibres simulées est très proche de la forme réelle des fibres. Hormis le fait que le MEB a une profondeur de champ beaucoup plus faible que la simulation 3D et donc produise des zones sombres que l'on ne retrouve pas sur l'image simulée, les deux structures peuvent être considérées comme très ressemblantes.

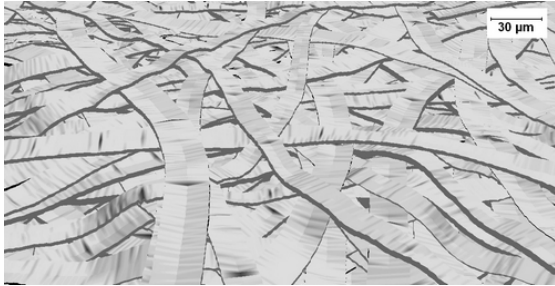


FIG. 2.25 – Image simulée de la surface d'une formette de feuillus.



FIG. 2.26 – Image de la surface d'une formette de feuillus obtenue au MEB.

Les figures 2.27 et 2.28 montrent des vues complètes de réseaux simulés, composés de fibres de pin. La taille du réseau est $2.5 \times 2.5 \text{ mm}^2$ et le grammage est de 60 g/m^2 . On peut constater la très grande ressemblance des réseaux avec une formette réelle.

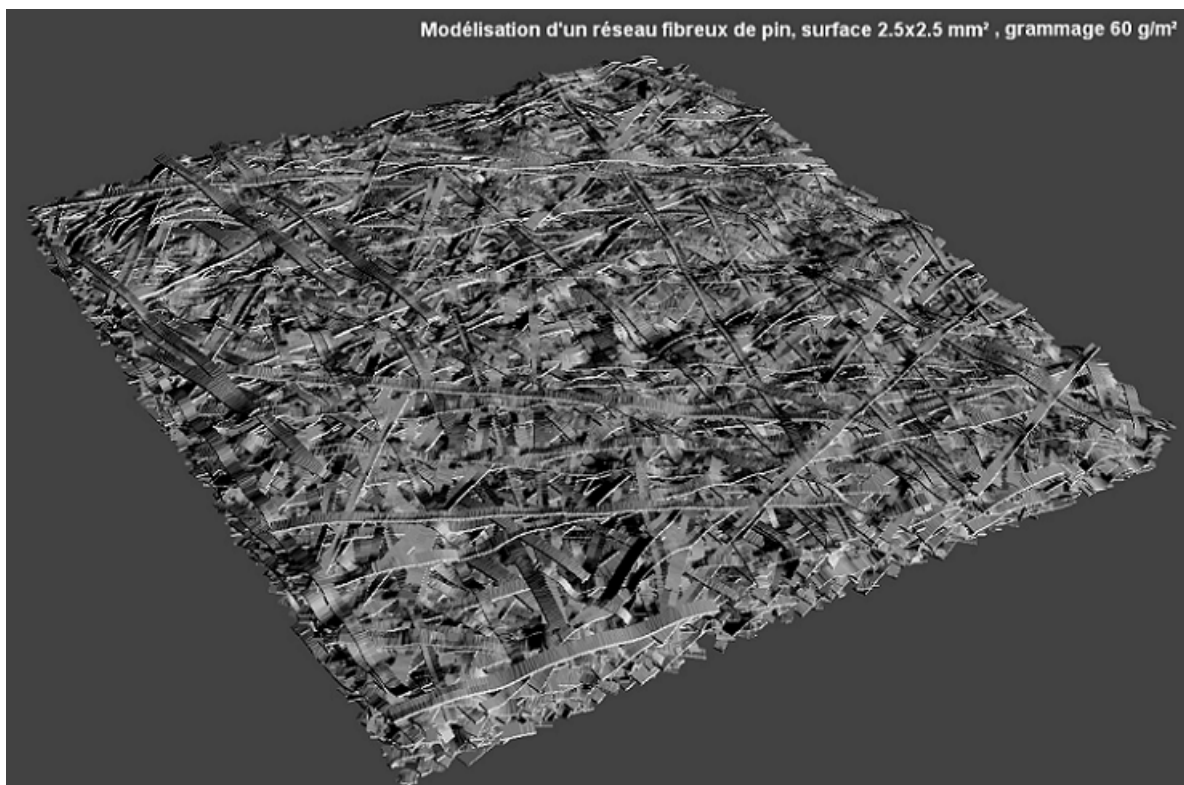


FIG. 2.27 – Vue d'un réseau simulé.

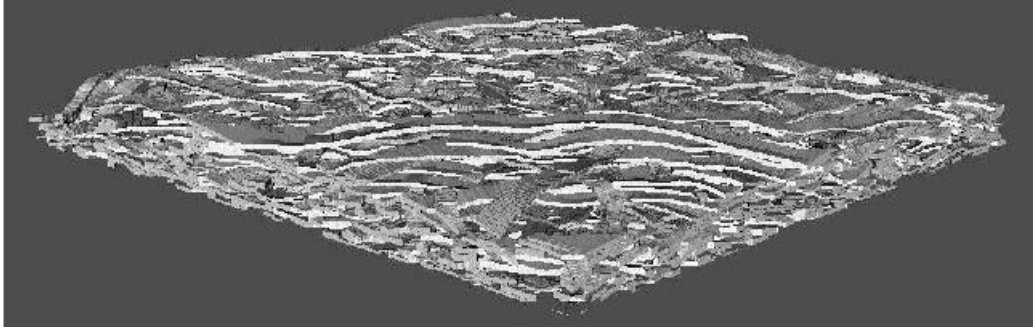


FIG. 2.28 – Vue d'un réseau simulé, avec vue des coupes transversales.

2.9.2 Validation des grandeurs géométriques

L'objectif de la simulation est de prédire l'influence de la morphologie des fibres sur la structure du réseau fibreux. Pour cela 15 pâtes Kraft blanchies de morphologies très différentes ont été testées. L'étude de la morphologie des fibres de ces 15 pâtes non raffinées a été réalisée avec les méthodes présentées dans le chapitre 1. Le tableau 2.2 présente les caractéristiques morphologiques moyennes mesurées pour chaque pâte.

	Longueur pondérée en longueur	Largeur		Épaisseur de fibre	
		Moyenne	Écart-type	Moyenne	Écart-type
Acacia n° 1	737	17.5	4.2	4.1	0.8
Acacia n° 2	757	17.2	3.4	3.9	1.6
Bouleau	891	21.2	4.9	4.7	1.7
Chêne	776	21.0	8.0	6.1	2.2
Chêne Châtaignier	709	20.4	4.5	4.7	1.5
Érable	763	19.0	8.0	3.9	2.2
Eucalyptus n° 1	783	19.1	4.2	4.5	1.6
Eucalyptus n° 2	812	18.0	3.5	4.5	2.1
Peuplier	766	22.8	5.2	4.6	1.6
Cèdre rouge	2003	35.2	9.2	4.7	1.6
Épicéa	1558	35.0	8.8	4.7	2.0
Pin radiaire	2214	34.5	12.8	7.1	2.5
Pin du sud	2056	37.9	11.5	6.5	2.4
Résineux mélange n° 1	1868	37.8	11.3	5.9	2.2
Résineux mélange n° 2	1925	33.6	9.2	4.6	1.6

TAB. 2.2 – Valeurs des caractéristiques morphologiques des fibres des quinze pâtes testées, exprimées en micromètres.

L’histogramme (figure 2.29) présente la comparaison des résultats entre la simulation et les valeurs expérimentales. Seule la comparaison du volume massique du papier est présentée mais, bien entendu, pour un grammage constant, les conclusions pour le volume massique seront analogues pour l’épaisseur ou la porosité du papier.

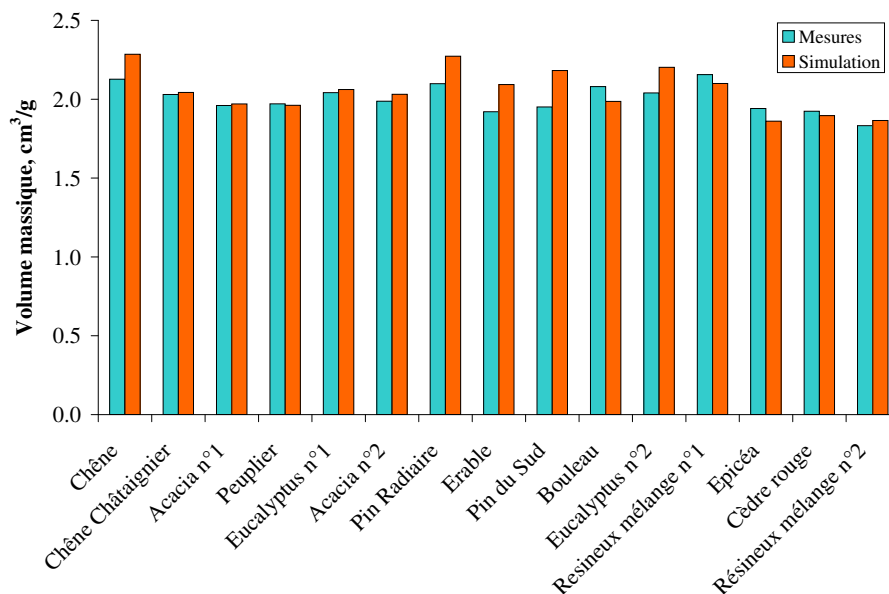


FIG. 2.29 – Histogramme comparant le volume massique de formettes réalisées avec différentes pâtes et les prédictions de la simulation.

Cet histogramme peut être analysé de plusieurs manières. Tout d’abord, un seuil d’erreur de 10% avait été fixé en vue de valider ou réfuter les résultats de la simulation. Au vu des résultats de l’histogramme, ce seuil n’est dépassé que dans le cas du Pin du sud, où il est de 11%. On peut donc conclure que la simulation est validée pour la prédiction de grandeurs de contexture.

Par ailleurs, la validation d’un modèle se fait aussi par sa capacité à décrire l’évolution d’une grandeur en fonction de différents paramètres. L’analyse du coefficient de corrélation entre les mesures et les simulations donne une valeur de 0.64 soit un (r^2) de 40 ; seulement 40% de la variation des grandeurs géométriques serait expliqué par la simulation. Cette valeur est relativement faible mais il est important de remarquer que si les grandeurs de contexture des formettes varient peu, 14% au maximum, les dimensions des fibres qui constituent les structures varient du simple au triple (tableau 2.2). Le fait que la simulation malgré, la grande variation de morphologie des constituants, prédise une masse volumique apparente de la structure à 10% de la valeur réelle, voire mieux, est un point important. Car, même si la variation de masse volumique est faible d’une pâte à l’autre la microstructure est très différente. Comme le montrent les figures 2.30 et 2.31 qui représentent la simulation d’un feuillu et d’un résineux ayant des grandeurs de contexture moyennes très proches, la taille des pores et la dispersion de matière sont très différentes d’un échantillon à l’autre.

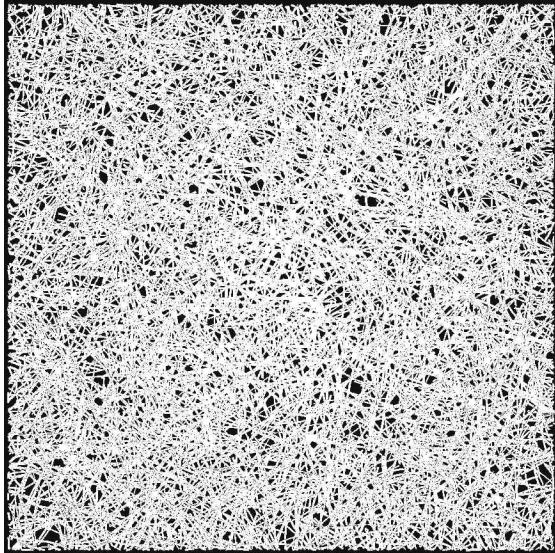


FIG. 2.30 – Simulation d'un réseau à base d'une pâte de feuillu, formette de 10 g/m^2 , aire de la surface $5 \times 5 \text{ mm}^2$.

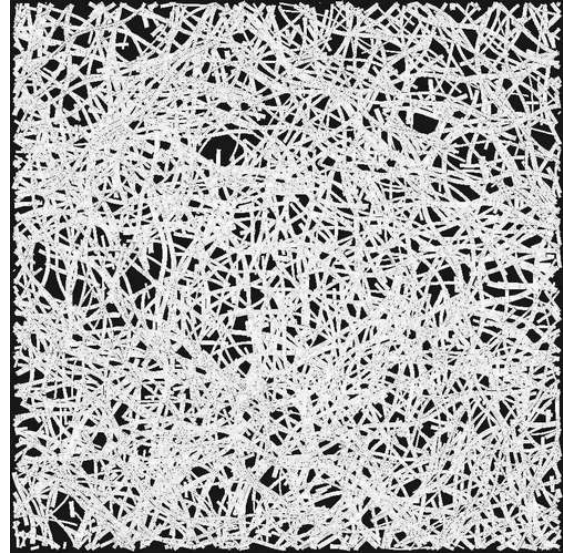


FIG. 2.31 – Simulation d'un réseau à base d'une pâte de résineux, formette de 10 g/m^2 , aire de la surface $5 \times 5 \text{ mm}^2$.

Ces résultats montrent que la simulation est capable de prendre en compte l'influence des différentes morphologies de fibres, pour simuler des structures dont les grandeurs de texture sont proches de la réalité. Pour permettre une évolution plus importante de ces grandeurs et ainsi tester la robustesse de la simulation, l'idée fut d'introduire des éléments de morphologies et de caractéristiques très différentes de celles des fibres. Ainsi des essais introduisant des fines et des fibres de verre ont été réalisés. Les paragraphes suivants présentent les résultats de ces essais.

2.9.3 Simulation de l'influence des fines sur la structure

Les fines sont en masse le deuxième constituant des pâtes à papier. Dans le cas des pâtes étudiées (Kraft, non raffinées), les fines sont principalement des produits du bois. La morphologie de ces éléments est très différente de celle des fibres (figure 2.32).

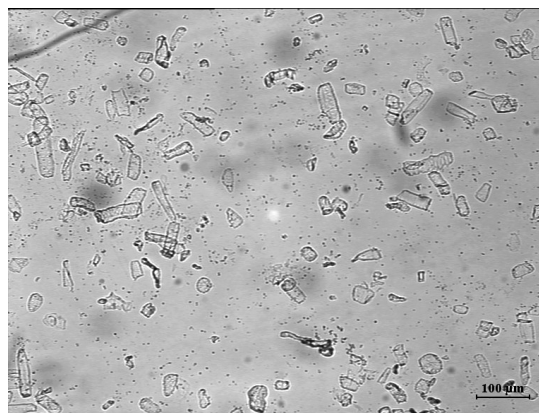


FIG. 2.32 – Image de fines obtenue par microscopie optique.

Des mesures en microscopie optique ont permis de déterminer la longueur moyenne et la largeur moyenne des fines ainsi que leurs écarts-types respectifs (tableau 2.3).

	Moyenne	Ecart-type
Longueur, μm	59.8	2.6
Largeur, μm	20.1	0.9

TAB. 2.3 – Dimensions de fines présentes dans une pâte brute.

Pour introduire le taux de fines en masse dans la simulation, l'algorithme figure 2.33 est utilisé. Cet algorithme reprend l'algorithme principal de la simulation en introduisant au début un choix entre la simulation d'une fibre et la simulation de fines. Ce choix est effectué de sorte à obtenir le taux de fines en masse désiré.

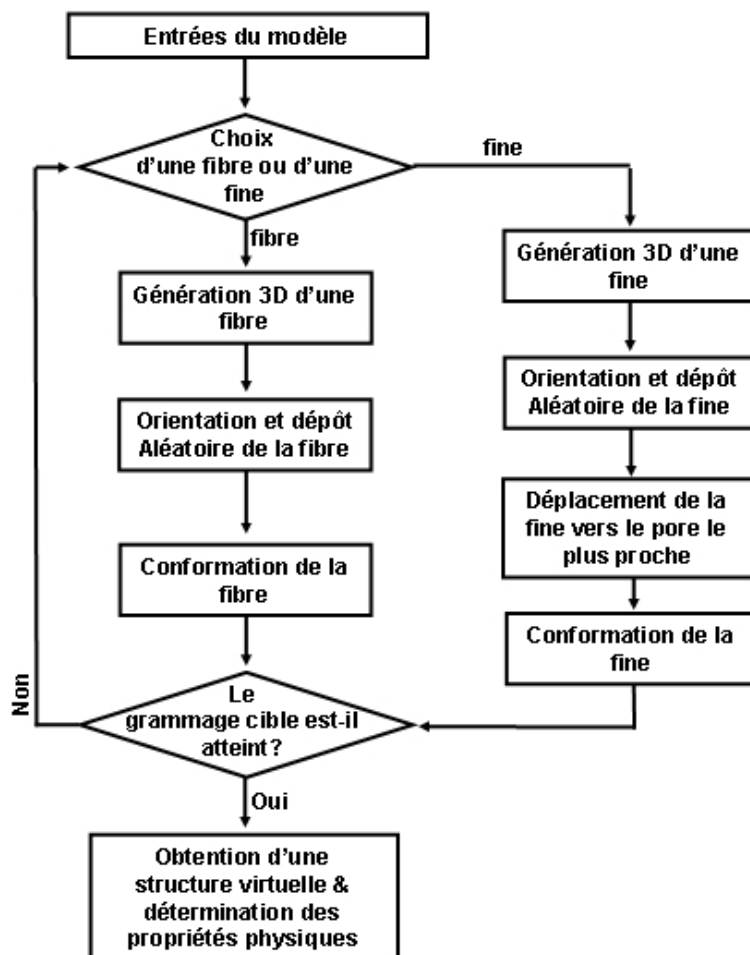


FIG. 2.33 – Algorithme de la simulation introduisant des fines.

Par ailleurs le dépôt des fines s'effectue en deux étapes. La première est identique à celle des fibres, la position du centre de gravité de la fine est déterminée aléatoirement dans "l'aire de dépôt". Si une partie de la fine se trouve dans "l'aire de la simulation" alors toute la fine est dans un deuxième temps dirigée vers le pore de la structure le plus proche, car on suppose que les fines sont suffisamment petites pour être entraînées, par l'écoulement, dans les pores de la structure lors de la formation du réseau (figure 2.34).



FIG. 2.34 – L'algorithme de dépôt de la fine privilégie les pores de la structure.

Le graphique (figure 2.35) présente les résultats de mesures effectuées par Sirviö [44] comparés aux résultats de la simulation. L'expérimentation de Sirviö consiste à réaliser des formettes d'une pâte Kraft de résineux avec différents taux de fines en masse. Le grammage des formettes testées est constant et égal à 65 g/m^2 , seul le taux de fines en masse vient influencer la structure de la formette.

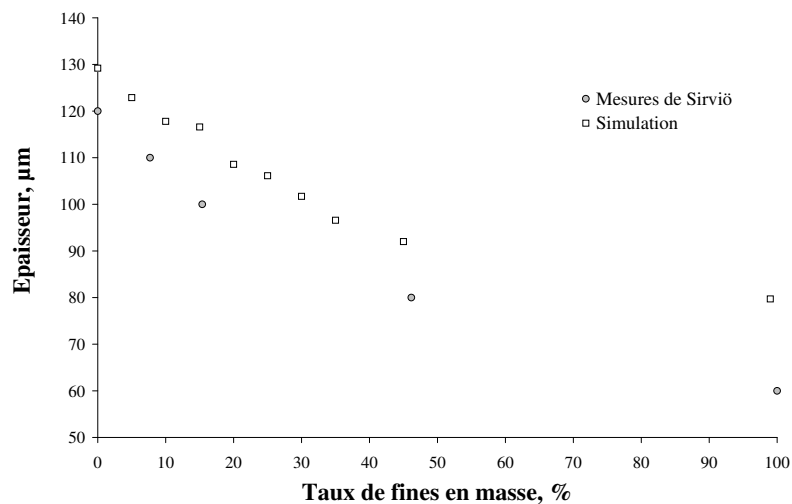


FIG. 2.35 – Influence du taux de fines en masse sur l'épaisseur de la structure, comparaison entre les valeurs expérimentales (Sirvio, [44]) et la simulation.

L'analyse de ce graphique montre que le taux de fines en masse influence linéairement l'épaisseur de la formette, lorsque leur proportion en masse est inférieure à 50%, les fines venant boucher les pores de la structure jusqu'au colmatage. Il faut remarquer que la dimension de fines introduites par Sirviö est inconnue mais vraisemblablement proche de celle que nous avons mesurée. De plus on constate que les deux courbes ont la même allure. On peut conclure que la simulation prédit bien l'effet de colmatage de la structure fibreuse par les fines. L'hypothèse faite sur la tendance des fines à suivre le courant et venir dans les pores de la structure peut donc être validée.

Le temps nécessaire à la simulation pour faire cette prédiction est d'environ une heure, ce qui assurément beaucoup plus faible que celui pris pour réaliser le travail expérimental. Ceci est un des atouts de la simulation.

2.9.4 Simulation de structure composite à base de fibres de verre et de fibres cellulosiques

D'autres matériaux que le papier font appel au procédé de formation par voie aqueuse, par exemple les non-tissés. Ces matériaux peuvent être composés de fibres cellulosiques mais aussi d'autres constituants tels que les fibres de verre. L'extrapolation de la simulation à ce type de produits peut être intéressante et se révéler un bon moyen de tester sa robustesse. L'incorporation de fibres de verre dans le modèle est techniquement simple. L'algorithme consacré aux fibres de verre reprend celui développé pour les fines (figure 2.36), le choix entre une fibre de verre ou une fibre cellulosique est effectué de sorte à obtenir le taux en masse de fibres de verre désiré, la différence de densité entre les fibres cellulosiques et les fibres de verre est bien entendu prise en compte dans ce choix.

Le dépôt des fibres de verre à la surface du réseau est identique à celui des fibres cellulosiques mais la conformation est différente, car les caractéristiques mécaniques des fibres de verre sont très différentes de celles des fibres cellulosiques. La méthode utilisée pour déposer et conformer les fibres de verre est la même que pour les fibres cellulosiques. Toutefois une calibration de la déformation moyenne des fibres de verre est donc nécessaire pour déterminer les angles de conformation θ_1 et θ_2 . Les angles θ_1 et θ_2 des fibres cellulosiques étant déjà déterminés grâce une calibration, l'échantillon de 5% en masse de fibres de verre a été choisi pour cette dernière calibration. Cette calibration fixe les angles de conformation θ_1 et θ_2 à des valeurs très proches de 180° , ceci est cohérent avec la rigidité importante de ces fibres.

Le travail se limite à une étude avec des fibres de verre calibrées de 6 mm de longueur et 7 μm en diamètre, la masse volumique des fibres est prise égale à celle du verre soit 2.5 g/cm^3 . Il faut remarquer que la simulation doit tenir compte en plus des différences de rigidité, de la différence de densité entre les deux types de fibres.

Le graphique (figure 2.37) présente les résultats de mesures effectuées sur des formettes réalisées avec différents taux de fibres de verre en masse. Il présente aussi les valeurs prédites par la simulation. Le taux de fibres de verre en masse se limite à 50%,

car la résistance mécanique des formettes pour des taux supérieurs est insuffisante ce qui devient problématique lors de leur fabrication.

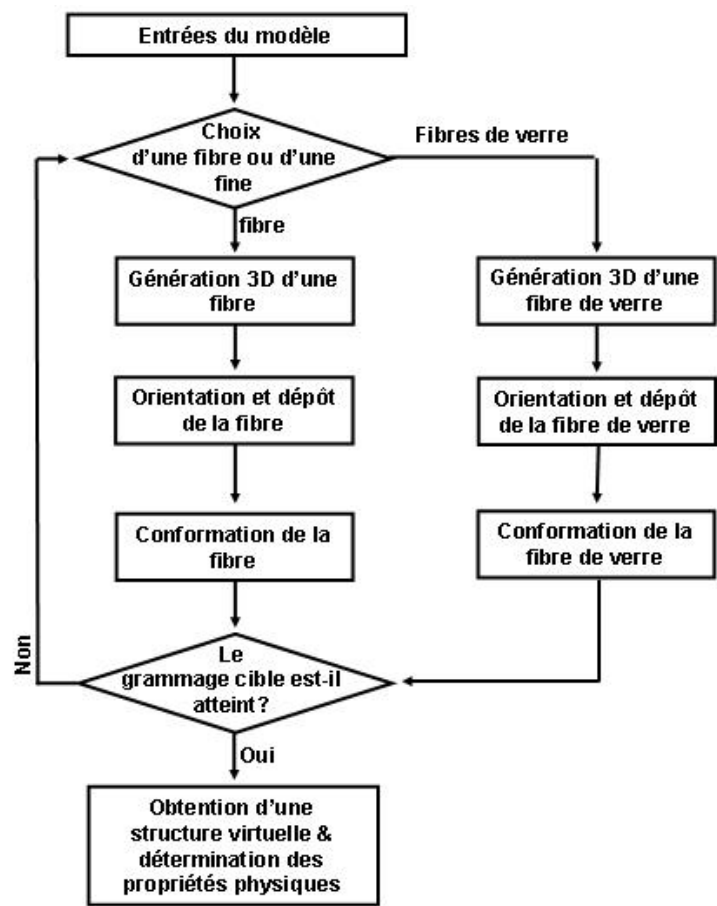


FIG. 2.36 – Algorithme de la simulation introduisant des fibres de verre.

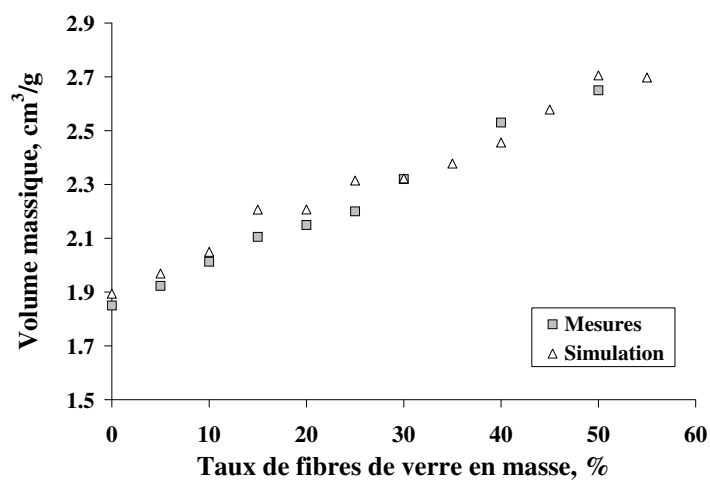


FIG. 2.37 – Influence du taux de fibres de verre en masse sur le volume massique.

On peut observer expérimentalement que le volume massique apparent du réseau varie linéairement avec le taux de fibres de verre (1.9-2.7), ce qui traduit une variation de porosité de (65-80%). Ceci peut être expliqué, d'une part, par la rigidité importante des fibres de verre qui se conforment moins que les fibres cellulosiques et, d'autre part, par une diminution du nombre de liaisons hydrogènes dans la structure liée à la présence des fibres de verre. L'analyse de ce graphique montre que les prédictions de la simulation concordent très bien avec les données expérimentales.

En plus d'une validation quantitative, les images MEB permettent de valider qualitativement la simulation et montrent clairement que la manière dont les fibres de verre sont modélisées est très proche de la réalité (figures 2.38 et 2.39). Les images MEB montrent clairement que les fibres de verre ne se déforment que très peu, ce qui concorde avec les valeurs d'angles (θ_1 et θ_2) introduites dans la simulation.

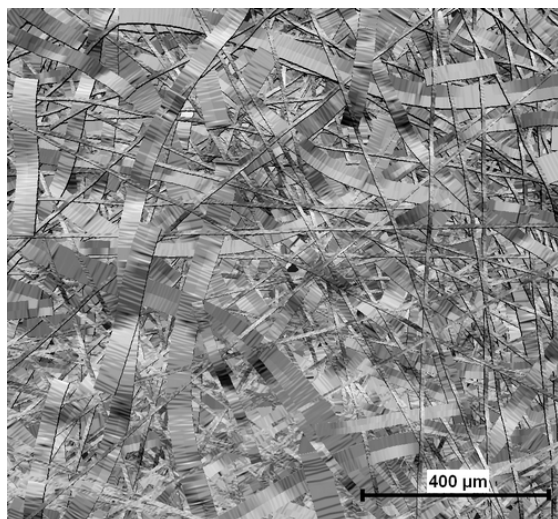


FIG. 2.38 – Simulation d'une structure à base de 50% de fibre de cellulosique et 50% de fibres de verre.

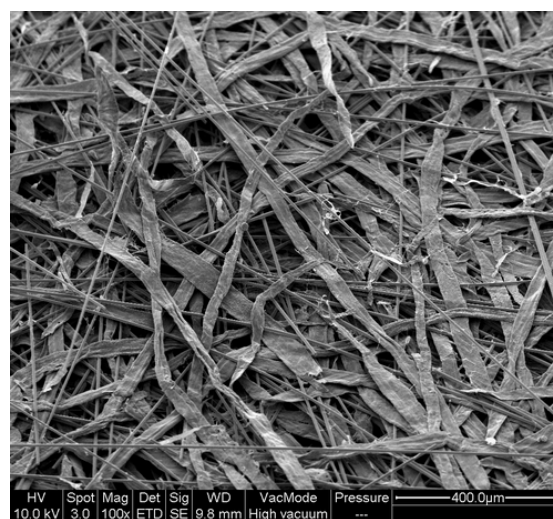


FIG. 2.39 – Image MEB d'une formette à base de 50% de fibre de cellulosique et 50% de fibres de verre.

Ainsi, cette expérience valide la simulation pour différents critères comme le mélange de fibres ayant des caractéristiques mécaniques et morphologiques différentes sur les paramètres de contexture du réseau comme le grammage et la masse volumique moyenne.

2.10 Caractérisation de la topographie de surface

Les différentes applications de la simulation pour réaliser des structures virtuelles (simulation de pâtes aux morphologies de fibres différentes, simulation de l'influence des fines dans la structure ou de l'introduction de fibres de verre) ont montré que pour des valeurs moyennes comme le volume massique apparent ou l'épaisseur de la structure, on génère des structures virtuelles proches des structures réelles. L'étude de la topographie de surface va permettre de valider par de nouveaux paramètres la structure simulée.

La surface d'un solide est définie comme la partie qui fait le lien entre le solide et son environnement, mais lorsqu'on étudie des milieux poreux cette définition nécessite d'être précisée. Pour l'étude de la topographie de surface on définit la surface comme l'interface directement accessible par un rayon perpendiculaire à un plan moyen XY entre le solide et son environnement. Ainsi l'influence des pores débouchant est prise en compte.

La topographie est le principal dispositif de quantification en trois dimensions d'une surface. Bien que la surface d'un solide soit tridimensionnelle, il n'existe qu'une seule valeur de z pour un couple (x, y) . Ceci découle directement de la définition d'une surface. Les données topographiques peuvent donc être enregistrées dans une matrice. Cette forme matricielle est exactement identique à celle de la matrice de surface utilisée lors de la simulation figure 2.23. Les matrices simulées et mesurées peuvent donc être directement comparées qualitativement (figures 2.40 et 2.41) et quantitativement. Ces images sont obtenues grâce à un maillage par triangulation des matrices de surface simulées et mesurées (figure 2.42). Cette opération est réalisée avec la bibliothèque VTK, le pas en x et en y est de $1 \mu m$.

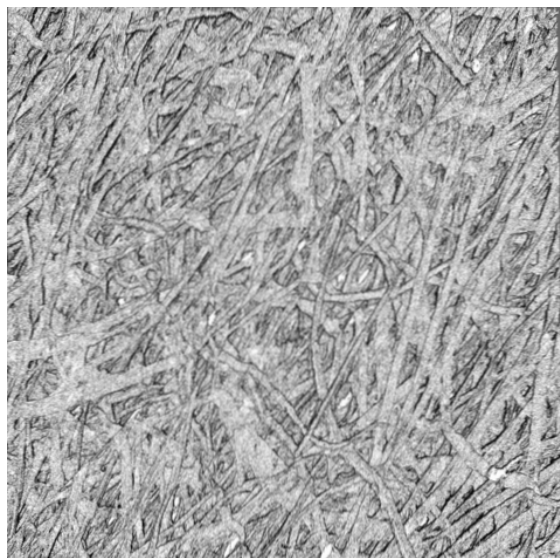


FIG. 2.40 – Image de la surface mesurée par l'appareil Altisurf d'une formette d'eucalyptus, $2 \times 2 \text{ mm}^2$.

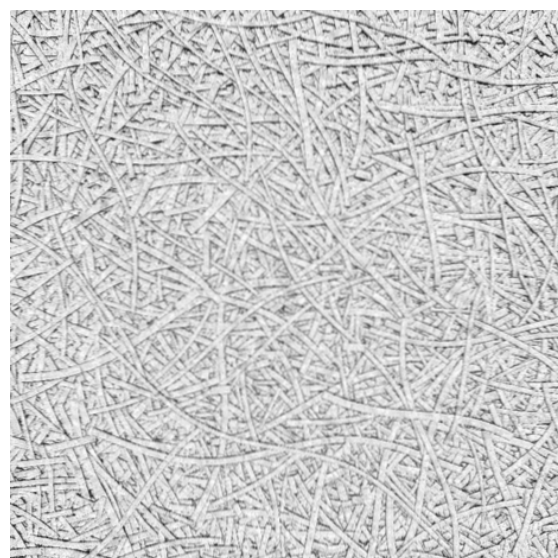


FIG. 2.41 – Image de la surface simulée d'une formette d'eucalyptus, $2 \times 2 \text{ mm}^2$, "matrice de surface"

Les mesures topographiques sont réalisées avec le rugosimètre optique Altisurf 500. Le principe de fonctionnement est le suivant : un faisceau lumineux issu d'une lampe halogène (lumière blanche) passe par une fibre optique jusqu'à une sonde passive. Cette sonde passive possède une lentille à forte aberration chromatique. Le rôle de cette lentille est de décomposer le faisceau lumineux en longueurs d'ondes monochromatiques sur une certaine distance que l'on appelle gamme de mesure, ici 300 microns (figure 2.43). En fonction du relief de la surface analysée, certaines longueurs d'ondes vont être réfléchies. Ces dernières vont être interprétées en termes d'altitude. Les données acquises font l'objet d'un traitement informatique permettant de caractériser l'état de la surface, calculer

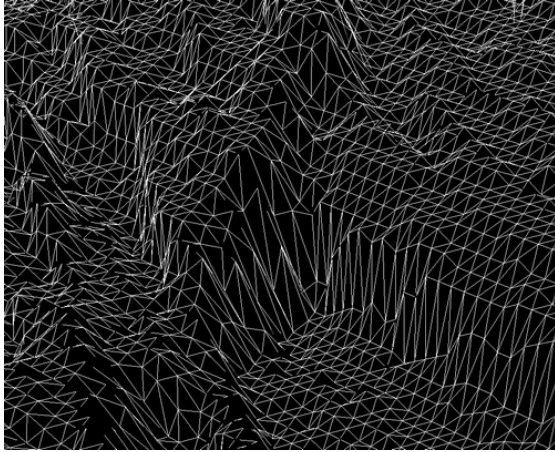


FIG. 2.42 – Image présentant le type de maillage utilisé pour visualiser les surfaces mesurées et simulées.

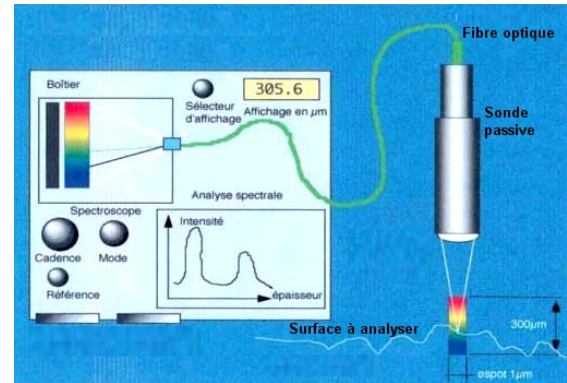


FIG. 2.43 – Schéma de fonctionnement de l'appareil Altisurf500.

des paramètres normalisés 2D et 3D, mesurer des distances, hauteurs, angles, volumes de creux ou de pics, représenter la surface en 2D et 3D suivant divers modes.

Plusieurs paramètres sont utilisés pour caractériser une surface lors d'analyses topographiques :

- S_a , moyenne arithmétique des écarts à la moyenne

$$S_a = \frac{1}{MN} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M |z(x_i, y_j)| \quad (2.3)$$

En analyse topographique l'altitude moyenne d'une surface est considérée comme l'altitude zéro, les valeurs inférieures sont négatives et considérées comme faisant partie de vallées, les valeurs supérieures sont positive et considérés comme faisant partie de pics. C'est pour cette raison que le paramètre S_a utilise la valeur absolue des écarts.

- S_q , moyenne quadratique des écarts à la moyenne

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{MN} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M z^2(x_i, y_j)} \quad (2.4)$$

Le paramètre S_q représente la valeur efficace des amplitudes de la surface (RMS). C'est le paramètre le plus utilisé pour identifier la rugosité de surface [45]. Pour une distribution symétrique des altitudes de surface centrées sur zéro, le paramètre S_q représente l'écart type. L'analyse de ce paramètre sur les structures virtuelles permettra de valider la structure sur un critère de dispersion.

- S_{sk} , symétrie de la courbe de distribution des profondeurs

$$S_{sk} = \frac{1}{MNS_q^3} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M z^3(x_i, y_j) \quad (2.5)$$

Une valeur négative de S_{sk} indique que la surface est composée principalement d'un plateau et de vallées. Inversement, une valeur positive indique que la surface est composée principalement d'une plaine et de pics. En d'autres termes, le paramètre S_{sk} représente l'asymétrie de la distribution des altitudes.

- S_{ku} , aplatissement de la courbe de distribution des profondeurs

$$S_{ku} = \frac{1}{MNS_q^4} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M z^4(x_i, y_j) \quad (2.6)$$

Compte tenu de l'exposant utilisé pour calculer le paramètre S_{ku} , il est surtout utilisé pour caractériser les bruits de la mesure. Pour une distribution gaussienne le paramètre S_{ku} est de 3.

- S_p , altitude maximum de la surface

$$S_p = \text{Max}(z_i) \quad (2.7)$$

Le paramètre S_p donne l'écart d'altitude maximum entre la valeur moyenne (altitude zéro) et le sommet du pic le plus haut (altitude maximum).

La figure 2.44 représente la surface mesurée et la surface simulée d'une formette d'eucalyptus. Ces surfaces sont représentées par un tracé isométrique où les altitudes sont codées par un jeu de couleurs.

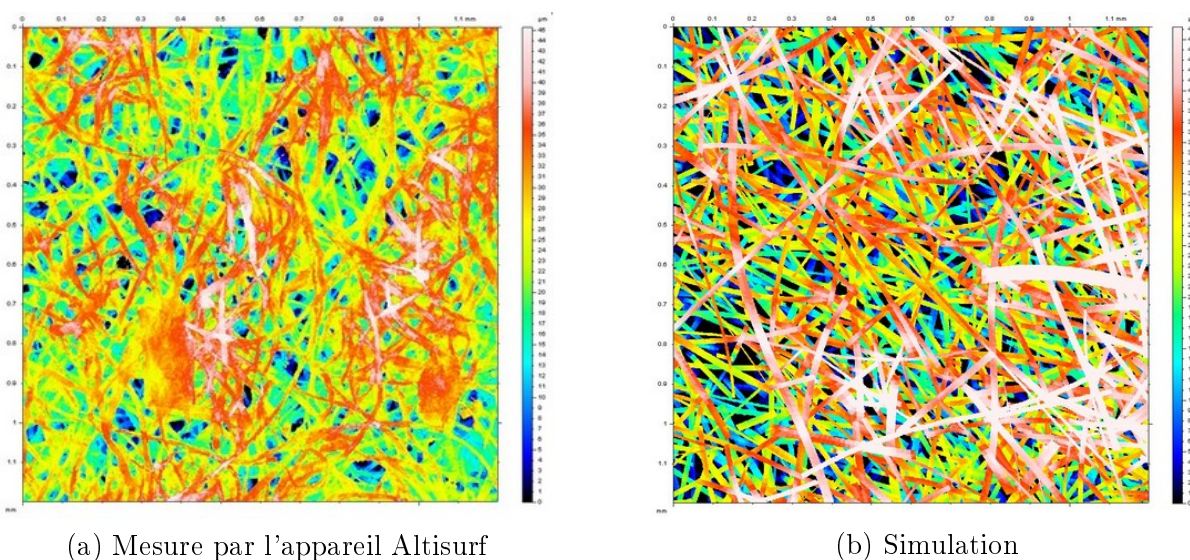


FIG. 2.44 – Représentation isométrique d'une surface de formette d'eucalyptus.

Le tableau 2.4 présente les résultats des mesures et de la simulation pour différentes pâtes. On peut remarquer que les valeurs simulées du paramètre S_p sont dans la même gamme que les valeurs mesurées.

		$S_a, \mu\text{m}$	$S_q, \mu\text{m}$	$S_p, \mu\text{m}$	$S_{sk}, \mu\text{m}$	$S_{ku}, \mu\text{m}$
Acacia	Mesure	6.1	7.7	31	-0.4	3.1
	Simulation	7.6	9.8	23	-1.1	5.0
Pin radiaire	Mesure	9.1	11.9	34	-1.1	4.7
	Simulation	12.4	16.2	38	-1.1	5.2
Epicéa	Mesure	7.7	9.7	30	-0.3	3.3
	Simulation	8.0	10.3	25	-0.7	3.9
Eucalyptus	Mesure	6.6	8.3	24	-0.6	3.3
	Simulation	8.3	10.7	29	-1.1	4.9
Mélange résineux 1	Mesure	9.4	12.2	30	-1.0	4.7
	Simulation	9.4	11.8	34	-0.6	3.8
Mélange résineux 2	Mesure	6.0	8.0	48	-0.8	5.8
	Simulation	8.2	10.5	25	-0.8	4.0
Pin du Sud	Mesure	7.3	10.2	34	-1.5	7.7
	Simulation	13.1	16.3	37	-0.4	3.1
Cèdre rouge	Mesure	6.4	8.3	62	-0.2	3.7
	Simulation	6.6	8.3	27	-0.8	4.6
Peuplier	Mesure	6.4	8.5	13	-0.4	9.3
	Simulation	7.6	10.0	29	-0.9	5.6

TAB. 2.4 – Valeurs des paramètres de la topographie de surface de formettes fabriquées à partir de différentes de pâtes à papier.

Même si dans certains cas les valeurs peuvent sembler éloignées (résineux n°2, cèdre rouge et peuplier), il faut souligner que la reproductibilité des mesures de S_p peut présenter des écarts de l'ordre de $10 \mu\text{m}$. L'épaisseur de la structure virtuelle peut donc être considérée comme proche de l'épaisseur de la structure réelle. De plus, dans le cas de la simulation et des mesures, les valeurs du paramètre S_{sk} sont toutes négatives, ce qui souligne l'asymétrie de la distribution des altitudes vers les creux de la structure.

Le graphique (figure 2.45) présente les valeurs du paramètre S_q simulé en fonction du paramètre S_q mesuré. A l'analyse de ce graphique on peut remarquer que la corrélation est relativement faible ($R^2 = 0.44$). La simulation n'explique qu'en partie la variation de la rugosité. De plus les valeurs simulées ont tendance à surestimer la rugosité d'environ $3 \mu\text{m}$. Si on compare cette valeur de $3 \mu\text{m}$ à la valeur moyenne du paramètre S_q ($10 \mu\text{m}$) cela représente une erreur importante (33%), cependant, si on compare à la plage de variation des altitudes qui est d'environ $100 \mu\text{m}$ cette valeur devient acceptable.

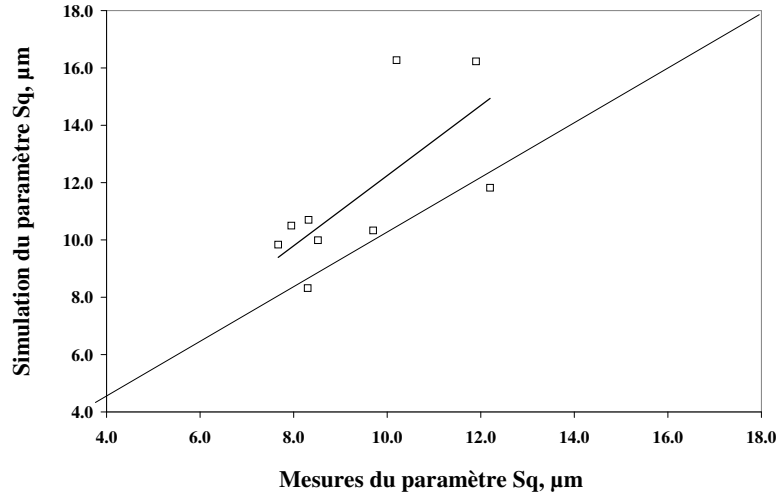


FIG. 2.45 – Corrélation entre les valeurs prédites et mesurées de la rugosité (S_q).

L'analyse des représentations isométriques (figure 2.44) montre clairement que la rugosité de la structure n'est pas due à la courbure des fibres, qui ne se déforment que peu dans la direction Z, mais plutôt à l'absence de fibres, laissant ainsi place à un creux. La rugosité de la structure est donc en partie contrôlée par la position des fibres, position déterminée de manière aléatoire dans le cas de la simulation.

La théorie de l'auto-cicatrisation de la structure prend ici tout son sens [32] [33]. Si l'on accepte l'idée que les fibres tout comme les fines sont attirées par les courants lors de la formation et que les courants les plus importants sont présents dans les creux les plus profonds, on peut supposer que les fibres viennent se déposer préférentiellement sur les creux de la structure et ainsi diminuer la rugosité.

Pour prendre en compte ce phénomène, un algorithme placé à la suite de l'algorithme de dépôt des fibres a été développé (figure 2.46). Cet algorithme consiste à déplacer avec des pas de $5 \mu\text{m}$ la fibre pour la placer dans une position où la somme des carrés de altitudes des points discrétisant la fibre est la plus basse, ceci pour privilégier les creux les plus profonds. Ces déplacements peuvent être au maximum de $200 \mu\text{m}$ soit environ 7 fois la largeur d'une fibre. Ainsi le dépôt des fibres est défini par une composante aléatoire puis par un critère dépendant de la structure.

Le tableau 2.5 présente les résultats des simulations avec l'introduction du nouvel algorithme de dépôt. On peut remarquer que l'algorithme n'a eu qu'une faible influence sur les paramètres S_p et S_{sk} , les grandeurs de masse volumique et d'épaisseur de la structure n'ont que peu varié. Par contre on peut voir sur le graphique (figure 2.47) que les valeurs du paramètre S_q simulé correspondent beaucoup mieux aux valeurs du paramètre S_q mesuré ($r^2=0.84$). De plus la droite de corrélation est directement alignée sur la première bissectrice, il n'y a donc plus de décalage. Seul le pin radiaire présente une valeur de S_q éloignée.

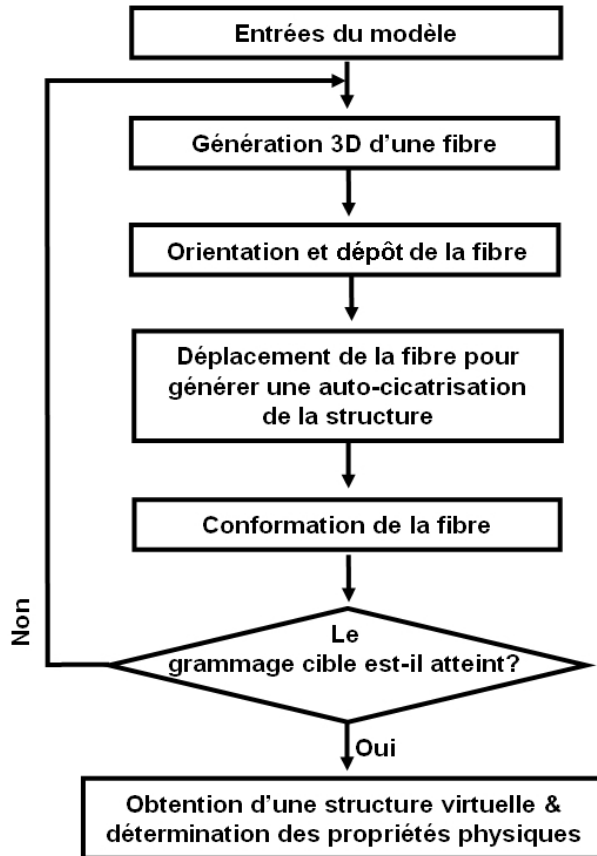


FIG. 2.46 – Diagramme de construction de la structure avec l’algorithme d’auto-cicatrisation.

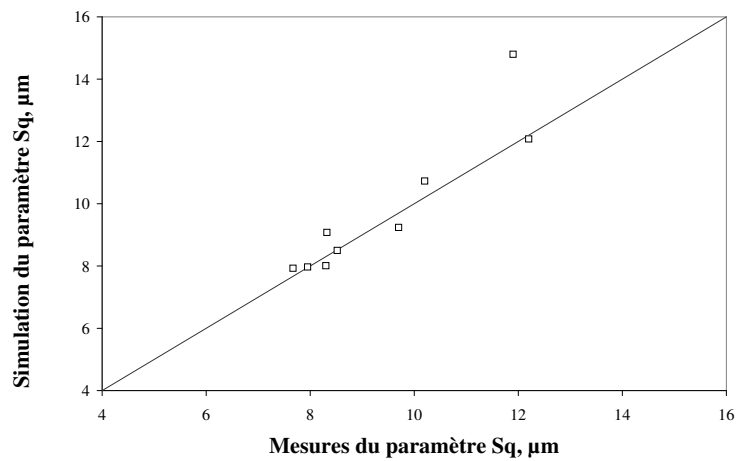


FIG. 2.47 – Corrélation entre les valeurs mesurées et prédites par la simulation avec auto-cicatrisation pour le paramètre de rugosité (Sq) .

		$S_a, \mu\text{m}$	$S_q, \mu\text{m}$	$S_p, \mu\text{m}$	$S_{sk}, \mu\text{m}$	$S_{ku}, \mu\text{m}$
Acacia	Mesure	6.1	7.7	31	-0.4	3.1
	Simulation	6.1	7.9	29	-0.7	4.2
Pin radiaire	Mesure	9.1	11.9	34	-1.1	4.7
	Simulation	11.6	14.8	50	-0.4	3.7
Epicéa	Mesure	7.7	9.7	30	-0.3	3.3
	Simulation	7.1	9.2	25	-0.3	3.8
Eucalyptus	Mesure	6.6	8.3	24	-0.6	3.3
	Simulation	7.2	9.2	27	-0.6	3.8
Mélange résineux 1	Mesure	9.4	12.2	30	-1.0	4.7
	Simulation	9.6	12.1	40	-0.5	3.4
Mélange résineux 2	Mesure	6.0	8.0	48	-0.8	5.8
	Simulation	6.5	8.0	35	-0.4	5.2
Pin du Sud	Mesure	7.3	10.2	34	-1.5	7.7
	Simulation	13.1	16.3	37	-0.4	3.1
Cèdre rouge	Mesure	6.4	8.3	62	-0.2	3.7
	Simulation	6.4	8.0	27	-0.3	3.3
Peuplier	Mesure	6.4	8.5	13	-0.4	9.3
	Simulation	6.6	8.5	24	-0.6	4.0

TAB. 2.5 – Valeurs des paramètres de la topographie de surface de formettes fabriquées à partir de différentes de pâtes à papier, avec prise en compte d’une auto-cicatrisation.

On peut donc conclure, au vu des prédictions de la simulation, qu’il existe bien un phénomène d’auto-cicatrisation présent lors de la formation du papier. Comme la simulation s’est avérée prédictive pour caractériser la rugosité de formettes composées de fibres cellulosiques, il est intéressant de tester également sa robustesse en analysant les prédictions pour différents taux de fibres de verre en masse. Le graphique (figure 2.48) présente deux courbes d’évolution du paramètre S_q en fonction du taux de fibres de verre en masse.

La première courbe représente l’évolution des valeurs mesurées et la seconde l’évolution des valeurs simulées. On peut remarquer que le paramètre S_q augmente avec l’augmentation du taux de fibres de verre, cette augmentation de la rugosité s’explique par la rigidité des fibres de verre et leur facteur de forme (largeur sur épaisseur) différentes. L’analyse de l’évolution des deux courbes montre que la simulation garde son caractère prédictif ($r^2=0.84$), ceci pour une variation de la rugosité plus importante ce qui augmente son domaine d’application.

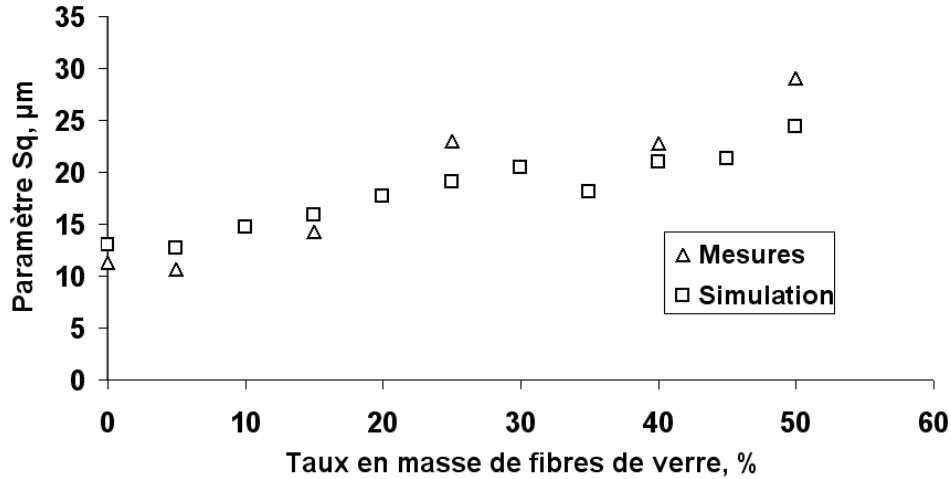


FIG. 2.48 – Valeurs simulée et mesurée de l'évolution de la rugosité en fonction du taux de fibres de verre en masse.

Le caractère prédictif de la simulation pour la rugosité de la structure est un point très important, car cette grandeur, par le biais du paramètre S_q , décrit d'une manière plus précise la structure que les grandeurs de contexture comme l'épaisseur, la masse volumique ou porosité. Ce paramètre donne une information sur la dispersion des altitudes à la surface de la structure, on peut donc très bien imaginer un tas de sable avoir la même rugosité qu'une formette avec une structure pourtant très différente. Mais, dans le cas de la simulation, les fibres qui composent la structure virtuelle sont de la même dimension que les fibres présentes dans la formette. Il est donc normal de supposer que si les constituants de deux structures sont de dimensions identiques et que les paramètres de topographie de surface et les grandeurs de contexture (masse volumique apparente, porosité) sont identiques alors les deux structures sont très proches l'une de l'autre.

Le fait d'avoir des paramètres topographiques très proches et des fibres de dimensions identiques permet de dire que les tailles des pores de surface d'une structure simulée et d'une structure réelle sont très proches. En s'appuyant sur les analyses de Dodson [46], qui indique que la taille des pores en surface est très proche de la taille des pores dans la structure on peut conclure que la simulation prédit bien les valeurs de taille des pores dans la structure. Cette analyse est importante car la taille des pores est une grandeur difficilement mesurable, qui influence directement certaines caractéristiques du papier comme, par exemple, la perméabilité.

La simulation peut donc être aussi utilisée pour prédire des grandeurs difficiles d'accès comme la taille des pores ou la surface de contact relative entre les fibres (RBA), dans les plages de variation des dimensions des fibres validées. Elle peut aussi être utilisée pour déterminer l'influence de chaque dimension (longueur, largeur ou épaisseur) d'une fibre sur la structure mais aussi l'influence de l'hétérogénéité de ces dimensions.

2.11 Prédiction de l'influence de la morphologie des fibres sur la structure

Après avoir montré la validité de la simulation pour plusieurs paramètres structuraux, il est intéressant d'utiliser la simulation pour prédire les caractéristiques de la structure en fonction de la morphologie des fibres.

Pour définir l'influence de chaque dimension d'une fibre sur la structure, l'idée est de simuler une structure avec toujours exactement la même fibre. L'évolution des caractéristiques des structures simulées en fonction de l'évolution d'une des dimensions de la fibre permettra de mettre en évidence son influence.

Pour cela deux dimensions de fibres ont été choisies, la première est celle d'un feuillu typique (800 μm en longueur, 19 μm en largeur et 4.5 μm d'épaisseur), la seconde celle d'un résineux typique (2500 μm en longueur, 30 μm en largeur et 6.5 μm d'épaisseur).

Plusieurs simulations ont donc été réalisées en ne faisant varier qu'une dimension. Ainsi, l'influence de chaque paramètre d'entrée peut être définie pour chaque grandeur de sortie. Par exemple, il est possible de définir l'influence de la longueur des fibres sur le volume massique de la structure. Bien entendu, il s'agit de pures prédictions du modèle, prédictions auxquelles on peut accorder une certaine confiance du fait de sa capacité prédictive pour une large gamme de pâtes et de mélanges.

Les deux courbes de la figure 2.49 représentent l'évolution de la structure simulée pour des fibres ayant la largeur et l'épaisseur d'une fibre moyenne de feuillus et de résineux, avec des longueurs variant de 500 à 3000 μm .

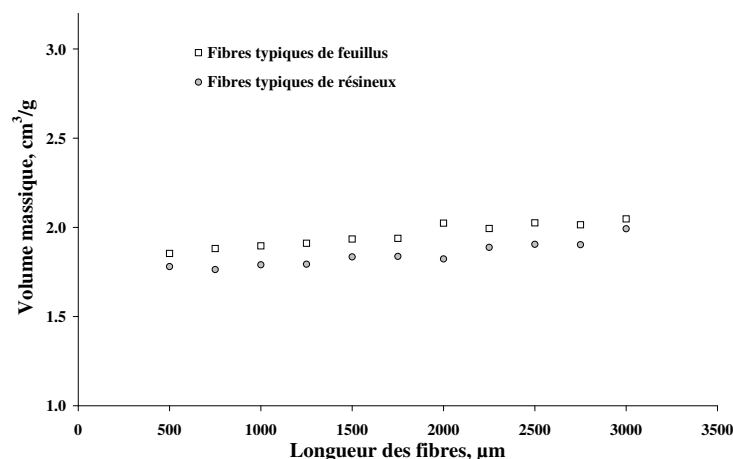


FIG. 2.49 – Evolution du volume massique en fonction la longueur des fibres, pour des dimensions de largeur et d'épaisseur constantes, d'après la simulation.

On peut remarquer que le volume massique de la structure augmente dans les deux cas linéairement avec l'augmentation de la longueur des fibres mais cette variation est relativement faible, environ 5% pour une forte variation de longueur. On peut donc conclure

que la longueur des fibres n'a que peu d'influence sur les grandeurs de contexture de la structure. Cette conclusion est en accord avec les résultats de la simulation de Lu et Carlsson [47] qui indiquent que la longueur des fibres n'a qu'une très faible influence sur la masse volumique apparente du papier. Cependant même si la longueur des fibres n'a pas d'influence sur la porosité ou la masse volumique de la structure, elle a une influence très importante sur les caractéristiques mécaniques. Les résultats de la simulation de la résistance à la rupture seront présentés dans le chapitre suivant.

L'influence de l'épaisseur et de largeur des fibres est présentée dans les figures 2.50 et 2.51. Ces figures montrent clairement que le volume massique de la structure dans un cas diminue lorsque la largeur des fibres augmente et dans l'autre cas augmente avec l'augmentation de l'épaisseur des fibres.

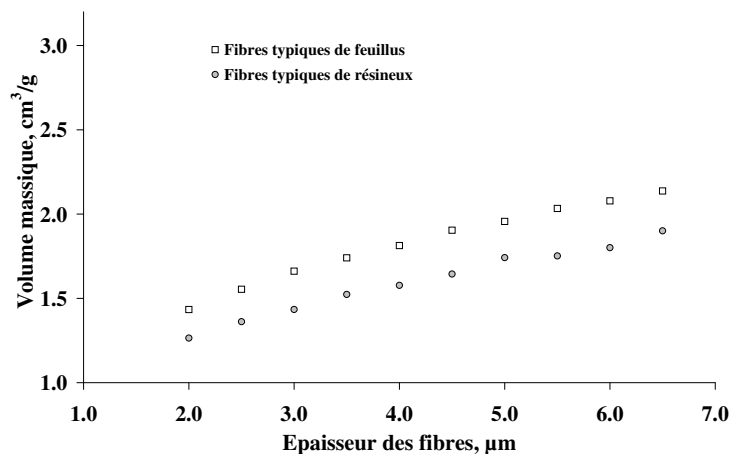


FIG. 2.50 – Evolution du volume massique en fonction l'épaisseur des fibres, les deux autres dimensions (longueur et largeur) étant constantes, d'après la simulation.

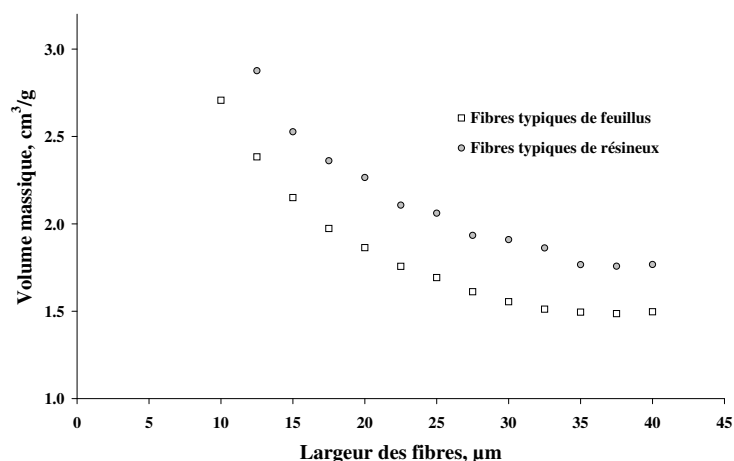


FIG. 2.51 – Evolution du volume massique en fonction la largeur des fibres, les deux autres dimensions (longueur et épaisseur) étant constantes, d'après la simulation.

On constate, dans les deux cas, que le volume massique de la structure varie dans une gamme importante lorsque la largeur ou l'épaisseur des fibres varie, et celle-ci est beaucoup plus importante que pour l'effet de la longueur.

L'analyse de ces graphiques peut aussi être faite différemment car ils apportent des informations supplémentaires sur la sensibilité de la simulation aux paramètres. On peut conclure que le modèle n'est pas sensible à la longueur des fibres. Par contre, la forte influence de la largeur et de l'épaisseur des fibres sur les résultats de la simulation soulève le problème de la précision de la mesure des dimensions des fibres d'une pâte à papier.

Par ailleurs, l'utilisation du ratio largeur sur épaisseur de fibre (figure 2.52) semble être pertinente car ce paramètre permet la superposition parfaite des quatre courbes des résultats de la simulation. Il peut donc expliquer à lui seul l'influence des trois dimensions d'une fibre sur les grandeurs de contexture.

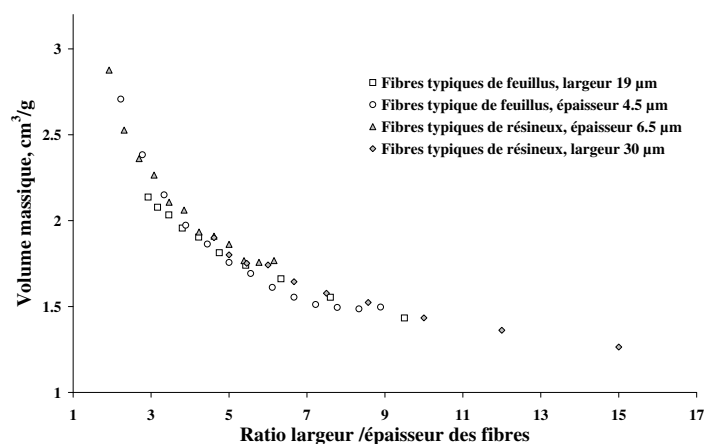


FIG. 2.52 – Evolution du volume massique en fonction du ratio largeur sur épaisseur des fibres, d'après la simulation.

Comme le chapitre 1 de ce document l'a présenté, la caractérisation de la morphologie des fibres composant une pâte est complexe. Les erreurs peuvent venir de deux étapes, la première étape est la mesure des dimensions des fibres (largeur et épaisseur), où les erreurs liées à la stabilisation de la moyenne en fonction du nombre de mesures et les erreurs directes de mesures peuvent être estimées à $\pm 0.25 \mu\text{m}$ dans le cas de la mesure de l'épaisseur et $\pm 1 \mu\text{m}$ dans le cas des mesures de la largeur, soit environ plus ou moins 5% d'erreur dans les deux cas. La deuxième étape génératrice d'erreur est la modélisation de la distribution de la largeur et de l'épaisseur des fibres par une distribution en loi normale. Des tests statistiques ont montré la validité de cette modélisation, néanmoins il existe une erreur inhérente à cette étape.

Dans la plage de variation habituelle du ratio largeur sur épaisseur de fibre, soit entre 4 et 7, on remarque que l'évolution du volume massique en fonction de ce ratio est quasiment linéaire (figure 2.53). On peut alors calculer que l'erreur totale de détermination de

ce ratio entraîne une incertitude d'environ à 4% sur le volume massique. En rapportant les barres d'erreurs de 4% sur l'histogramme de prédiction du volume massique (figure 2.54), on remarque que la plupart des écarts entre la simulation et les mesures sont inférieurs à cette fourchette et donc qu'une partie de différence entre la simulation et les mesures peut venir de ces erreurs.

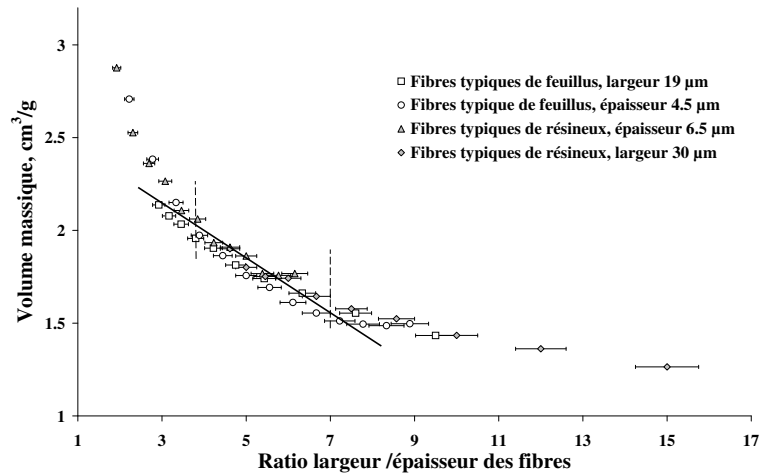


FIG. 2.53 – Caractérisation de l'influence des erreurs de mesures (l'épaisseur et la largeur des fibres) sur la valeur du volume massique du réseau virtuel.

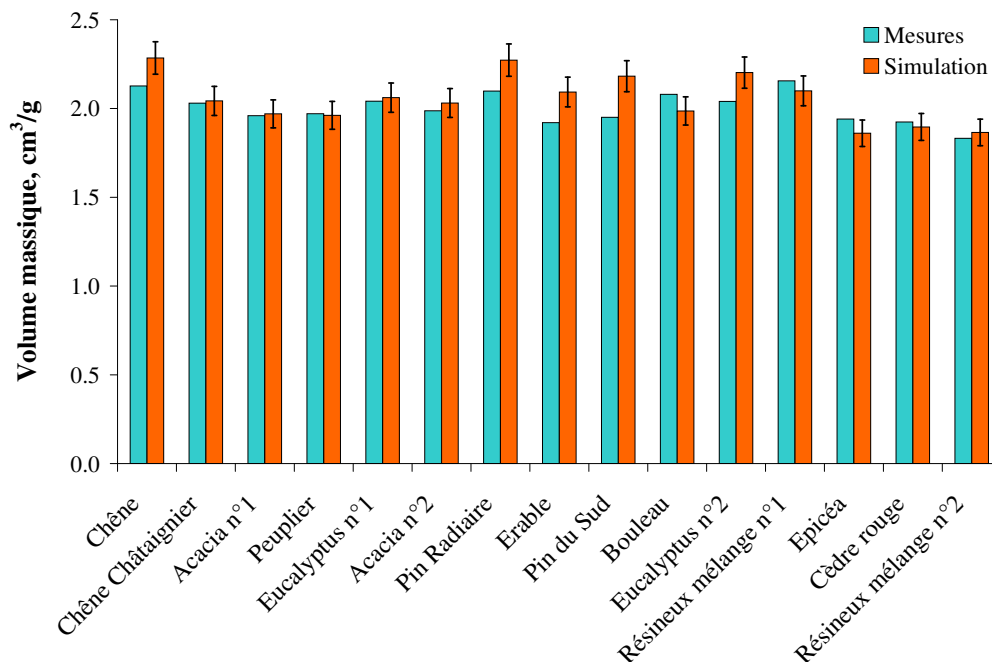


FIG. 2.54 – Illustration de l'influence des erreurs de mesure (épaisseur et largeur des fibres) sur la valeur du volume massique du réseau virtuel.

Le développement d'un appareil permettant grâce à des mesures précises de déterminer la morphologie des fibres serait un atout important pour améliorer les capacités prédictives de la simulation.

2.12 Conclusion

Un modèle et *a fortiori* une simulation est une simplification du monde. Toute la difficulté de la construction d'une simulation est d'isoler les paramètres prépondérants, leur nombre et leur prépondérance dépendant souvent de la précision et de la plage de prédictions désirées.

Les objectifs de la simulation présentés dans ce document sont de créer une structure virtuelle la plus proche possible d'une structure réelle de formette et par la suite de prédire ses caractéristiques physiques comme la résistance à la traction, la perméabilité et les caractéristiques optiques, grâce à l'application de modèles directement sur la structure.

Pour simplifier la grande complexité des phénomènes mis en jeu même lors de la réalisation d'une formette, un certain nombre d'hypothèses ont été posées. Par exemple les effets du pressage et du séchage sont constants pour toutes les morphologies de fibres ou l'idée selon laquelle le fait de déposer et de conformer les fibres les unes après les autres peut permettre d'obtenir une structure proche d'une structure réalisée en deux étapes, formation puis pressage.

L'étude des paramètres de contexture (volume massique, porosité, etc.) et de la rugosité de la structure a permis de valider l'importante similitude entre les structures réelles et les structures virtuelles. De plus, l'introduction de fibres de verre et de fines à la simulation a montré sa robustesse et sa capacité prédictive pour une plage de d'étude plus large. L'utilisation de la simulation a aussi permis en partie de consolider l'idée d'une auto-cicatrisation lors de la formation de la structure, idée qui avait été écartée lors des premiers développements.

Après avoir simulé en trois dimensions la microstructure du papier et avoir validé les modèles grâce à plusieurs paramètres, le deuxième objectif de ce projet est de prédire les propriétés physiques de la structure. L'application d'un modèle physique sur la structure virtuelle nécessite impérativement d'avoir une structure simulée très proche de la structure réelle, car les erreurs s'ajoutent directement. Par ailleurs, le fait d'avoir une structure représentant exactement la structure du papier permet l'application de modèles développés pour le papier, publiés dans la littérature. En effet les données de sortie de la simulation seront utilisées comme paramètres d'entrée des nouveaux modèles. L'avantage de la simulation est d'accéder à des grandeurs prépondérantes difficiles à atteindre expérimentalement, comme l'aire de la surface liée (RBA, relative bonded area) ou la surface spécifique apparente de la structure.

Un grand nombre de paramètres de contexture, mécaniques et optiques caractérisent le papier. Le but final du projet étant de pouvoir prédire plusieurs de ces paramètres.

Pour débiter, le choix de deux paramètres a dû être fait. Sur des critères d'importance et d'accessibilité, la résistance à la rupture en traction et la perméabilité du papier ont finalement été choisis.

Les chapitres suivants de ce document présentent donc l'application de modèles physiques, tirés de la littérature, en vue de prédire les propriétés de résistance à la traction du papier (chapitre 3) et de perméabilité à l'air de la microstructure (chapitre 4).

Chapitre 3

Prédiction de la résistance à la traction

3.1 Introduction

La longueur de rupture est la grandeur la plus utilisée par les papetiers pour caractériser leurs papiers. C'est aussi la plus étudiée en laboratoire et la plus référencée en littérature. Le choix de cette grandeur s'est donc fait naturellement pour toutes ces raisons.

Un nombre important de modèles analytiques est publié dans la littérature. Mais l'on retrouve aussi des simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis ou les théories de percolation.

Le choix des outils de prédiction de la longueur de rupture s'est porté sur des modèles de type analytique, présentant actuellement les meilleures prédictions, mais aussi les plus simples à mettre en œuvre. Ces modèles ont pour inconvénient majeur de ne pas prédire l'élongation de la structure mais seulement la valeur de la force à la rupture.

Ce chapitre présentera successivement la mesure de la résistance à la traction, le choix de modèles analytiques, la construction de ces modèles, leur introduction dans la simulation et finalement les prédictions de la simulation.

3.2 Mesure de la résistance à la traction

Les mesures de la résistance à la traction s'effectuent suivant des normes [48]. Une bande de papier est coupée avec des dimensions prédéfinies (15 *mm* de largeur) et placée entre deux mors séparés d'une distance de 10 *cm*. La mesure consiste à éloigner les mors avec une vitesse constante 10 *mm/min* et d'enregistrer les contraintes imposées à la bande de papier jusqu'à sa rupture. Le graphique de la figure 3.1 présente deux exemples de rhéogrammes obtenus pour des formettes de résineux faiblement et fortement raffinés [3].

Le rhéogramme obtenu lors d'un essai de traction peut souvent être divisé en deux parties, une partie linéaire définie comme la partie élastique et une partie asymptotique définie comme la partie plastique. La force maximum enregistrée par le rhéogramme lors d'un essai est la force à la rupture.

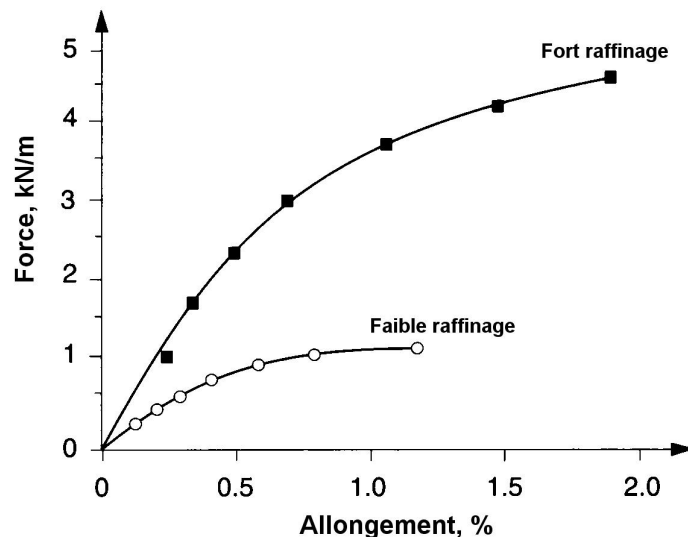


FIG. 3.1 – Rhéogrammes en traction de formettes avec différents degrés de raffinage [3].

La force à la rupture du papier est souvent ramenée à une grandeur nommée “longueur de rupture”. Cette grandeur représente la longueur sous laquelle une bande de papier casse sous son propre poids. L’utilisation de ce paramètre a pour avantage de limiter l’influence du grammage et de la largeur de l’échantillon. Elle est obtenue par l’équation suivante :

$$LR = \frac{F}{W \cdot l \cdot g} \quad (3.1)$$

où LR représente la longueur de rupture (m), F la force à la traction (N), W le grammage, l la largeur de la bande de testée et g l’accélération de la pesanteur.

3.3 Etude de la résistance à la rupture

Un grand nombre d’études ont été réalisées pour définir l’influence de divers paramètres sur la longueur de rupture. Entre autres, Kane et coll. [49] étudient en 1972 l’influence du raffinage sur différentes pâtes à papier et montrent que le raffinage augmente la densité de la structure et sa longueur de rupture. Ils remarquent que l’action du raffinage entraîne une évolution linéaire entre masse volumique et longueur de rupture. Dans le même article, ils mettent en évidence les mêmes effets sur le papier sous l’action du pressage. Dionisios [50] montre que la formation du papier (hétérogénéité de matière) avec la présence de floes a une influence sur la longueur de rupture. L’influence de la morphologie des fibres et, plus précisément, la longueur a aussi été mise en évidence [51]. Finalement l’ajout de produits comme l’amidon cationique [52] a également un impact important sur les caractéristiques mécaniques du papier.

On peut montrer que la plupart des opérations (de la mise en pâte à l'obtention d'une feuille sèche) influençant la résistance à la rupture du papier ont une action sur le nombre de liaisons inter fibres par unité de surface. Plus ce nombre de liaisons est important et plus la résistance à la rupture est grande. En plus de ces opérations, la morphologie des fibres est un facteur bien connu des papetiers pour son influence sur la longueur de rupture. Les micro défauts (coude, vrille, ponctuation) des fibres, par leur présence, affectent également la résistance des fibres et donc celle du papier.

Du fait de l'influence d'un grand nombre de paramètres sur la longueur de rupture, une modélisation totale de cette grandeur est difficile, d'autant plus que la relative fragilité et l'inhomogénéité du matériau papier introduit une difficulté supplémentaire, liée à la présence de défauts dans la structure. Cette présence de défauts oppose deux approches de modélisation de la longueur de rupture. La première approche considère que la rupture du papier est contrôlée par les macro-défauts présents dans la structure et qu'elle peut être décrite par les théories des points faibles. Par exemple, Silvy [53] considère "que la résistance d'un matériau à la structure hétérogène est définie par celle de ses points faibles. A ce titre, la résistance dépend de la dimension de l'éprouvette en essai, la probabilité de l'existence de points faibles augmentant avec la dimension de l'échantillon".

D'autres, comme Shallhorn [20] et Niskanen [54] [55], pensent que c'est la micro structure du matériau qui contrôle la longueur de rupture. Selon Niskanen "l'homogénéité des valeurs de la longueur de rupture suggère que la longueur de rupture n'est pas contrôlée par des défauts macroscopiques, comme des trous, des impuretés, des bûchettes, etc. Bien sûr quelques défauts existent dans le papier et causent sa rupture. Mais leurs effets peuvent être vus lorsque la distribution de résistance est mesurée avec un assez grand nombre d'échantillons. De plus, ces défauts sont rarement présents dans les mesures de longueur de rupture en laboratoire. Si l'opposé était vrai on pourrait observer le long de toutes les lignes de fractures des défauts macroscopiques".

Dans les deux cas, des mesures viennent étayer les opinions. Silvy et Page [53] montrent la diminution de la force à la rupture pour une augmentation de la distance entre les mors. La diminution de la rupture peut atteindre 20% pour un écartement des mors allant de 3 à 75 cm. Niskanen quant à lui s'appuie sur des valeurs du module de Weibull (équation 3.2), pour reconnaître à la microstructure une influence majoritaire.

La réponse, ou du moins le choix de l'une ou l'autre des opinions, est nécessaire car elle définit le type de modèle à employer. De plus, cela indique si la structure simulée peut être représentative d'une vraie structure, car si la longueur de rupture est réellement contrôlée majoritairement par ces points faibles, alors la taille de la structure simulée est beaucoup trop faible.

Pour déterminer si les formettes de pâtes non raffinées utilisées dans cette étude tendent à avoir un comportement mécanique plutôt influencé par la microstructure ou les macro-défauts, une étude du module de Weibull a été réalisée.

La probabilité de survie $p_s(\sigma, V_0)$ d'une population d'échantillons de même volume V_0 , soumis à une contrainte σ uniforme est définie par :

$$p_s(\sigma, V_0) = \exp \left[- \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \right] \quad (3.2)$$

où m est le module de Weibull et σ_0 est une contrainte de normalisation (constante).

L'influence du module de Weibull sur la probabilité de survie est présentée figure 3.2. La craie qui est typiquement un matériau considéré comme fragile a un module de Weibull de 5, alors que l'acier inoxydable a un module de Weibull très proche de 100. L'application de la formule de Weibull aux valeurs obtenues pour les formettes des pâtes étudiées a permis de tracer la courbe représentée dans le graphique 3.2 et de déterminer la valeur moyenne pour ces formettes du module de Weibull à environ 15.

Généralement, un module de Weibull inférieur à 12 est caractéristique d'une faible homogénéité du matériau et un module de Weibull supérieur à 20 est caractéristique d'une forte homogénéité du matériau. Bien entendu la valeur trouvée pour les formettes est entre ces deux valeurs. Mais comme on peut le voir sur la figure 3.2, l'effet du module de Weibull n'est pas linéaire. On peut donc considérer qu'un matériau avec un module de Weibull de 15 a plutôt tendance à être homogène et donc contrôlé par sa microstructure.

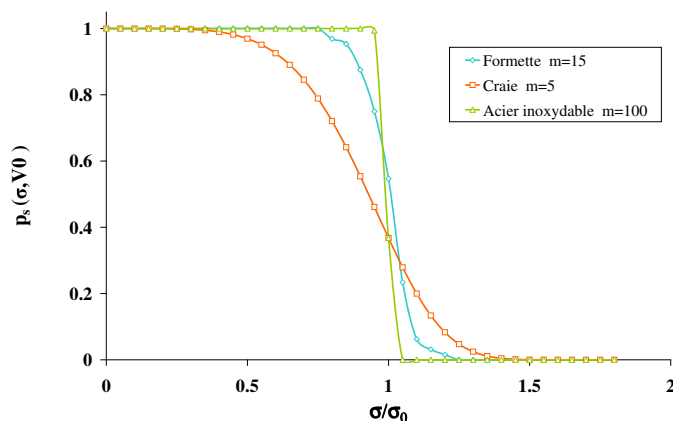


FIG. 3.2 – Probabilité de survie à la rupture de différents matériaux en fonction de leur module de Weibull.

De plus, un point important reste à prendre en compte. Silvy [53] a montré que, en fonction de la taille de l'échantillon, une variation de 20% de la valeur moyenne de la longueur de rupture pouvait être observée. Mais si l'on regarde l'influence de facteur comme la morphologie des fibres et le raffinage, la valeur de longueur de rupture peut être multipliée par 10. Les paramètres structuraux peuvent donc influencer la longueur de rupture de 1000% alors que les macro-défauts ne la font varier que de 20%. Ces remarques permettent d'affirmer que le développement d'un modèle s'appuyant uniquement sur les caractéristiques structurales, même s'il est incomplet, permettra de mettre en évidence les grandes variations et d'obtenir une prédiction relativement bonne.

Plusieurs modèles s'appuyant exclusivement sur la structure du papier ont été publiés [20] [19] [56] [57] [58]. Jayaraman [59] publie en 1998 une revue exhaustive qui présente ces différents modèles et leurs points communs.

Les paragraphes suivants vont présenter les deux modèles les plus utilisés, celui de Page et celui de Shallhorn et Karnis, l'objectif étant de définir leurs principes et leurs limites. Ces modèles et leur construction vont être présentés en détail, cette étape est nécessaire à la compréhension du choix des modèles et à leur modification en vue d'une introduction dans la simulation. Par la suite, l'implantation d'un de ces modèles dans la simulation et son amélioration grâce à l'outil informatique seront présentées.

3.4 Modèle de Page

Les indications, commentaires et hypothèses effectués dans les paragraphes suivants sont tirés de l'article de Page [19]. Le modèle de Page, publié en 1969, s'appuie sur l'idée que la longueur de rupture du papier peut s'aborder en termes d'importance relative entre la résistance des fibres et celle des liaisons inter-fibres.

La première étape de la théorie de Page fait l'hypothèse que, sous l'action d'une charge mécanique en traction, la contrainte se répartit dans la bande de papier. Si l'on considère les fibres qui coupent la ligne qui va devenir la ligne de fracture, ces fibres lors de la propagation de la fracture supportent tour à tour la charge avec, dans certains cas, rupture. En supposant que la formation du papier est suffisamment bonne pour que le nombre de fibres traversant la ligne de fracture ne soit pas significativement plus faible que sur n'importe quelle autre ligne perpendiculaire à la bande de papier et en considérant que seules les fibres qui rompent résistent à la charge, alors on peut écrire que :

$$LR = \frac{n_f \cdot Z_c}{n_f + n_p} \quad (3.3)$$

où

- LR est la longueur de rupture ;
- n_f est le nombre de fibres coupant la ligne de fracture, supportant la charge et qui cassent ;
- n_p est le nombre de fibres coupant la ligne de fracture et sont arrachées intactes ;
- Z_c est la longueur de rupture dans le cas où toutes les fibres coupant la ligne de fracture cassent.

Le paramètre Z_c peut être obtenu par la mesure de la longueur de rupture à mors jointifs. Cette mesure, qui vient déterminer la résistance de toutes les fibres traversant la ligne de fracture, donne une information sur la valeur maximum de la longueur de rupture (cas de la rupture de toutes les fibres). Le paramètre Z_c n'est pas égal à la mesure Z obtenue par l'appareil de mesure à mors jointifs, mais ces deux grandeurs peuvent être reliées en tenant compte du coefficient de Poisson μ :

$$Z_c = Z \cdot (1 - \mu^2) \quad (3.4)$$

En considérant que ce coefficient est égal à $1/3$, la combinaison des équations 3.3 et 3.4 permet d'écrire :

$$LR = \frac{8 \cdot n_f \cdot Z}{9 \cdot (n_f + n_p)} \quad (3.5)$$

Dans son article, Page fait remarquer que l'étude de résultats publiés par van der Akker [60] montre clairement (figure 3.3) que la résistance à la rupture augmente linéairement avec le taux de fibres cassées, analyse qui correspond parfaitement avec l'équation 3.5.

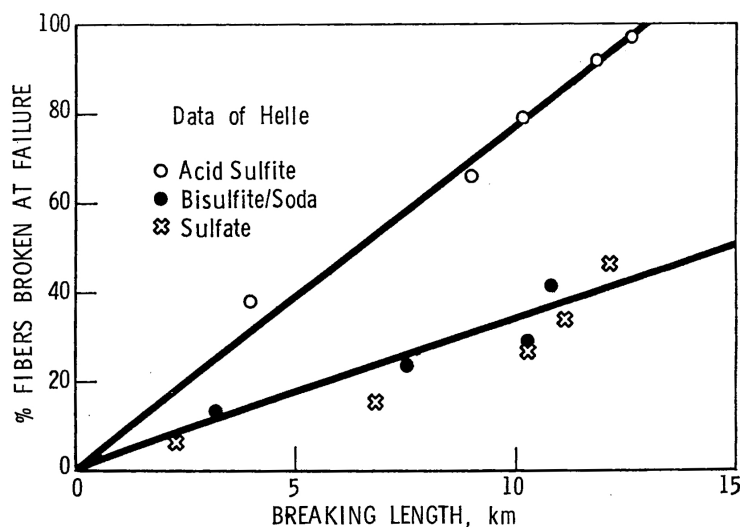


FIG. 3.3 – Evolution du nombre de fibres cassées en fonction de la longueur de rupture.

La seconde étape de la théorie de Page est d'introduire le taux de fibres qui cassent par rapport au taux de fibres qui résistent et sont arrachées avant de rompre, car ce sont les liaisons inter-fibres qui ont cédé. L'idée est d'introduire dans le modèle la résistance du papier liée aux liaisons inter-fibres. Une des possibilités est de l'introduire en faisant apparaître la résistance des fibres et la force d'arrachage :

$$\frac{n_p}{n_f} = f\left(\frac{\phi}{\beta}\right) \quad (3.6)$$

où

- ϕ est la résistance moyenne d'une fibre ;
- β est la force moyenne appliquée le long de la fibre pour l'arracher de la structure.

En combinant les équations 3.5 et 3.6, on obtient :

$$\frac{1}{LR} = \frac{9}{8} \left[\frac{1}{Z} + \frac{1}{Z} \cdot f\left(\frac{\phi}{\beta}\right) \right] \quad (3.7)$$

La fonction inconnue $f(\phi/\beta)$ doit représenter l'évolution du comportement d'une fibre moyenne, c'est-à-dire prendre en compte la probabilité que la fibre soit arrachée du média ou coupée. Lorsque la résistance des fibres est grande devant la résistance des liaisons

toutes les fibres sont arrachées du media en restant intactes et la fonction $f(\phi/\beta)$ doit tendre vers l'infini. Lorsque la résistance des liaisons est grande devant la résistance des fibres, toutes les fibres cassent lors de la fracture et la fonction $f(\phi/\beta)$ doit tendre vers zéro. Finalement lorsque la résistance des fibres est égale à la résistance des liaisons, les fibres ont une chance égale d'être arrachées ou de rompre et la fonction $f(\phi/\beta)$ doit être égale à 1.

Il existe un nombre infini de fonctions qui répondent à ces conditions. Page choisit la plus simple, $f(\phi/\beta)=\phi/\beta$, l'équation 3.7 devient ainsi :

$$\frac{1}{LR} = \frac{9}{8} \left[\frac{1}{Z} + \frac{1}{Z} \cdot \frac{\phi}{\beta} \right] \quad (3.8)$$

Selon van den Akker, la résistance des fibres ϕ est liée à la longueur de rupture à mors jointifs par l'équation :

$$\phi = \frac{8}{3} \cdot A \cdot \rho \cdot g \cdot Z \quad (3.9)$$

où

- A est la section moyenne des fibres ;
- ρ est la masse volumique du matériau fibreux ;
- g est l'accélération de la pesanteur.

La force de nécessaire pour arracher une fibre peut s'exprimer en fonction de la force de liaison et de surface liée de la fibre :

$$\beta = \tau_f \cdot P \cdot \frac{L}{4} \cdot RBA \quad (3.10)$$

où

- τ_f est la force de liaison par unité de surface ;
- P est le périmètre moyen de la section des fibres ;
- L est la longueur moyenne des fibres, ($L/4$ représente la longueur moyenne arrachée) ;
- RBA est l'aire de la surface liée.

En combinant les équations 3.8 et 3.9 et 3.10, on obtient :

$$\frac{1}{LR} = \frac{9}{8 \cdot Z} + \frac{12 \cdot A \cdot \rho \cdot g}{\tau_f \cdot P \cdot L \cdot RBA} \quad (3.11)$$

Cette équation peut être écrite comme suit :

$$\frac{1}{LR} = \frac{1}{C} + \frac{1}{B} \quad (3.12)$$

où

- C est l'indice qui décrit uniquement la résistance à la rupture des fibres ;
- B est l'indice qui décrit uniquement la résistance à la rupture des liaisons inter-fibres.

L'inverse de la longueur de rupture peut donc être exprimé par la somme d'un terme lié à la résistance des fibres et d'un terme lié à la résistance des liaisons.

Le graphique (figure 3.4) présente les résultats de l'équation 3.11 décrivant l'évolution de la longueur de rupture en fonction du rapport résistance des fibres sur résistance des liaisons, pour des unités de mesures arbitraires. L'évolution de la fonction répond bien à l'idée selon laquelle au début, pour des résistances des liaisons inter-fibres faibles, la longueur de rupture est faible puis, avec l'augmentation de la résistance des liaisons, la longueur de rupture augmente linéairement jusqu'à la rupture des premières fibres et finalement atteint une asymptote définie comme la somme des forces nécessaires à rompre toutes les fibres traversant la ligne de fracture (Z_c).

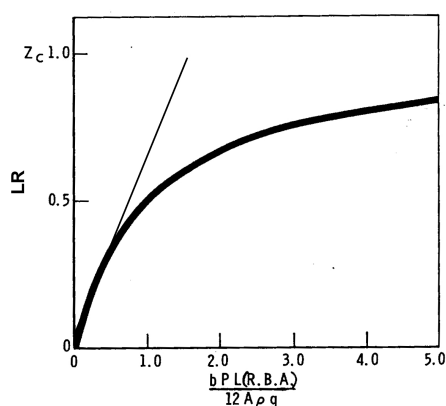


FIG. 3.4 – Tracé de l'équation théorique 3.11 avec des unités arbitraires, décrivant l'évolution de la longueur de rupture du papier en fonction du rapport force de rupture des fibres sur force de liaison des fibres.

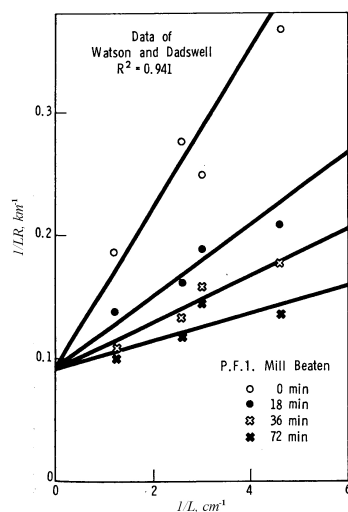


FIG. 3.5 – Tracé de l'inverse de la longueur de rupture en fonction de l'inverse de la longueur des fibres pour les données mesurées par Watson et Dadswell [61].

L'influence de la longueur des fibres a été validée par Page avec les données de Watson et Dadswell [61]. Watson et Dadswell ont étudié quatre pâtes Kraft avec des longueurs de fibres différentes, à quatre niveaux de raffinage. Comme le montre la figure 3.5, l'inverse de la longueur de rupture évolue linéairement avec l'inverse de la longueur des fibres et toutes les droites se coupent à l'origine pour une valeur représentant Z_c de 12.30 km, valeur raisonnable pour le type de pâte étudié selon Page. L'équation 3.11 permet bien entendu d'arriver aux mêmes conclusions.

3.5 Modèle de Shallhorn et Karnis

Le modèle de Shallhorn et Karnis [20], publié en 1979, s'appuie sur les mêmes idées que le modèle de Page. La résistance à la rupture du papier peut s'exprimer en fonction de paramètres structuraux comme la longueur des fibres, la résistance des liaisons inter-fibres et la résistance à la rupture des fibres.

La théorie de Shallhorn et Karnis s'appuie sur plusieurs points :

- le papier est considéré comme un milieu continu ;
- une fibre est directement ou indirectement enchevêtrée avec les autres fibres ;
- la géométrie des fibres (longueur, rayon) de toutes les fibres est la même ;
- toutes les fibres sont orientées perpendiculairement à la ligne de fracture ;
- la résistance des liaisons et la résistance des fibres contribuent ensemble à la résistance à la rupture du papier.

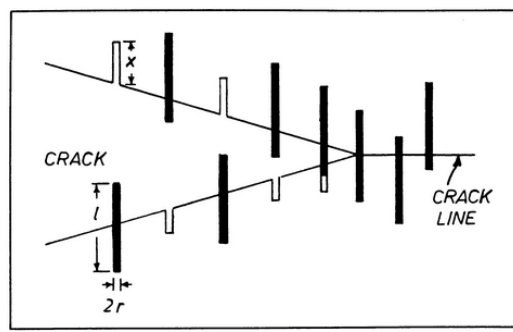


FIG. 3.6 – Schéma idéal de la propagation d'une fracture durant un essai de traction.

La première partie de la théorie de Shallhorn et Karnis considère que si une fibre est enchevêtrée d'une longueur x dans une matrice fibreuse (figure 3.6), la force nécessaire pour arracher cette fibre qui reste intacte est :

$$F = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot \tau \cdot x \quad (3.13)$$

où

- r est le rayon de la fibre ;
- τ est la force de liaison par unité de surface ;
- x est la longueur enchevêtrée.

En faisant un bilan sur la ligne de fracture, on trouve que la force nécessaire pour arracher toutes les fibres peut s'exprimer par :

$$F = \int_0^{L/2} (2N/L)(2\pi r\tau x)dx = N\pi r\tau L/2 \quad (3.14)$$

où N est nombre de fibres coupant la ligne de fracture par unité de longueur et L la longueur des fibres. L'équation 3.14 permet donc de calculer la force à la rupture d'un papier dans le cas où la force de liaison des fibres est suffisamment faible pour que les fibres ne rompent pas. La deuxième partie de la théorie de Shallhorn et Karnis considère que si la force de liaison par unité de surface est suffisamment grande, certaines fibres suffisamment enchevêtrées dans la microstructure de fibres peuvent casser. La longueur d'enchevêtrement critique x_c et la force de liaison critique τ_c peuvent s'exprimer respectivement de la manière suivante :

$$x_c = \sigma r/2\tau \quad \text{et} \quad \tau_c = \sigma r/L \quad (3.15)$$

où σ est la force à la rupture par unité de surface. Dans le cas où τ est supérieur à τ_c la résistance à la rupture est donnée par :

$$T = \int_0^{\sigma r/2\tau} (2N/L)(2\pi r\tau x)dx + \int_{\sigma r/2\tau}^{L/2} (2N/L)\sigma\pi r^2 dx \quad (3.16)$$

Le premier terme représente la force nécessaire pour arracher les fibres enchevêtrées sur une longueur inférieure à x_c , le second terme représente la force nécessaire à casser les fibres enchevêtrées sur une longueur supérieure à x_c . Par intégration l'équation 3.16 devient :

$$T = N\pi r^2\sigma (1 - \sigma r/(2\tau L)) \quad (3.17)$$

L'équation 3.14 prédit une augmentation linéaire de la résistance à la rupture en fonction de L et de τ . Pour $\tau > \tau_c$, l'équation 3.17 prédit une augmentation jusqu'à la valeur asymptotique $N\pi r^2\sigma$ où toutes les fibres cassent. Le graphique de la figure 3.7 présente les prédictions du modèle de Shallhorn et Karnis en fonction de τ et de la longueur moyenne des fibres.

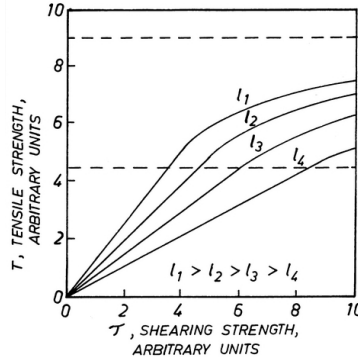


FIG. 3.7 – Tracé des équations théorique 3.14 et 3.17 avec des unités arbitraires, décrivant l'évolution de la longueur de rupture du papier pour différentes valeurs de τ et de L .

Pour introduire la valeur du RBA dans le modèle de Shallhorn et Karnis et pour pouvoir le comparer au modèle de Page, les deux équations 3.14 et 3.17 du modèle de Shallhorn et Karnis ont été respectivement modifiées comme suit :

$$F = N \cdot P \cdot \tau_f \cdot RBA \cdot \frac{L}{4} \quad (3.18)$$

$$F = N \cdot A \cdot \sigma \left(1 - \frac{\sigma A}{\tau_f \cdot RBA \cdot L \cdot P} \right) \quad (3.19)$$

où

- τ_f est la force des liaisons inter-fibres et peut être défini comme $\tau_f = \tau/RBA$;
- A est l'aire moyenne de la section des fibres ;
- P est le périmètre moyen des fibres.

3.6 Analyse et commentaire des modèles

Jayaraman [59] fait la revue des différents modèles analytiques développés pour prédire la longueur de rupture. Il montre en faisant un développement en série que le modèle de Shallhorn et Karnis peut aussi être écrit sous la forme si $\tau_f \cdot P \cdot L \cdot RBA$ est inférieur à 1 :

$$\begin{aligned} \frac{1}{F} &= \frac{1}{N \cdot \sigma \cdot A} \left(1 - \frac{\sigma \cdot A}{\tau_f \cdot RBA \cdot P \cdot L} \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{N \cdot \sigma \cdot A} \left\{ 1 + \frac{\sigma \cdot A}{\tau_f \cdot RBA \cdot P \cdot L} + \left(\frac{\sigma \cdot A}{\tau_f \cdot RBA \cdot P \cdot L} \right)^2 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (3.20)$$

De plus l'équation peut être réduite si l'on fait l'hypothèse que $\tau_f \cdot P \cdot L \cdot RBA \ll 1$:

$$\frac{1}{F} \approx \frac{1}{N \cdot \sigma \cdot A} + \frac{1}{N \cdot \tau_f \cdot P \cdot L \cdot RBA} = \frac{1}{C} + \frac{1}{B} \quad (3.21)$$

L'équation 3.21 est identique à celle de Page (équation 3.12). Bien que les modèles de Page et de Shallhorn ne partent pas exactement des mêmes hypothèses, ils arrivent à des expressions très proches. Le choix d'un des deux modèles pour la simulation n'a donc pas d'influence.

Par ailleurs ces deux modèles supposent que la valeur maximum de la longueur de rupture est atteinte lors de la propagation de la fracture dans la structure, alors que Davison [62], après avoir réalisé des films d'essais de traction avec une caméra rapide à 1000 images par seconde, affirme que la valeur maximum de force enregistrée est obtenue juste avant le moment où la fracture de la bande se propage. Après analyse des films réalisés, Davison arrive à deux autres conclusions, la première est que la rupture du papier commence à partir d'un ou de deux points situés sur le bord de la bande, donc que la rupture du papier suit les lois de la mécanique des points faibles. La seconde conclusion est que lorsque la fracture commence, la bande se vrille légèrement et un phénomène de déchirure s'opère.

A partir des modèles de Page, de Shallhorn et Karnis, des observations de Davison et des mesures de Silvy, il est possible de se faire une idée des phénomènes intervenant lors d'un essai de traction du papier et de développer une théorie légèrement différente. On estime qu'un essai de résistance à la rupture peut être séparé en deux étapes distinctes. La première est la mise sous contrainte de la bande suivie d'un allongement, ceci jusqu'à ce que la force exercée sur la bande soit suffisamment importante pour qu'une amorce de rupture se crée sur le bord de la bande, à une position où cette résistance est plus faible. A cet instant précis, la valeur maximum de la force est obtenue et très peu de fibres ont cassé. Pendant la deuxième phase, la fracture se propage. Lors de ce phénomène la distribution des charges sur les fibres est totalement différente et la rupture d'un nombre important de fibres peut avoir lieu. Ainsi on comprend très bien l'influence des points faibles qui contrôlent au dernier moment, la dispersion de la valeur maximum de la longueur de rupture, alors que la microstructure contrôle plus la valeur moyenne. Ces idées expliquent aussi l'influence prépondérante des liaisons inter-fibres. Il est clair que même si la valeur de la force à la rupture est déterminée juste avant l'apparition de la fracture, on peut, pour prédire la valeur de cette force, continuer à raisonner sur la somme des forces nécessaires pour arracher toutes les fibres coupant la ligne supposée de fracture. D'ailleurs ce raisonnement explique mieux le fait de sommer toutes ces forces, alors que la modélisation de la propagation d'une fracture ne justifie pas cette valeur moyenne, car la distribution des contraintes dans le matériau est totalement différente.

3.7 Introduction du modèle de Shallhorn et Karnis dans la simulation

Dans le cas de cette étude, les formettes réalisées pour différentes pâtes sont toutes obtenues à partir de pâtes brutes (non raffinées). Ainsi, la valeur de la force des liaisons inter-fibres est relativement faible, ce qui diminue encore les chances d'une rupture de fibres. C'est pour cela que le choix du modèle de Shallhorn et Karnis sans rupture de fibres a été fait. Après modification pour tenir compte du RBA, ce modèle s'écrit :

$$F = N \cdot P \cdot RBA \cdot \tau_f \cdot \frac{L}{4} \quad (3.22)$$

Le facteur $L/4$ représente la longueur moyenne de fibre à arracher si toutes les fibres ont exactement la même longueur. Mais si l'on fait un bilan sur une ligne de fracture donnée, il est clair que les fibres les plus longues ont statistiquement plus de chance que les fibres courtes de couper la ligne de fracture. En d'autres termes, si l'on calcule la longueur moyenne arithmétique des fibres coupant la ligne, elle est supérieure à la longueur moyenne arithmétique des fibres d'une population donnée.

Par un calcul analytique, on peut démontrer, en s'appuyant sur les travaux de Buffon¹, que la longueur moyenne arithmétique des fibres coupant une ligne est égale à la longueur moyenne pondérée en longueur des fibres d'une population donnée.

¹ Buffon, G. "Essai d'arithmétique morale." Histoire naturelle, générale et particulière, Supplément 4, 46-123, 1777. La méthode de Buffon permet d'estimer la valeur de π .

En effet, Buffon a calculé la probabilité qu'une aiguille déposée de manière aléatoire (centre de gravité et orientation) a de couper une ligne. Lancer une aiguille au hasard revient à choisir aléatoirement une abscisse X dans l'intervalle $[0; a/2]$ puis une orientation θ dans l'intervalle $[-\pi/2; \pi/2]$ (figure 3.8).

$$X \leq \frac{L}{2} \cos \theta \quad (3.23)$$

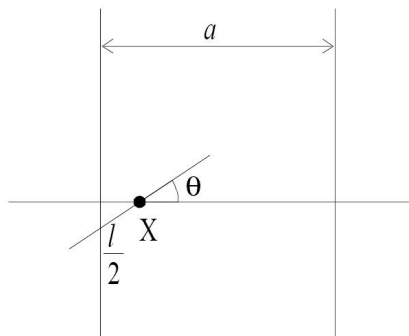


FIG. 3.8 – Schéma du lancer aléatoire d'une aiguille.

Ainsi l'aiguille coupera la ligne si :

$$X \leq \frac{L}{2} \cos \theta \quad (3.24)$$

La probabilité d'une intersection entre l'aiguille et la ligne est :

$$P(X \leq \frac{L}{2} \cos \theta) = \frac{\frac{L}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos u \, du}{\frac{a}{\pi}} = \frac{2L}{\pi a} \quad (3.25)$$

Si on lance n_i aiguilles de longueur L_i , le nombre d'aiguilles qui couperont la ligne sera :

$$n'_i = n_i P_i \quad (3.26)$$

Ainsi, la moyenne arithmétique des longueurs de fibres coupant la ligne est :

$$L_l = \frac{\sum n'_i L_i}{\sum n'_i} = \frac{\sum \frac{2L_i}{\pi a} n_i L_i}{\sum \frac{2L_i}{\pi a} n_i} = \frac{\sum n_i L_i^2}{\sum n_i L_i} \quad (3.27)$$

où L_l est la longueur moyenne pondérée en longueur.

Si l'on ramène cette démonstration au cas du papier, on peut bien conclure que la longueur moyenne arithmétique des fibres coupant la ligne de fracture est égale à la longueur moyenne pondérée en longueur de la distribution de fibres. Cette constatation explique une tendance empirique qui consiste à différencier les pâtes entre elles plutôt par rapport à la longueur moyenne pondérée en longueur que par rapport à la longueur moyenne arithmétique. De plus, cela montre que les modèles analytiques de Page et

Shallhorn devraient plutôt utiliser la longueur moyenne pondérée en longueur que la longueur moyenne arithmétique. Le modèle de Shallhorn et Karnis devrait donc être modifié et s'écrire :

$$F = N \cdot P \cdot RBA \cdot \tau_f \cdot \frac{L_l}{4} \quad (3.28)$$

Pendant la simulation, chaque fois qu'un nouvel objet est déposé, s'il coupe la ligne de fracture, la plus petite des deux longueurs coupant la ligne est retenue pour calculer la force nécessaire pour arracher la fibre. A la fin de la simulation les forces nécessaire pour arracher toutes les fibres qui coupent la ligne de fracture sont sommées pour déterminer la valeur de la résistance à la rupture. Ainsi de manière indirecte la simulation intègre les constats faits sur la longueur pondérée en longueur et le facteur $L/4$.

3.8 Détermination de la valeur du RBA simulée

L'introduction dans la simulation du modèle de Shallhorn et Karnis modifié nécessite la détermination du RBA (relative bonded Area) des structures simulées [63]. Il est défini comme étant le rapport entre l'aire totale liée et l'aire totale développée par les fibres. L'aire totale d'une fibre simulée est facilement calculable. Par contre, l'aire de contact entre fibres est plus délicate à déterminer numériquement. Lors de la simulation de chaque nouvelle fibre, cette fibre vient se déposer à la surface de la structure et l'algorithme de conformation donne à cette fibre la forme la plus proche possible de la réalité. Il permet aussi de définir s'il y a ou non contact entre la fibre déposée et les fibres présentes à la surface. Par la suite, la détermination du RBA est relativement simple. Si l'on considère que chaque point discrétisant la fibre correspond à une aire donnée (environ $30 \mu m^2$), on peut exprimer le RBA comme étant le rapport entre la somme des aires représentées par les points en contact et l'aire totale développée par la fibre.

La finesse du maillage des fibres (2000 points par millimètre) est nécessaire à la détermination précise de la valeur du RBA. La figure 3.9 présente un exemple de conformation d'une fibre sur une autre et les figures 3.10 et 3.11 montrent, respectivement, l'aire réelle de contact et l'aire calculée par la simulation pour ces deux fibres. La valeur de l'aire réelle de contact est de $1325 \mu m^2$ (figure 3.10), la valeur déterminée par la méthode des points de contact est de $1340 \mu m^2$ (figure 3.11). Dans ce cas l'erreur sur la détermination est de 1.1%, erreur considérée comme largement acceptable, d'autant plus qu'il s'agit d'un des cas les plus défavorables car pour un angle de 90° ou de 0° entre les fibres l'erreur devient pratiquement nulle.

La détermination numérique de la valeur du RBA est un atout important pour la simulation, car la mesure direct de ce paramètre est très délicate. Les méthodes classiques mises en œuvre (adsorption d'azote (BET) et évolution du coefficient de diffusion de la lumière) sont lourdes et fastidieuses.

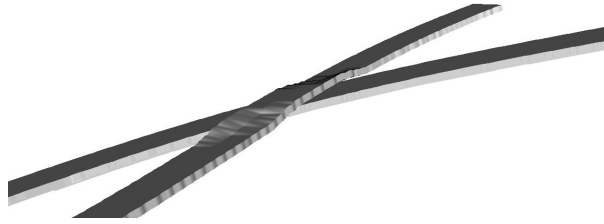


FIG. 3.9 – Conformation d’une fibre sur une autre.

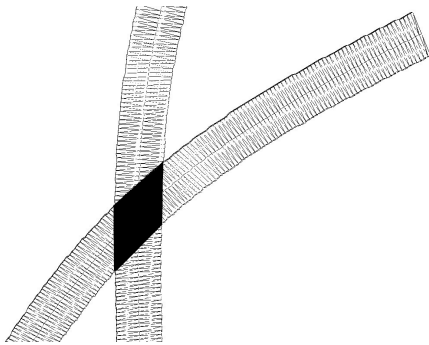


FIG. 3.10 – Aire de contact réelle entre les deux fibres de la figure 3.9 (zone noire, $1325 \mu m^2$).

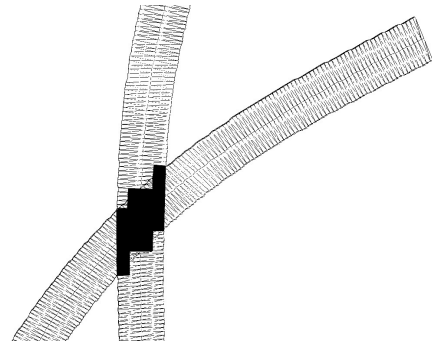


FIG. 3.11 – Aire de contact déterminée à partir des points de contact entre les deux fibres de la figure 3.9 (zone noire, $1340 \mu m^2$).

3.9 Résultats de la simulation

Pour tester les capacités prédictives de la simulation, des formettes de $60 g/m^2$ ont été réalisées à partir des 15 pâtes Kraft brutes (non raffinées) blanchies présentées dans le chapitre précédent. Des essais de traction ont été réalisés sur ces différentes formettes. L’histogramme (figure 3.12) présente les résultats pâte par pâte et le graphique (figure 3.13) présente la comparaison entre les mesures et la simulation.

Les graphiques montrent clairement que les prédictions sont très proches des mesures réelles. Si l’on essaie de corrélérer les mesures avec les prédictions, on trouve une valeur de $R^2 = 0.90$. Il est important de spécifier que la valeur de τ_f (résistance des liaisons inter-fibres) était inconnue avant de simuler la résistance à la rupture. Cette valeur est d’ailleurs supposée par Shallhorn et par Page comme fonction de la pâte et donc diffère pour toutes les pâtes.

Pour prédire la longueur de rupture des formettes deux valeurs différentes de τ_f ont été déterminées, une pour les pâtes de feuillus où $\tau_f = 1 N/mm^2$ et une pour les pâtes de résineux où $\tau_f = 0.75 N/mm^2$. Bien entendu ces valeurs ont été choisies pour ajuster au mieux les résultats, mais il est intéressant de voir qu’avec seulement deux valeurs de τ_f on peut très bien expliquer l’évolution de la longueur de rupture pour une très large gamme de morphologie de fibres.

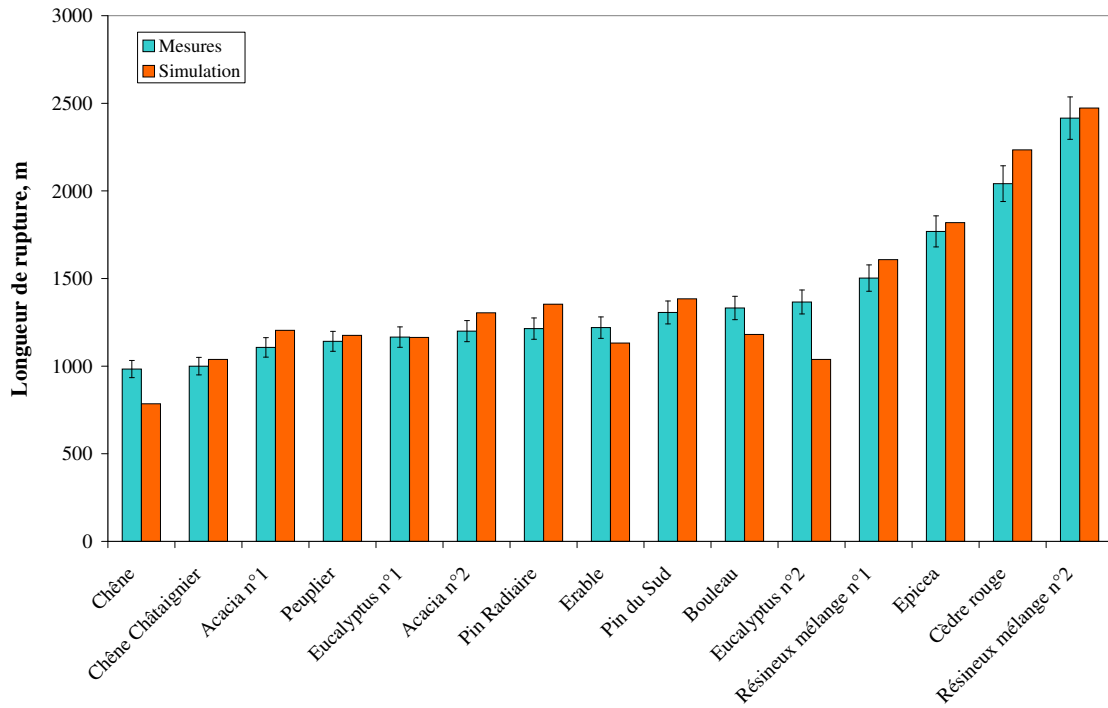


FIG. 3.12 – Histogramme des valeurs prédites et mesurées de la longueur de rupture pour 15 pâtes brutes Kraft blanchies.

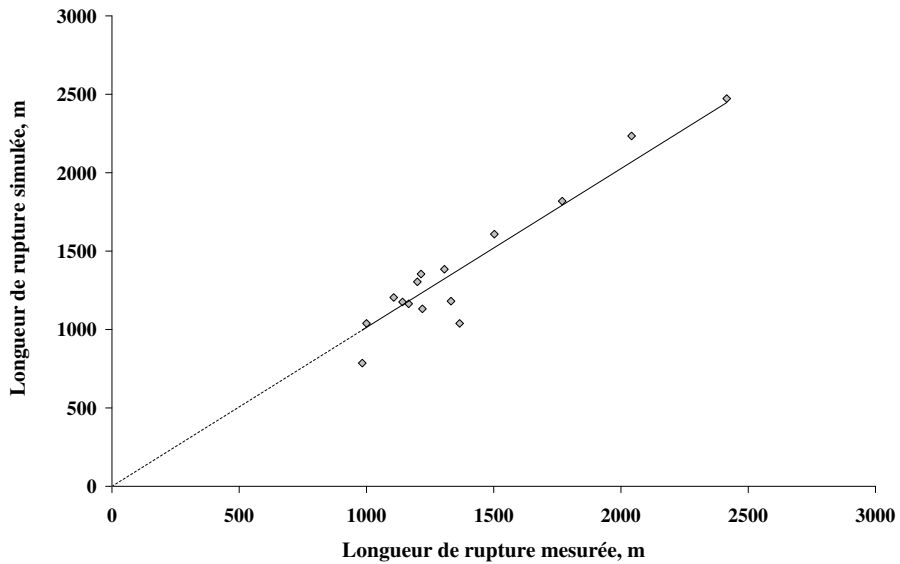


FIG. 3.13 – Tracé des valeurs prédites de la longueur de rupture en fonction des valeurs mesurées.

D'ailleurs on peut chercher l'explication de ces deux valeurs de τ_f dans la capacité des pâtes de feuillus et de résineux à être délignifiées, les feuillus ayant une concentration en lignine plus faible sont plus faciles à délignifier, ce qui peut permettre de mieux développer le potentiel de liaisons hydrogènes en surface des fibres.

Il faut aussi remarquer que les prédictions de la simulation semblent être meilleures pour les résineux que pour les feuillus (figures 3.12 et 3.13). A cela on peut trouver deux explications, la première est que les feuillus sont des pâtes morphologiquement plus complexes que les résineux avec un taux de fines plus important et des vaisseaux. La deuxième explication est que la longueur de rupture des feuillus évolue moins que celle des résineux, la fourchette de variations se situe entre 1000 et 1350 μm . Ainsi, la variation de longueur de rupture devient du même ordre que l'erreur de la simulation et la dispersion des mesures, une bonne corrélation est dans ce cas plus difficile à établir.

Le modèle de Shallhorn et Karnis modifié prédit une évolution linéaire de la longueur de rupture du papier en fonction de la longueur des fibres pondérée longueur. Le graphique (figure 3.14) présente les résultats des essais de longueur de rupture des pâtes en fonction de cette longueur moyenne. L'analyse de ce graphique permet de séparer les pâtes de feuillus (longueur moyenne inférieure à 1 mm) des pâtes de résineux. L'étude des pâtes de résineux montre que dans le cas de deux pâtes de Pin (pin du sud et pin radiaire) et malgré des longueurs de fibres importantes respectivement 2.2 et 2.5 mm la longueur de rupture des formettes obtenues avec ces pâtes est faible, moins de 1.4 km.

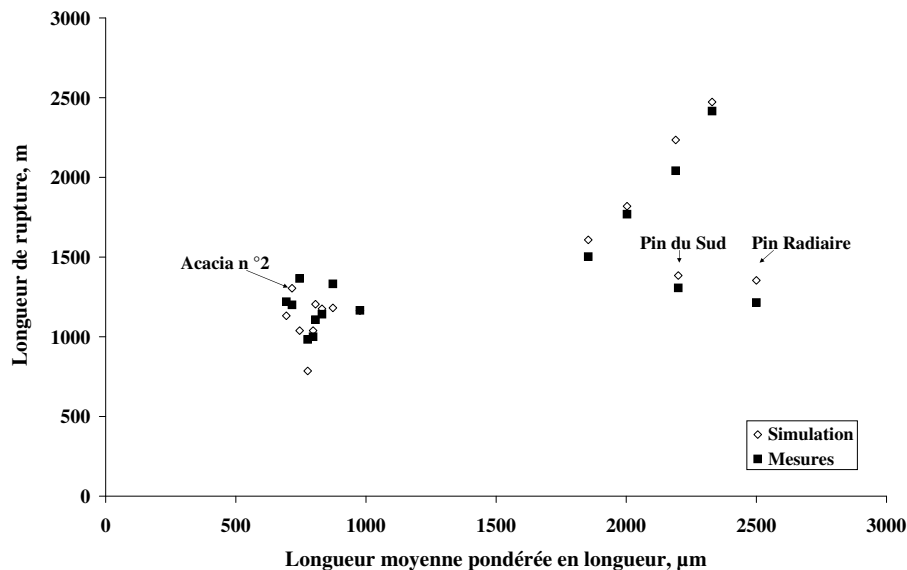


FIG. 3.14 – Valeurs prédites et mesurées de la longueur de rupture en fonction de la longueur moyenne pondérée en longueur des fibres.

Les pâtes de Pin du Sud et de Pin Radiaire sont connues pour l'importante masse linéique et épaisseur de leurs fibres, ainsi que pour leur longueur de rupture faible. L'épaisseur importante de ces fibres, respectivement 6.5 et 7 μm , diminue considérablement le

nombre de fibres coupant la ligne de rupture. Ainsi même si la force nécessaire pour arracher une fibre est importante, la diminution du nombre de fibres arrachées fait baisser la résistance globale du matériau. De même, si l'on compare les pâtes de pin du sud et de cèdre rouge qui possèdent en moyenne des longueurs pondérées en longueurs de fibres très proches, environ 2.2 mm , on met en évidence que l'importante différence de longueur de rupture (700 m) est liée au nombre de fibres coupées. En effet l'épaisseur importante des fibres de pin du sud entraîne une diminution du nombre de fibres arrachées de 38% par rapport aux fibres de cèdre rouge.

Une remarque identique peut être faite pour le cas de la pâte d'acacia n°2, la résistance à la rupture de cette pâte est proche de celle du pin radiaire alors que les fibres de l'acacia n°2 font partie des plus courtes de la gamme des pâtes étudiées (respectivement 2.5 et 0.7 mm). La taille réduite des fibres de la pâte d'acacia n°2 est compensée par la faible section de ces fibres. Ainsi lors de tests de traction le nombre de fibres arrachées est quatre fois plus important pour la pâte d'Acacia que pour celle du Pin Radiaire.

Les images de la figure 3.15 montrent de vue en coupe de réseaux formés dans un cas d'une pâte d'acacia (Acacia n°2) et dans l'autre d'une pâte de pin radiaire. L'analyse de ces images permet d'observer que les structures sont différentes et que pour le même grammage 60 g/m^2 , le nombre de fibres d'acacia n°2 est beaucoup plus important.

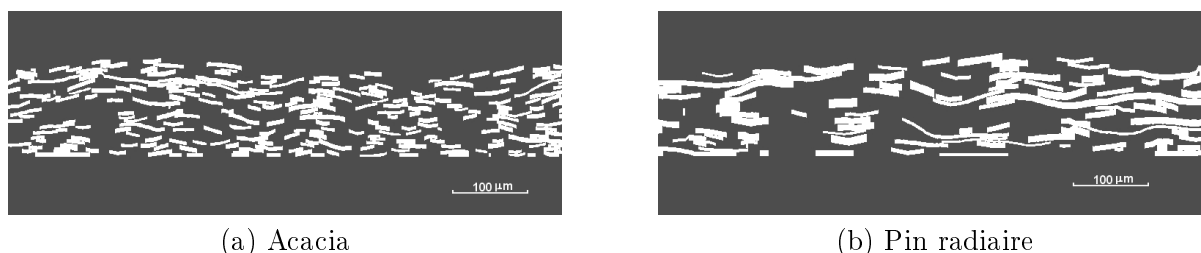


FIG. 3.15 – Vue en coupe d'un réseau simulé.

La bonne prédiction de la valeur de longueur de rupture pour ces cas particuliers montre la robustesse de la simulation et sa capacité à prédire l'influence de la morphologie des fibres sur la structure et les caractéristiques du papier.

3.10 Remarque sur la force nécessaire pour arracher une fibre

Davison [62] a réalisé des tests de traction qui consistent à tirer sur une fibre enchevêtrée dans une structure (figure 3.16). Les résultats obtenus par ces essais sont présentés dans le tableau 3.1. Ces essais ont été effectués sur 75 fibres à partir de formettes de résineux raffinées pendant 40 min , les résultats montrent que plus de la moitié des fibres sollicitées cassent et que la force moyenne nécessaire pour arracher une fibre enchevêtrée de 0.7 mm est d'environ 69 mN .

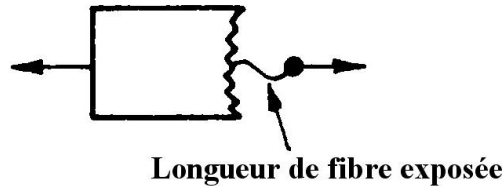


FIG. 3.16 – Schéma de l'essai de traction réalisé par Davison [62].

	Fibres intactes	Fibres cassées
Nombre de fibres arrachées	34	41
Longueur moyenne des fibres arrachées, mm	1.11	0.44
Longueur moyenne effective arrachée	0.7	0.28
Force moyenne pour arracher les fibres, mN	69	78

TAB. 3.1 – Résultats des essais d'extraction de fibres réalisés par Davison [62].

Il est possible d'utiliser les mesures réalisées par Davison pour déterminer si les valeurs de τ_f choisies pour la simulation sont représentatives de la réalité ou non. Dans le cas des pâtes non raffinées de résineux la simulation indique que la force moyenne nécessaire pour arracher une fibre enchevêtrée de 0.7 mm est de 11 mN ($F = 0.7 \cdot P \cdot RBA \cdot \tau_f$). Selon notre modèle la force nécessaire à l'arrachage d'une fibre est proportionnelle à la force de rupture du matériau. En d'autres termes pour une même pâte, l'action du raffinage se répercute directement sur la force nécessaire pour arracher une fibre.

Un essai de raffinage en laboratoire a été réalisé pendant 40 min (temps identique à l'essai de Davison), pour une pâte de résineux dans une pile Valley. Les résultats montrent une multiplication par 5 de la résistance à la rupture du papier. En s'appuyant sur le modèle de Shallhorn et Karnis, la force moyenne nécessaire pour arracher une fibre raffinée est 5 fois plus grande soit 55 mN , ce qui se rapproche de la valeur mesurée par Davison (69 mN).

Une étude plus précise permettrait sans doute de mieux valider ces résultats, mais d'ores et déjà ils montrent que les ordres de grandeur de la force moyenne nécessaires pour arracher une fibre sont bien prédits par la simulation.

3.11 Conclusion

Il a été montré dans ce chapitre que l'utilisation du modèle de Shallhorn et Karnis, et sa modification lors de l'introduction dans la simulation, ont permis de prédire la longueur de rupture des formettes en fonction de la morphologie des fibres, ceci pour une gamme de morphologie de fibres très large.

Les bonnes prédictions de cette grandeur confortent la simulation sur deux points, tout d'abord comme cela fut présenté lors de l'analyse du graphique (figure 3.14), la simulation prédit très bien l'influence de la morphologie des fibres sur la longueur de rupture, mettant en avant que la longueur des fibres n'est pas le seul facteur important. Le cas des pâtes de Pin du sud, de Pin Radiaire et d'Acacia ont permis de mettre en évidence l'influence de l'épaisseur et de la largeur des fibres.

De plus ces bonnes prédictions confortent encore plus l'idée selon laquelle la structure simulée est très proche de la structure réelle, car une différence de structure aurait eu un impact direct sur des paramètres comme le RBA ou le nombre de fibres coupées entraînant directement des erreurs de prédictions importantes.

De la même manière, les bonnes prédictions pour la longueur de rupture qui triplent pratiquement en fonction de la morphologie des fibres, reconforte dans l'idée que les prédictions du volume massique des structures simulées sont bonnes même si la valeur du R^2 entre prédictions et mesures est relativement faible. Pour des paramètres d'entrée pouvant varier du simple au triple, obtenir dans certains cas une forte variation et dans d'autres cas un résultat pratiquement constant de paramètres de sortie, avec une bonne représentation de la réalité (longueur de rupture et masse volumique), est une marque importante de la justesse d'une simulation.

Cette simulation ne prédit pas l'intégralité des facteurs influençant la longueur de rupture, comme le raffinage, le pressage ou l'orientation des fibres. On peut envisager de les prendre en compte en complexifiant le modèle. Par exemple, l'influence du temps de raffinage et de l'intensité de pressage sur la longueur de rupture est souvent linéaire. Pour une modélisation, la difficulté est surtout de trouver la valeur initiale de la longueur de rupture, ce qui est déjà résolu par la simulation. On peut donc penser que des modifications simples de la simulation pourront introduire ces paramètres.

Chapitre 4

Prédiction de la perméabilité

4.1 Introduction

Après avoir simulé des microstructures virtuelles très proches des microstructures réelles de formettes et après avoir prédit la résistance à la rupture de ces structures, le choix de prédire la perméabilité a été fait. Son importance pour certains produits finis comme les filtres ont orienté ce choix.

La prédiction de la perméabilité d'une microstructure se confronte au même choix initial que la prédiction de la résistance à la rupture, c'est-à-dire l'utilisation d'un modèle analytique ou numérique.

On trouve dans la littérature des modèles analytiques ([64], [65], [66]) permettant de prédire la perméabilité en fonction de paramètres de contexture comme la porosité, la surface spécifique et éventuellement la taille des pores. Ces modèles présentent l'avantage d'être peu coûteux en temps de calcul et faciles à inclure dans la simulation, mais utilisent des coefficients empiriques.

Par ailleurs, l'utilisation de modèles numériques comme la simulation d'écoulement, déjà validée dans de nombreux cas, a pour avantage de ne pas pouvoir être remise en cause. Si les prédictions de la simulation sont mauvaises, l'erreur ne peut venir que de la structure et inversement si les prédictions sont correctes cela implique que la structure est représentative d'une structure réelle.

La simulation d'écoulement n'est pas une réponse aux contraintes industrielles, car le temps de calcul peut être très long. A terme, elle peut permettre de développer un nouveau modèle empirique.

4.2 Ecoulement au travers d'un milieu poreux

L'écoulement au travers d'un milieu poreux engendre une perte de charge qui est la somme d'un terme inertiel et un terme visqueux. Lorsque le nombre de Reynolds est

suffisamment faible, le régime d'écoulement est un régime laminaire linéaire. Dans ce cas le terme d'inertie est négligeable, et la loi la plus utilisée pour d'écrire ce type d'écoulement est la loi de Darcy :

$$v = -\frac{k}{\mu}\nabla p \quad (4.1)$$

où v est la vitesse du fluide au travers d'un média homogène et k est la perméabilité intrinsèque, μ la viscosité dynamique du fluide et ∇p le gradient de pression.

La loi de Darcy fut introduite originalement comme une loi empirique, basée sur la mesure d'écoulement vertical au travers de lits de sable [67]. Il a été montré par la suite que cette loi était valide pour des réseaux fibreux [64] et des papiers.

Pour déterminer la perméabilité des papiers, l'idée générale est de mesurer le débit d'air qui s'écoule au travers de la structure pour une perte de charge prédéfinie. Dans le cas de cette étude l'appareil Bendtsen fut utilisé [68]. Cet appareil mesure le débit d'air traversant la feuille d'une section de 5 cm^2 sous une pression de 1.47 kPa. L'utilisation de la loi de Darcy permet avec ces données de calculer la perméabilité k du média.

4.3 Modèles empiriques

Le premier modèle empirique établi pour des milieux poreux est le modèle de Kozeny et Carman [64], dont l'expression est dans le cas d'un réseau fibreux :

$$k = \frac{\epsilon^3 d_{eff}^2}{36(1-\epsilon)^2 \kappa} \quad (4.2)$$

où ϵ est la porosité, κ la constante de Kozeny (5,5) et d_{eff} le diamètre effectif des fibres.

Ingmanson [65] a montré que la constant de Kozeny varie avec la porosité du milieu et a donc proposé une modification de l'expression sous la forme :

$$k = \frac{\epsilon^3}{c S^2} \quad (4.3)$$

$$c = \frac{3.5\epsilon^3[1 + 57(1 - \epsilon^3)]}{(1 - \epsilon)^{1/2}} \quad (4.4)$$

où ϵ est la porosité de la structure, S est la surface spécifique apparente avec $S = S_0 \cdot (1 - \epsilon)$, S_0 étant la surface spécifique des fibres.

Les coefficients de cette expression ont été établis pour des lits de fibres épais, dans le cas de fibres hydratées. On trouve dans la littérature la même expression avec d'autres valeurs de coefficients empiriques toujours dans le cas de réseaux fibreux épais.

L'introduction du modèle empirique d'Ingmanson dans la simulation est facile, car la porosité et la surface spécifique des fibres sont directement calculées. L'histogramme 4.1 compare les valeurs expérimentales et les prédictions de ce modèle pour les neuf pâtes brutes. Il montre clairement que, pour les cas étudiés, ce modèle n'est pas satisfaisant. Plusieurs raisons peuvent expliquer cela :

- les coefficients du modèles peuvent ne pas être appropriés aux pâtes étudiées.
- Les prédictions de porosité faites par la simulation et dans une moindre mesure l'erreur de prédiction de la surface spécifique, qui ont une incidence directe sur l'erreur du modèle.

Finalement il faut remarquer que ce modèle fut développé pour mettre en évidence l'influence de la porosité sur la perméabilité alors que dans le cas présent la porosité des réseaux étudiés est quasiment constante. Ainsi, l'étude de la perméabilité peut se ramener à l'analyse de l'influence de la surface spécifique des fibres.

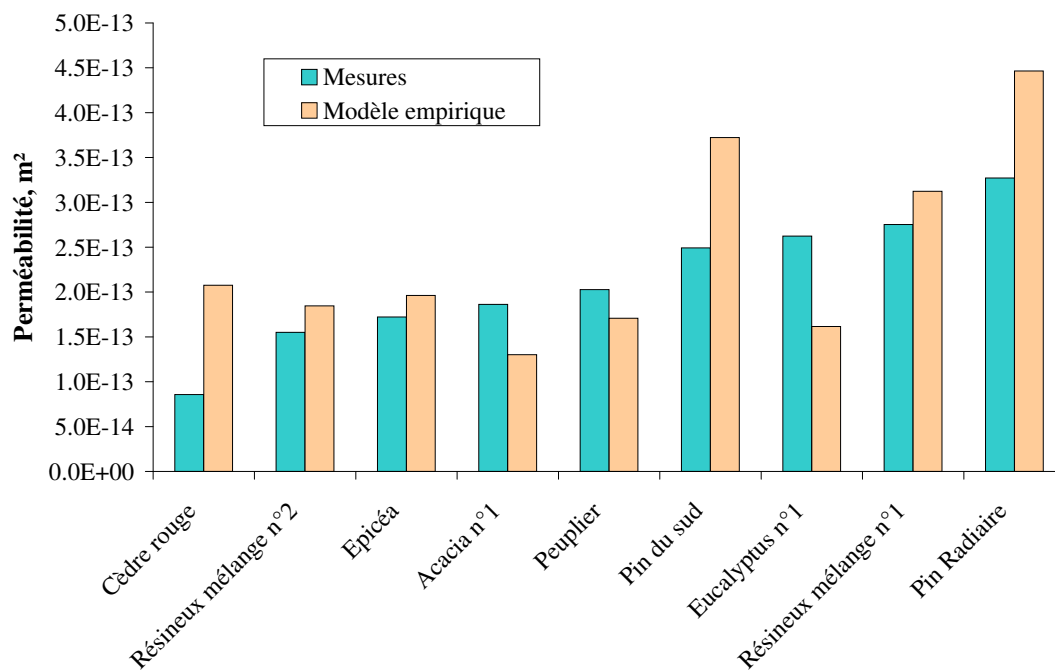


FIG. 4.1 – Valeurs mesurées et prédites (modèle d'Ingmanson [65]) de la perméabilité des formettes obtenues à partir de neuf pâtes différentes.

Les erreurs de prédiction de la perméabilité dans la gamme étudiée a amené à envisager la voie de la simulation numérique qui, bien que plus complexe et délicate à mettre en œuvre, a l'avantage de ne pas faire d'hypothèses sur des paramètres structuraux.

4.4 Méthode numérique de “Lattice Boltzmann”

La voie de la simulation numérique nécessite de disposer d’une matrice 3D définissant les zones de matière et de vide. Les structures virtuelles simulées répondent à cette contrainte. Leur introduction dans une simulation numérique d’écoulement est donc possible. En plus de fournir la valeur de perméabilité, ce type de simulation permet de visualiser l’écoulement au travers de la structure par des lignes de courant ou des champs de vecteurs. Un autre avantage des simulations numériques est la prise en compte de la structure en tant que telle. Celle-ci peut être composée d’un mélange de fibres, de fines, de charges, etc. La simulation numérique s’effectuera toujours de la même manière.

On rencontre généralement deux types de simulations numériques utilisant deux méthodes différentes. La première et, la plus couramment utilisée, consiste en chaque nœud d’un maillage à résoudre les équations différentielles liées au type d’écoulement par une méthode d’éléments finis [69] [70]. Malheureusement dans le cas de structures aux formes complexes comme les milieux poreux, cette méthode nécessite un maillage très fin et donc un temps de calcul rédhibitoire.

La deuxième méthode est la méthode de “Boltzmann sur réseau” plus communément appelée “Lattice Boltzmann” [71] [72]. Cette méthode contourne la résolution des équations différentielles en simulant des populations de particules s’entrechoquant. Elle diminue ainsi considérablement le temps de calcul. C’est pour ces raisons que le choix de cette méthode a été fait. De plus Aaltosalmi, dans sa thèse soutenue en 2005 [73], montre que cette méthode permet de prédire la perméabilité du papier à partir d’une structure obtenue par microtomographie aux rayons X.

Il est important de ne pas perdre de vue que le développement de ces simulations est réalisé dans un but industriel, l’utilisation de la méthode de “Lattice Boltzmann” permettra de voir si les structures simulées sont représentatives de structures réelles pour la grandeur de perméabilité. Mais le temps de calcul relativement important (quelques heures) nécessaire à cette méthode limite les applications industrielles. Ce chapitre présentera donc les bases de la théorie de Lattice Boltzmann et l’introduction de la méthode dans des algorithmes de calcul. A la suite, les résultats de la simulation sur plusieurs structures seront analysés. Une comparaison entre les prédictions de la simulation et les mesures expérimentales sera faite. Finalement des conclusions et des perspectives seront tirées, dans le but d’une prédiction de la perméabilité pour une application industrielle.

Plusieurs documents présentent déjà la méthode de “Lattice Boltzmann” [71] [74] [72] [73]. Par souci de clarté, ce document suit les présentations de Dupuis [74] et Succi [71].

Une simulation d’écoulement de fluide nécessite de prendre compte de plusieurs phénomènes, comme les phénomènes hydrodynamiques dans le fluide simulé, les interactions entre le fluide et la matière (condition aux limites), et la mise mouvement du fluide ou l’établissement de l’écoulement. Les paragraphes suivant présentent la manière dont tout ces phénomènes sont introduits dans la simulation d’écoulement grâce à la méthode de “Lattice Boltzman”.

Pour permettre une compréhension plus aisée de la théorie des écoulements de Boltzmann son ancêtre, la méthode des gaz sur réseau “Lattice gas automata” (LGA), va être présentée.

4.4.1 Méthode des gaz sur réseau

En 1986, Frisch, Hasslacher et Pomeau [75] publient une simulation reproduisant la complexité de l’écoulement d’un fluide réel en respectant les lois de conservation. Ce modèle est connu sous le nom de “FHP”. Cette simulation reproduit le déplacement de particules dans un réseau, avec pour chaque pas temps, une action de propagation des particules et une action de collision comme le présente la figure 4.2. La première étape de la simulation donne aux particules de gaz simulées une position et une direction de déplacement. La deuxième étape, dite de propagation, déplace les particules dans le réseau. La troisième étape gère les collisions entre particules, en fonction des critères introduits dans la simulation. Elles sont généralement définies pour respecter la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Ces lois de conservation sont imposées pour reproduire le comportement hydrodynamique du fluide.

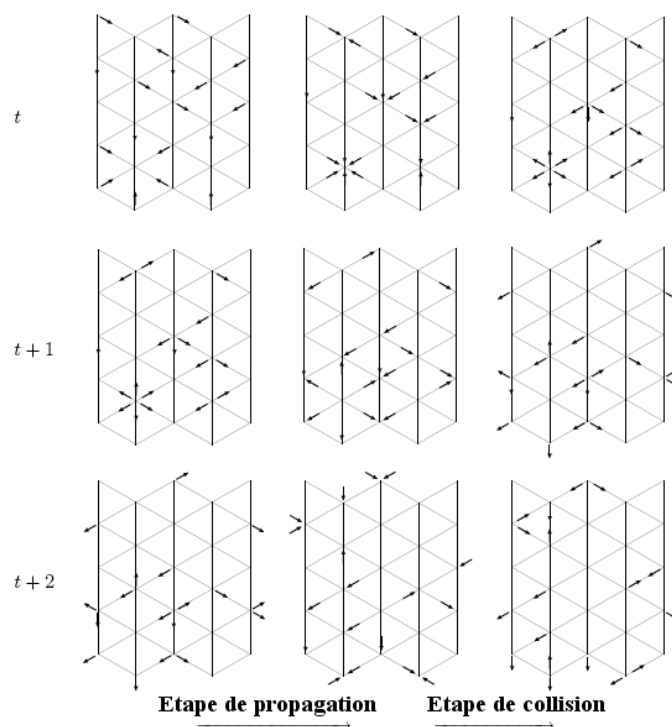


FIG. 4.2 – Itérations typiques d’un modèle D2Q7. L’étape de collision respecte les règles de conservation de masse et de quantité de mouvement [74].

Dans le cas du modèle LGA, un réseau est un espace régulièrement discrétisé. Il est constitué d’un ensemble de sites reliés par des liens dont la longueur est égale à Δr pour

les liens réguliers et $\sqrt{2\Delta r}$ pour les diagonales. Le réseau est peuplé de particules, les désignations $N_i^{in}(r, t)$ et $N_i^{out}(r, t)$ définissent respectivement si la particule présente dans le site r , au temps t entre “in” ou sort “out”. Habituellement i varie entre 0 et z , où z est le nombre de liens autour d’un site. La topologie des réseaux est indiquée par convention par $DdQ(z+1)$ où d est le nombre de dimensions généralement égal 2 ou 3, par exemple D2Q7 pour un réseau à 2 dimension avec 6 nœuds voisins. La figure 4.3 présente les réseaux les plus couramment employés.

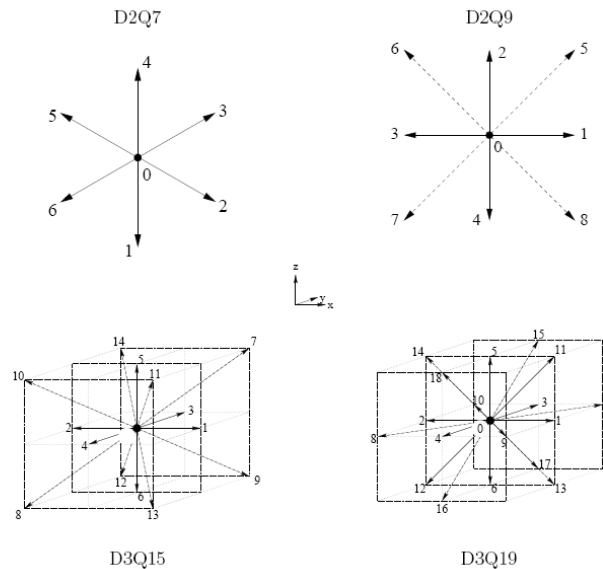


FIG. 4.3 – Topologie des réseaux les plus courants

Une boucle d’un modèle LGA consiste en une étape de propagation et une étape de collision. Elle peut être définie comme suit :

$$N_i^{out}(r, t) = N_i^{in}(r, t) + \Omega_i(N_0^{in}, \dots, N_z^{in}) \quad (4.5)$$

où Ω est l’opérateur de collision. Les lois de conservation sont généralement appliquées à cette étape. L’étape de propagation consiste à déplacer les particules d’un site à l’autre, elle peut être définie par :

$$N_i^{in}(r + \Delta t v_i, t + \Delta t) = N_i^{out}(r, t) \quad (4.6)$$

où Δt est l’étape de temps de la simulation. On peut donc écrire l’évolution d’un modèle LGA par :

$$N_i^{in}(r + \Delta t v_i, t + \Delta t) = N_i^{in}(r, t) + \Omega_i(N_0^{in}, \dots, N_z^{in}) \quad (4.7)$$

Les premiers modèles LGA étaient définis par des réseaux $D2Q4$ ou $D2Q5$ [28] [29]. Mais assez vite les réseaux passèrent à des discrétisations plus importantes $D2Q6$ et $D2Q7$ avec les modèles FHP [30] [31]. Il a été montré que le modèle FHP dans un cadre approprié reproduit le comportement hydrodynamique d’un fluide [9] [32] [12].

Des exemples de l'opérateur de collision du modèle FHP sont présentés dans la figure 4.2 L'opérateur de collision $\Omega_i(N_0^{in}, \dots, N_z^{in})$ peut être décrit comme une longue expression booléenne. Pour chaque nouveau pas de temps et pour tous les sites du réseau, cette équation est appliquée. Le grand nombre de possibilités de collisions entraîne généralement et pour plus d'efficacité, l'utilisation d'une table. Dans cette table, toutes les configurations de collisions possibles sont répertoriées avec, bien entendu, le résultat de chaque cas.

Pour obtenir des données macroscopiques comme la vitesse dans un modèle LGA, la valeur moyenne de déplacement est mesurée pour chaque pas de temps. Le nombre de sites du réseau définit en partie la viscosité du fluide qui est souvent très importante. L'augmentation du nombre de Reynolds nécessite l'augmentation du nombre de sites du réseau ce qui s'avère être très coûteux en temps de calcul. Cet inconvénient montre les limites du modèle LGA. Son amélioration réside dans l'idée de prendre en compte pour chaque site du réseau toute une population de particules plutôt qu'une seule.

4.4.2 Modèle de "Lattice Boltzmann" LBE

Le premier modèle LBE fut proposé par McNamara and Zanetti en 1988 [19]. L'idée de base était juste de remplacer l'occupation booléenne N_i par une probabilité de population f_i . L'équation 4.7 du modèle LGA peut donc être définie par :

$$f_i^{in}(r + \Delta t v_i, t + \Delta t) = f_i^{in}(r, t) + \Omega_i(f_0^{in}, \dots, f_z^{in}) \quad (4.8)$$

La quantité f_i est généralement utilisée pour définir la masse volumique de la matière. La méthode de résolution du terme de collision, utilisée dans le modèle LGA, faisant appel à une table, n'est plus possible dans le cas d'une population de particules. Pour résoudre ce terme, l'hypothèse du chaos de Boltzmann est utilisée ainsi que le modèle cinétique de Bhatnager, Gross et Krook [36]. La fonction du modèle de "Lattice Boltzmann" peut finalement s'exprimer comme suit :

$$f_i^{in}(r + \Delta t v_i, t + \Delta t) = f_i^{in}(r, t) + \frac{1}{\tau}(f_i^{eq}(r, t) - f_i^{in}(r, t)) \quad (4.9)$$

où τ est le temps de relaxation et f_i^{eq} la fonction d'équilibre local de la masse volumique. La masse volumique et la vitesse du fluide peuvent être définies comme suit :

$$\rho(r, t) = \sum_{i=0}^z m_i f_i^{in, out}(r, t) \quad (4.10)$$

$$\rho(r, t) u(r, y) = \sum_{i=0}^z m_i f_i^{in, out}(r, t) v_i \quad (4.11)$$

où m_i est le poids associé à la direction du réseau, ρ la masse volumique, u la vitesse locale.

L'utilisation du développement de Chapman-Enskog permet de montrer que l'équation LBGK 4.9 gouverne le comportement d'un fluide si Δr et Δt sont suffisamment petits et si la fonction locale d'équilibre est bien choisie.

Un bon choix de la fonction d'équilibre local est [76] [77] :

$$f_i^{eq} = \rho \left[\frac{1}{C_2} \frac{c_s^2}{v_l^2} + \frac{1}{C_2} \frac{v_{i\alpha} u_\alpha}{v_l^2} + \frac{1}{2C_4 v_l^4} \sum_{\alpha\beta} \left(v_{i\alpha} - v_l^2 \frac{C_4}{C_2} \delta_{\alpha\beta} \right) u_\alpha u_\beta \right] \quad (4.12)$$

$$f_0^{eq} = \rho \left[1 - \frac{C_0}{C_2} \frac{c_s^2}{v_l^2} + \left(\frac{C_0}{2C_2} - \frac{C_2}{2C_4} \right) \frac{u^2}{v_l^2} \right] \quad (4.13)$$

où α et β sont les directions dans l'espace, c_s est la vitesse du son, C_0, C_2, C_4 et v_l sont des constantes dépendantes du réseau. Le tableau 4.1 donne la valeur de ces constantes pour les réseaux les plus communs.

	Vitesses lentes			Vitesses rapides			C_0	C_2	C_4	c_s^2	t_0
	$ \mathbf{v}_i $	m_i	t_i	$ \mathbf{v}_i $	m_i	t_i					
D2Q7	v_l	1	1/12				6	3	3/4	1/4	1/2
D2Q9	v_l	4	1/9	$\sqrt{2}v_l$	1	1/36	20	12	4	1/3	4/9
D3Q15	v_l	1	1/9	$\sqrt{3}v_l$	1/8	1/72	7	3	1	1/3	2/9
D3Q19	v_l	2	1/18	$\sqrt{2}v_l$	1	1/36	24	12	4	1/3	1/3

TAB. 4.1 – Valeurs de constantes liées aux réseaux

Pour une simulation d'écoulement, on choisit généralement la vitesse du son au carré c_s^2 comme suit $c_s^2 = v_l^2 C_4 / C_2$ avec $v_l = \Delta r / \Delta t = 1$. D'autres applications telles que la propagation d'ondes radios [78] font un autre choix. Cette valeur spécifique de la vitesse du son permet de simplifier les équations 4.12 et 4.13 :

$$f_i^{eq} = \rho \frac{C_4}{C_2^2} \left[1 + \frac{v_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} \right)^2 - \frac{u^2}{2c_s^2} \right] \quad (4.14)$$

$$f_0^{eq} = \rho \left(1 - \frac{C_0 C_4}{C_2^2} \right) \left(1 - \frac{u^2}{2c_s^2} \right) \quad (4.15)$$

On peut montrer [71] que la pression est directement reliée à la masse volumique :

$$p(r, t) = c_s^2 \rho(r, t) \quad (4.16)$$

et que la viscosité cinématique peut s'exprimer par :

$$\nu = \frac{\Delta r^2}{\Delta t} \frac{C_4}{C_2} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (4.17)$$

L'équation 4.17 montre que le temps de relaxation τ doit être supérieur à 0.5 car la viscosité pourrait être négative.

Il est important de remarquer que la vitesse du son c_s n'est pas donnée dans les unités du système international mais dans des unités propres au modèle. Par ailleurs, toutes les grandeurs simulées sont directement proportionnelles aux grandeurs réelles en fonction de Δr et Δt .

4.4.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites peuvent être séparées en deux types. Les limites périodiques et les limites définies par l'interface fluide-solide.

Les limites périodiques ont pour but de gérer les particules entrant et sortant aux limites du système. Le schéma 4.4 présente comment les particules sortant à droite sont réintroduites à gauche et vice versa. Pour permettre cette circulation, des sites supplémentaires sont introduits à la périphérie du réseau (symbolisés par les ronds blancs sur le schéma). Les particules sortant à droite entrent à gauche et réciproquement.

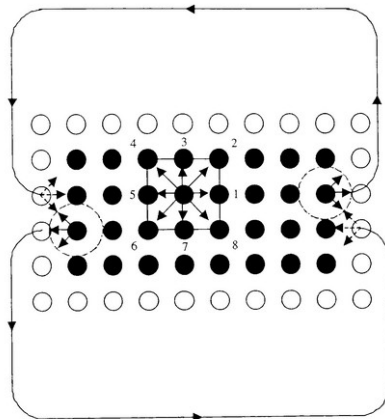


FIG. 4.4 – Limites périodiques, les particules sortant à droite entrent à gauche et réciproquement

Les limites définies par l'interface sont traitées différemment. La méthode la plus simple est de faire rebondir les particules sur les murs “Fullway bounce-back”. Il s'agit simplement de renverser la direction de la vitesse des particules venant heurter le solide :

$$f_{\bar{k}}^{out} = f_k^{in} \quad (4.18)$$

où f^{in} est la population de particules entrant dans l'interface et f^{out} est la population sortant de l'interface, k et \bar{k} représentent des directions opposées l'une à l'autre. On peut facilement observer la conservation de la masse et de la quantité de mouvement durant le procédé de collision avec l'interface.

4.4.4 Etablissement de l'écoulement

Les conditions aux limites et la caractérisation de l'écoulement du fluide à l'échelle microscopique étant définies, pour créer un écoulement, il reste à définir le mode d'établissement de l'écoulement, en d'autres termes comment le fluide est mis en mouvement. Pour cela plusieurs possibilités existent, entre autres l'application d'une accélération comme par exemple la gravité, l'application d'un gradient de pression ou d'un profil de vitesse locale. En s'inspirant du travail de Koponen [79] qui a simulé au travers d'une structure fibreuse

un écoulement avec la méthode de “Lattice Boltzmann”, le choix d’appliquer une accélération a été fait. La méthode est relativement simple. Si G est l’accélération, l’équation 4.9 peut être réécrite comme suit :

$$f_i^{in}(r + \Delta t v_i, t + \Delta t) = f_i^{in}(r, t) + \frac{1}{\tau} [f_i^{eq}(r, t) - f_i^{in}(r, t)] + g_i \quad (4.19)$$

où le terme d’accélération g_i est défini par :

$$g_i = \frac{m_i \Delta t}{C_2 v_i^2} v_{\alpha i} G_{\alpha}^* \quad (4.20)$$

et le terme G^* est défini par :

$$G^* = \frac{G}{\rho_{reel}} \quad (4.21)$$

4.5 Validation de la simulation

Après avoir présenté succinctement la méthode numérique de “Lattice Boltzman” (LBE), une étape de validation de la simulation doit être exposée. Bien qu’un grand nombre d’articles montrent la validité et la pertinence de la méthode théorique, il n’existe aucun logiciel dans le commerce proposant la méthode “LBE”. L’écriture d’algorithmes mettant en œuvre cette méthode est nécessaire. De ce fait, la validation de ces algorithmes est obligatoire.

La vitesse d’écoulement au travers du papier lors de la mesure de perméabilité (Norme ISO 5636) est relativement faible. On peut donc considérer que l’écoulement est en régime Poiseuille avec un nombre de Reynolds de pore inférieur 1. Cette analyse est à l’origine du choix de l’expression de la viscosité du modèle théorique (équation 4.17). Dans le cas de cette étude la validation de la simulation se focalisera donc sur des écoulements de type Poiseuille avec des nombres Reynolds de pores ou d’objets inférieurs à 10.

Les validations présentées dans les paragraphes suivants sont les validations les plus couramment utilisées dans le cas de simulation d’écoulement et plus particulièrement pour la méthode de “Lattice Boltzmann”. La première étape de la validation est de tester le comportement hydrodynamique du fluide simulé en le comparant aux profils de vitesse (équation 4.22) de l’équation de Stokes, dans le cas d’un écoulement en régime de Poiseuille entre deux plaques infinies :

$$v_y = U_0(1 - \eta^2), \quad U_0 = \frac{G^* H^2}{8\nu} \quad (4.22)$$

$$\eta = \frac{2y}{H}, \quad -\frac{H}{2} < y < \frac{H}{2} \quad (4.23)$$

U_0 est la vitesse sur l’axe et H est la distance entre les plaques.

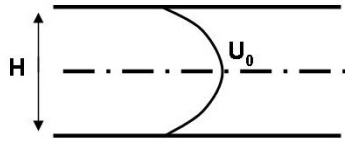


FIG. 4.5 – Schéma de l'écoulement d'un fluide entre deux plaques.

La figure 4.6 présente le profil prédit par l'équation de Stokes et les profils de vitesse simulés en 2 dimensions avec une discrétisation transversale du réseau plus ou moins importante. La valeur de la vitesse en chaque point est rapportée par rapport à la vitesse théorique au centre (U_0). Ainsi l'étude du graphique permet de voir que pour des discrétisations importantes du réseau 100×40 et 100×20 , le rapport au centre de l'écoulement entre la vitesse simulée et la vitesse théorique prédite par l'équation de Stokes sont respectivement de 0.963 et 0.953. Par contre si pour la discrétisation du réseau 100×10 les prédictions restent acceptables, pour la discrétisation 100×5 l'erreur devient trop importante pour pouvoir accepter les prédictions de la simulation. Cette analyse permet de mettre en évidence l'importance de la taille du réseau et la nécessité du choix d'une dimension pertinente. Elle permet aussi la validation du comportement hydrodynamique du fluide et de la perte de charge engendrée pour un écoulement de Poiseuille entre deux plaques, dans le cas où la discrétisation du réseau est suffisamment grande.

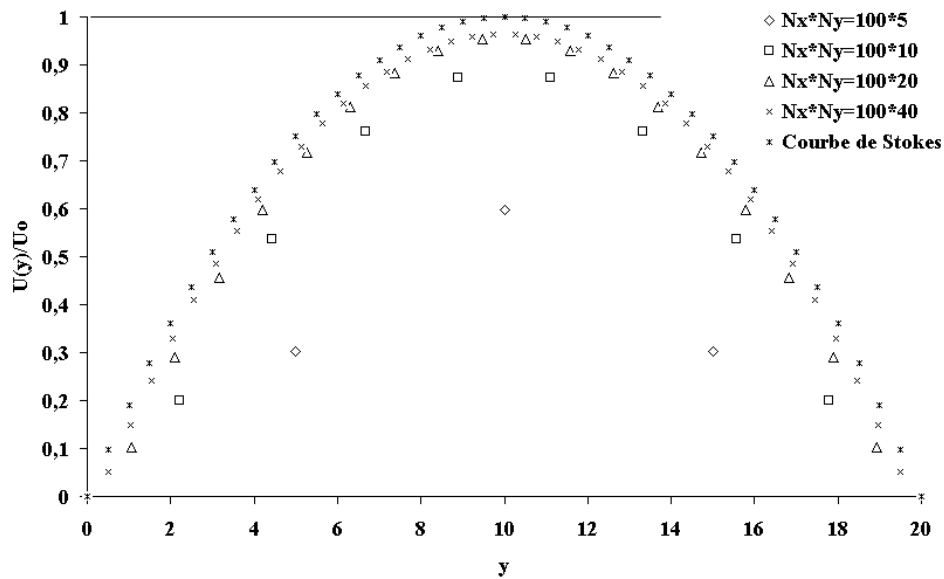


FIG. 4.6 – Profils de vitesses simulés et solution de l'équation de Stokes pour un écoulement entre deux plaques en régime de Poiseuille.

La simulation de l'écoulement au travers d'un milieu poreux nécessite une validation de l'écoulement dans le cas de la présence d'un obstacle. L'idée de la validation est de voir si la simulation prédit bien le comportement hydrodynamique du fluide dans le cas précis de la présence d'un fil au milieu de l'écoulement. Grâce aux observations expérimentales il est possible de faire des comparaisons et ainsi valider la simulation. Il est admis que

l'écoulement autour d'un fil isolé, est directement lié au nombre de Reynolds de fil défini comme suit :

$$Re_{fil} = \frac{u d_{fil}}{\nu} \quad (4.24)$$

où u est la vitesse de l'écoulement en amont du fil, d_{fil} est le diamètre du fil et ν la viscosité cinématique.

Comolet [80], en 1976, synthétise des observations expérimentales et montre les différents comportements d'un écoulement en fonction du nombre de Reynolds de fils (figure 4.7).

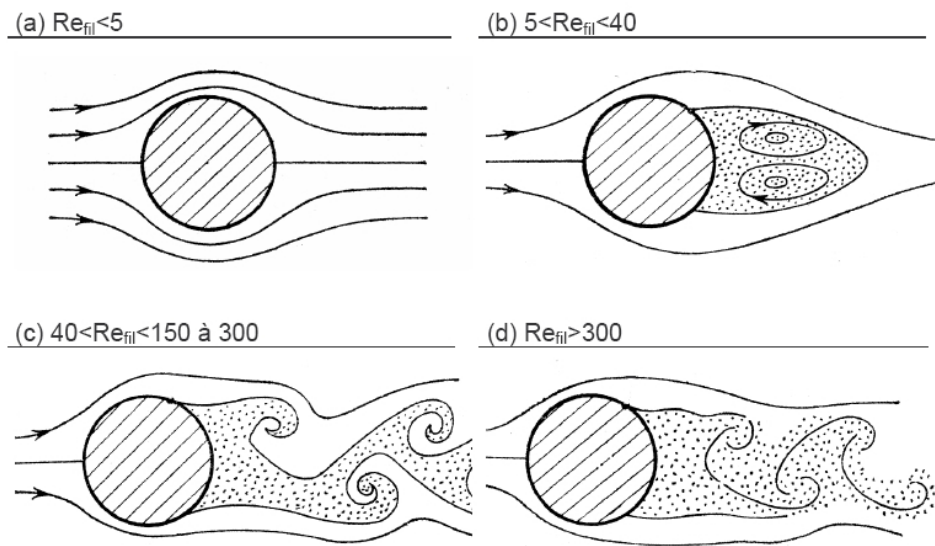


FIG. 4.7 – Description de la structure de l'écoulement autour d'un barreau cylindrique circulaire de longueur infinie en fonction du nombre de Reynolds de fil.

En reprenant les descriptions répertoriées par Comolet (1976), quand Re_{fil} est très petit ($Re_{fil} < 5$), l'écoulement autour du fil est purement visqueux (Figure 4.7.a) et il n'y a pas de décollement. On distingue dans ce régime deux comportements. Dans le premier cas, pour $Re_{fil} \ll 1$, les lignes de courant présentent avec le cylindre un plan de symétrie longitudinal et un plan de symétrie diamétral perpendiculaire. Ce dernier plan de symétrie n'existe pas pour le champ de pression. Dans le deuxième cas, pour $1 < Re_{fil} < 5$, le plan de symétrie diamétral perpendiculaire disparaît et le sillage se développe sur une plus grande distance en aval du cylindre.

À partir de $Re_{fil} = 5$, il apparaît derrière le fil deux tourbillons contrarotatifs qui se forment à partir de deux génératrices de décollement. La taille de ces tourbillons augmente avec le nombre de Reynolds de fil ; ils finissent par occuper toute la face avale du fil (figure 4.7.b). Ils se mettent alors en mouvement créant ainsi des oscillations périodiques dans le sillage.

Pour une valeur de Re_{fil} de l'ordre de 40, les oscillations sont si importantes que l'un des deux vortex se détache du cylindre. Le second vortex est expulsé à son tour tandis que le premier se reforme à nouveau. Ces vortex apparaissent et sont expulsés alternativement à la même fréquence. On parle d'instabilité de Strouhal. Les tourbillons se détachent donc les uns après les autres, formant ce qu'on appelle une allée de tourbillons de Von Karman (Figure 4.7.c).

A mesure que Re_{fil} augmente, les tourbillons se détachent aussitôt formés, mais la régularité de l'allée tourbillonnaire s'estompe lentement à partir de $Re_{fil} = 125$ à 140. Cependant on peut identifier dans le sillage une fréquence tourbillonnaire d'amplitude maximale (Figure 4.7.d). Quand $Re_{fil} > 300$, l'allée de von Karman disparaît pour laisser place à un sillage purement turbulent.

Considérant le type d'écoulement nécessaire à cette étude, la validation de la simulation se focalise sur des nombres de Reynolds de fil inférieurs à 10. La figure 4.8 présente 3 simulations pour 3 différents nombres de Reynolds de fil.

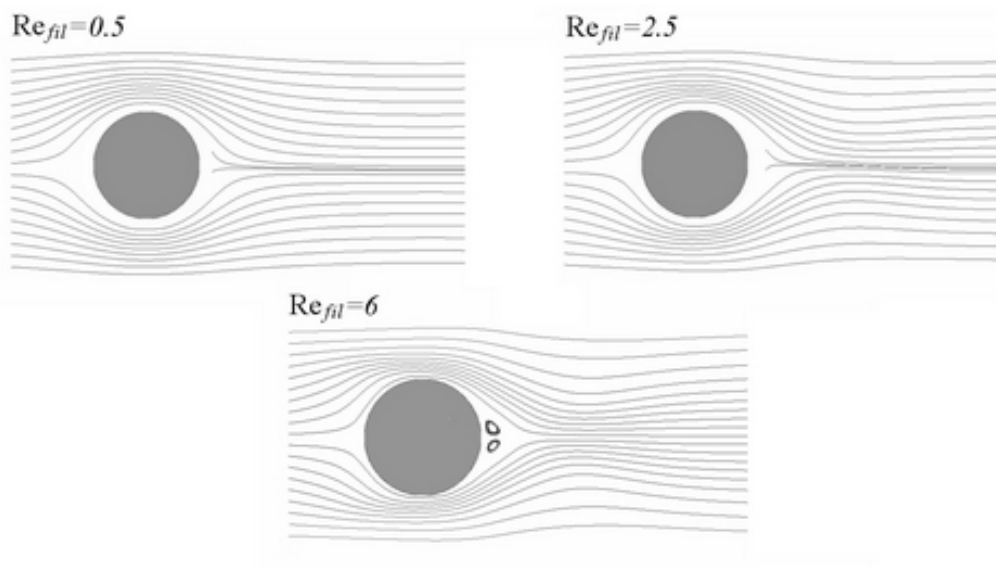


FIG. 4.8 – Description des structures d'écoulements simulés pour des nombres de Reynolds de fil de 0.5, 2.5 et 6.

La première figure présente un écoulement pour un nombre de Reynolds de fil de 0.5. On peut remarquer la présence des 2 symétries longitudinale et diamétrale annoncées par Comolet. Pour un nombre de Reynolds de fil de 2.5 les lignes de courants montrent bien l'apparition d'une dissymétrie du côté diamétral. La présence des 2 lignes de courants débutant en aval du fil, témoigne de l'absence de tourbillons à ce régime. Finalement la simulation pour un nombre de Reynolds de fils de 6, montre l'apparition des deux tourbillons en aval du fil.

On peut donc conclure, dans le cas du nombre de Reynolds de fil inférieur à 10, que la simulation développée prédit très bien le comportement hydrodynamique du fluide. L'introduction de la structure virtuelle en 3D dans la simulation d'écoulement pour prédire sa perméabilité est donc possible, mais au préalable le mode d'introduction et la taille de la structure doivent être définis.

4.5.1 Introduction de la structure dans la simulation

La simulation de la structure du papier permet de simuler des structures relativement grandes (plusieurs millimètres carrés) dans des temps relativement courts (quelques minutes). Malheureusement la simulation de l'écoulement nécessite beaucoup plus de temps, plusieurs heures, voire plusieurs jours, pour simuler un écoulement. Bien entendu, le temps de calcul est largement influencé par le volume de structure traité. De plus, un volume minimum de structure doit être pris en compte pour que la simulation de l'écoulement soit représentative de l'écoulement réel. Entre autres, l'échantillon prélevé dans la structure simulée doit être suffisamment grand pour tenir compte de l'hétérogénéité du papier.

L'introduction de la structure dans la simulation est relativement simple. Elle consiste juste à transformer la structure virtuelle en une matrice 3D indiquant à chaque coordonnée x , y et z s'il y a de la matière ou non, l'écoulement s'effectuant bien entendu dans les zones où il n'y a pas de matière.

Pour simuler l'écoulement au travers d'un média, il existe plusieurs méthodes. La première est d'introduire le média dans une canalisation circulaire ou rectangulaire, faire entrer le fluide d'un côté de la canalisation et le faire sortir de l'autre. La deuxième généralement utilisée dans le cas où le média possède des axes de symétrie est de ne pas réaliser de canalisation. Par exemple si on réalise un écoulement de gauche à droite avec le média au milieu, le fluide sortant du réseau en haut est directement réintroduit en bas et réciproquement, cela en suivant les règles des conditions aux limites périodiques (présentées précédemment). Bien que les structures simulées ne possèdent pas d'axes de symétrie, la deuxième solution fut choisie pour des raisons de temps de convergence de l'algorithme plus court et d'effets de bords moins importants. Car même si aux frontières du réseau de nouveaux pores sont créés leur taille est identique à celle des pores réels de la structure.

Lors de la simulation de l'écoulement, une accélération est appliquée au fluide pour le mettre en mouvement. Grâce à l'équation de Darcy dans le cas d'un écoulement rampant au travers d'un milieu poreux, il est possible de lier le débit de l'écoulement et l'accélération imposée au fluide par la relation :

$$v = \frac{k}{\nu} \cdot g \quad (4.25)$$

où v est la vitesse, ν est la viscosité cinématique, k la perméabilité et g l'accélération.

Ainsi une mesure du débit de fluide s'écoulant au travers d'une des structures simulées permet de déterminer sa perméabilité.

La détermination de la taille de la structure à introduire dans la simulation s'est faite par une série de simulation d'écoulement au travers d'échantillons d'une structure de résineux. La série de simulations fut réalisée sur 10 échantillons de dimensions $60 \times 60 \times 120 \mu m^3$, 5 échantillons de $120 \times 120 \times 120 \mu m^3$ et 2 échantillons de $240 \times 240 \times 120 \mu m^3$. La dimension z des échantillons égale à $120 \mu m$ dans les trois cas représente l'épaisseur moyenne de la structure. Les temps de calcul nécessaires à la stabilisation de l'algorithme furent respectivement pour les trois dimensions d'échantillons de 5, 12 et 48 heures. Il est aussi important de remarquer que la dimension $240 \times 240 \times 120 \mu m^3$ est la plus grande envisageable aux vues des capacités informatiques à disposition.

Il ressort des 10 simulations réalisées sur les échantillons de $60 \times 60 \times 120 \mu m^3$, que la dispersion des prédictions de la perméabilité est relativement grande environ 30%, alors que la dispersion des prédictions des structures plus grandes $120 \times 120 \times 120 \mu m^3$ et $240 \times 240 \times 120 \mu m^3$ tombe à 5%. De plus, les prédictions des échantillons les plus petits minimisent en moyenne la perméabilité, ceci sans doute à cause des effets de bords.

Pour ces raisons, la taille des structures introduites dans la simulation sera de $120 \times 120 \times 120 \mu m^3$. Il faut remarquer que le temps de stabilisation de l'algorithme de 12 heures est un handicap pour une application industrielle, mais une dimension inférieure entraîne des erreurs trop importantes sur la prédiction.

4.6 Résultats de la simulation par la méthode de "Lattice Boltzmann"

4.6.1 Simulation de l'écoulement au travers de structures composées de pâtes brutes

Les neuf pâtes de morphologie très différentes utilisées pour tester le modèle Ingmanson sont réutilisées pour tester l'adéquation de la simulation. L'histogramme et le graphique (figures 4.9 et 4.10) présentent les prédictions de la simulation et les mesures expérimentales de la perméabilité pour ces neufs pâtes.

L'analyse de la figure 4.10 montre la bonne corrélation entre les prédictions de la simulation et les valeurs expérimentales. Avec une valeur de R^2 de 0.83, pratiquement 85% de l'évolution de la perméabilité est prédite par la simulation.

La simulation numérique a aussi pour avantage de permettre la visualisation de l'écoulement. Bien que qualitatives, ces informations ne sont pas dénuées d'intérêt. Plusieurs méthodes de visualisation existent, tracé des lignes de courant, coloration isométrique et vectorisation des champs de vitesses.

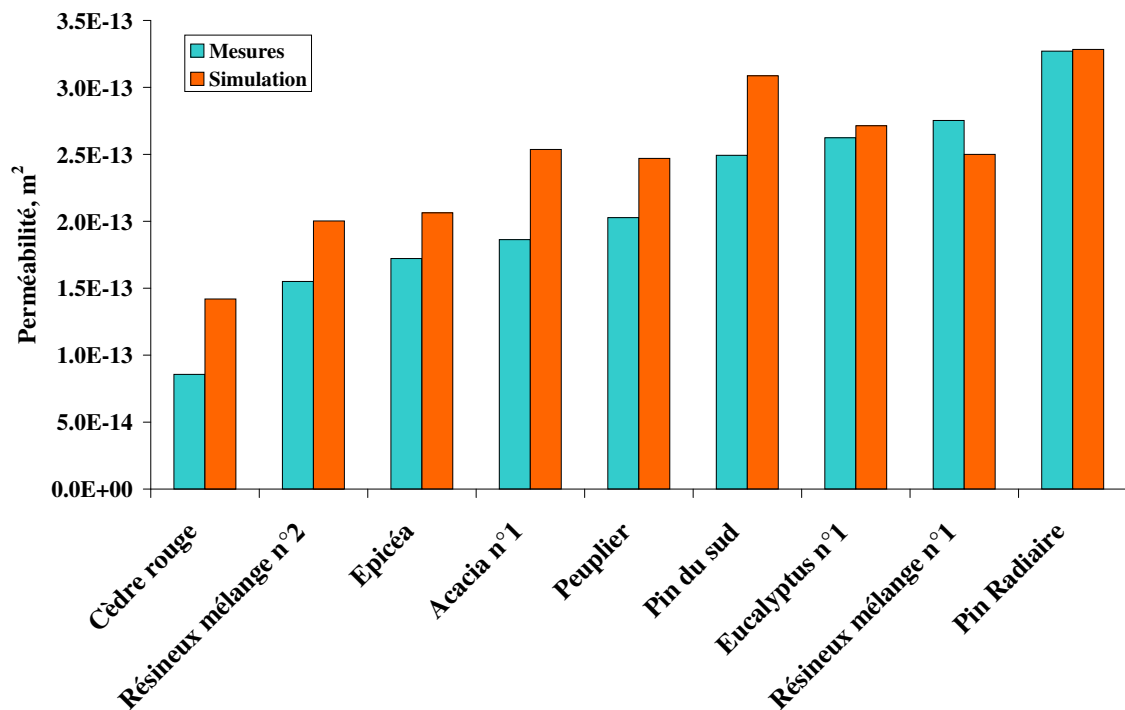


FIG. 4.9 – Valeurs mesurées et simulées de la perméabilité des formettes obtenues à partir de neuf pâtes différentes.

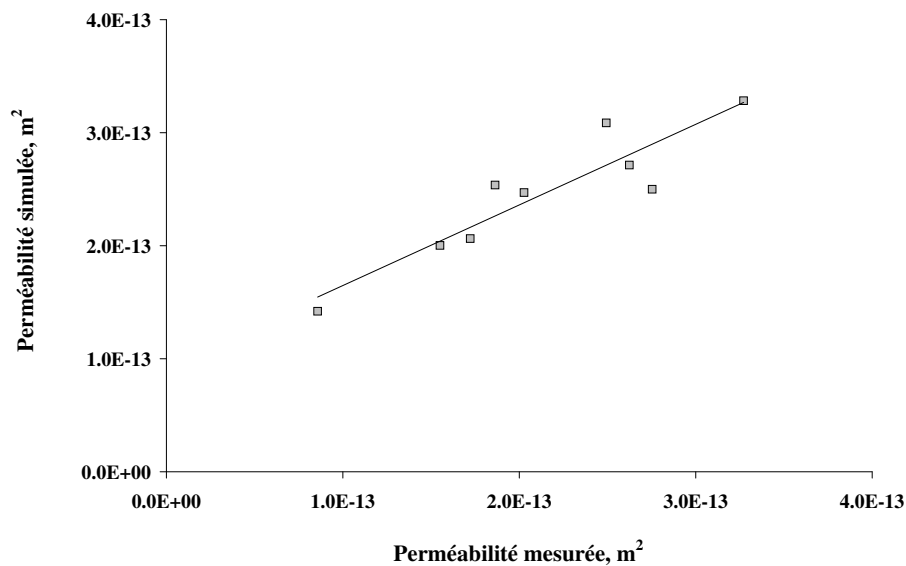


FIG. 4.10 – Corrélation entre la perméabilité mesurée et prédite.

Les figures 4.11 et 4.12 représentent l'écoulement au travers de deux structures, l'une composée de fibres de feuillu et l'autre de fibres de résineux. La méthode de visualisation utilisée est la vectorisation des champs de vitesse. Pour chaque point de la matrice 3D représentant les champs de vitesses, un cône est affiché, orienté dans le sens du vecteur vitesse et avec une taille proportionnelle à l'intensité de la vitesse en ce point.

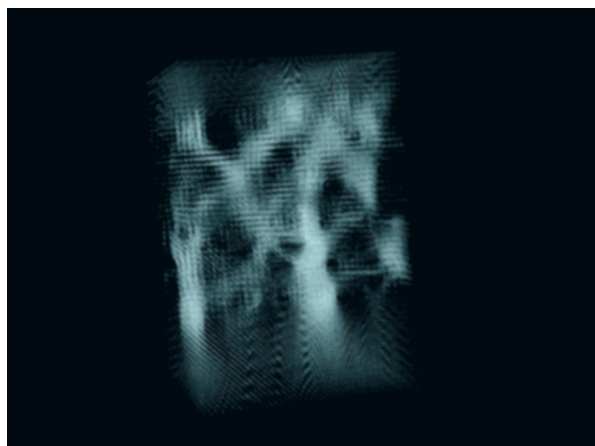


FIG. 4.11 – Visualisation de l'écoulement au travers d'une structure à base de fibres de feuillu ($120 \times 120 \times 180 \mu m^3$).

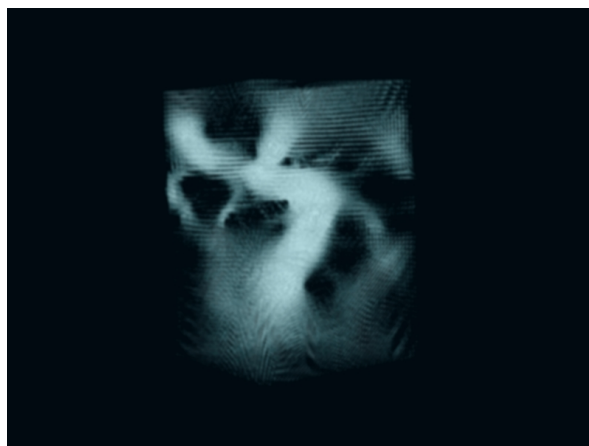


FIG. 4.12 – Visualisation de l'écoulement au travers d'une structure à base de fibres de résineux ($120 \times 120 \times 180 \mu m^3$).

L'analyse de ces images permet de mettre en évidence deux choses. La première est que l'écoulement au travers de ces structures prend généralement des passages préférentiels. En effet on distingue très bien sur ces images les zones plus blanches représentant ces passages. Dans un deuxième temps, on peut remarquer que pour la structure à base de fibres de feuillus la taille des passages préférentiels est plus faible, mais leur nombre est plus important que pour la structure à base de fibres de résineux. On peut essayer d'expliquer les valeurs de perméabilité pouvant être proches entre ces deux types de structure, par exemple dans le cas de l'eucalyptus n°1 et le mélange de résineux n°1, par une section de passages plus faible pour les feuillus mais une longueur de parcours (tortuosité) plus importante chez les résineux.

4.6.2 Remarque sur l'importance de la prise en compte des fines

Toutes les structures virtuelles réalisées pour la prédiction de la perméabilité (comme pour toutes les autres prédictions présentées dans ce document) contiennent des fines. Le taux de fines introduites lors de la simulation est obtenu grâce aux mesures de l'appareil Morfi, il est bien entendu différent pour chaque pâte. L'influence des fines n'est pas négligeable surtout pour les pâtes de feuillus qui généralement possèdent des taux relativement importants de fines. Le tableau 4.2 donne les valeurs du taux de fines en longueur pour les pâtes de feuillus testées.

	Taux de fines en longueur, %
Acacia n°1	9.86
Peuplier	13.36
Eucalyptus n°1	12.44

TAB. 4.2 – Taux de fines en longueur pour les trois pâtes de feuillus simulées

Le graphique 4.13 présente les prédictions de la simulation avec et sans introduction de fines. Il montre clairement la diminution de la perméabilité avec l'introduction de fines. Cette diminution de la perméabilité peut s'expliquer par le colmatage des pores de la structure, mais il est intéressant de remarquer que les fines n'ont pas exactement le même effet pour chaque pâte. Cela peut sans doute s'expliquer par la différence de taille des pores de chaque structure.

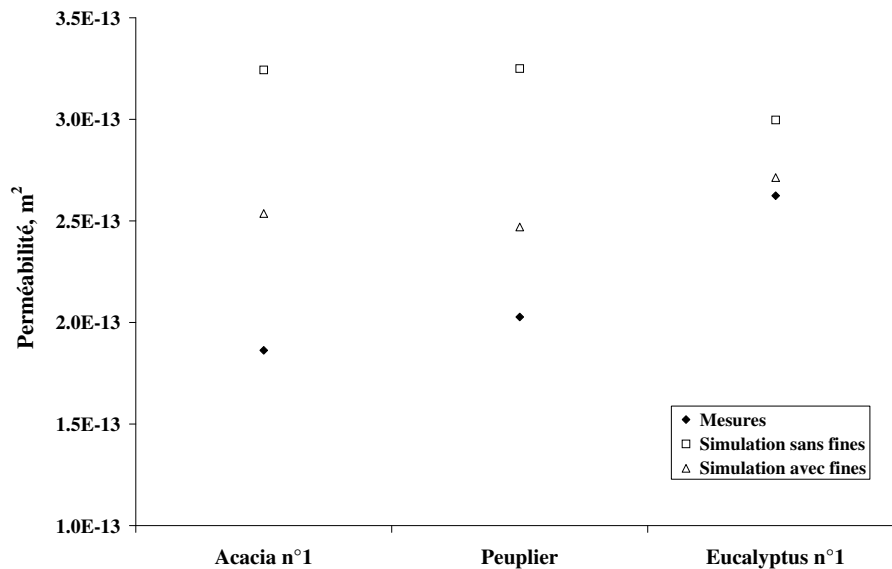


FIG. 4.13 – Simulation de la perméabilité pour des structures à base de fibres de feuillus avec ou sans fines.

4.6.3 Simulation de l'écoulement au travers de structures composées d'un mélange de fibres cellulosiques et de fibres de verre

On peut aussi appliquer la simulation à d'autres milieux que les papiers et notamment des composites de fibres de verre et de fibres cellulosiques (ces structures ont été présentées dans le chapitre 2).

L'influence importante du taux de fibres de verre sur la porosité des structures devrait entraîner des variations importantes de la perméabilité. Ainsi, une bonne prédiction de la perméabilité devrait permettre d'étendre le champ d'application de la simulation.

Le graphique (figure 4.14) présente les prédictions de la simulation et les mesures expérimentales réalisées pour des taux de fibres de verre allant de 0 à 50%. L'analyse de ce graphique montre la bonne corrélation entre la simulation et les mesures. Avec une valeur de R^2 de 0.98 on peut considérer que la simulation prédit très bien l'évolution de la perméabilité en fonction du taux de fibres de verre.

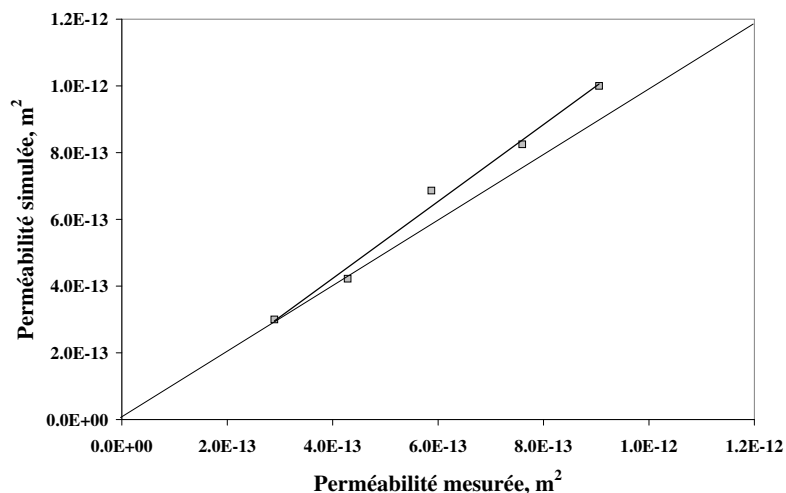


FIG. 4.14 – Corrélation entre les mesures et les prédictions de la perméabilité pour différents taux de fibres de verre (0 à 50%).

L'analyse de l'écoulement au travers de ces structures, montre que la section des passages préférentiels augmente avec le taux de fibres de verre (figures 4.15 , 4.16 et 4.17). Cette augmentation prend une proportion telle que pour des taux importants de fibres de verre (>40 %) il n'est plus possible de discerner les passages préférentiels, l'écoulement pouvant se résumer à un contournement d'obstacles.

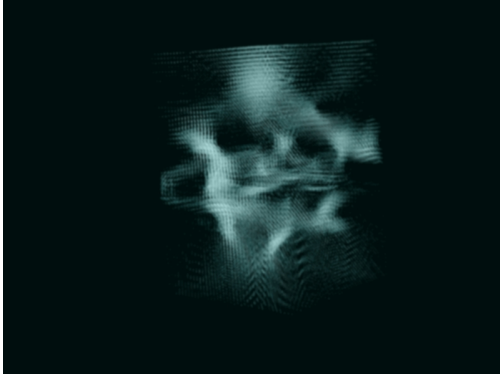


FIG. 4.15 – Visualisation de l’écoulement au travers d’une structure à base de 100% de fibres cellulosiques ($120 \times 120 \times 180 \mu m^3$).

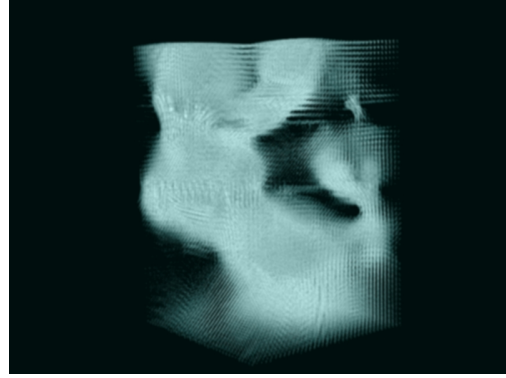


FIG. 4.16 – Visualisation de l’écoulement au travers d’une structure composite avec 75% de fibres cellulosiques et 25% de fibres de verre ($120 \times 120 \times 240 \mu m^3$).

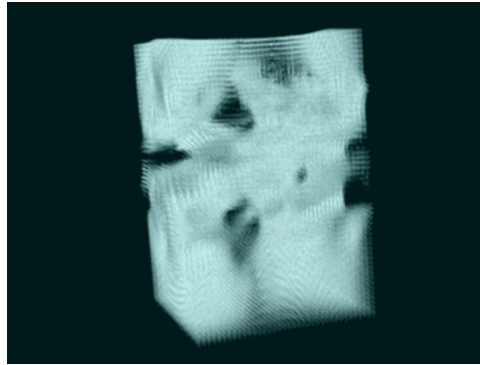


FIG. 4.17 – Visualisation de l’écoulement au travers d’une structure composite avec 50% de fibres cellulosiques et 50% de fibres de verre ($120 \times 120 \times 180 \mu m^3$).

4.7 Conclusion

La perméabilité du papier dépend de nombreux paramètres parmi lesquels la porosité et la surface spécifique du réseau. Cependant les modèles empiriques de la littérature ne sont pas satisfaisants pour prévoir l’influence de la surface spécifique à porosité constante. Ainsi une méthode numérique plus sophistiquée a été choisie.

Comme Aaltosalmi l’avait déjà montré, les résultats présentés dans ce chapitre confirment l’idée selon laquelle la méthode de “Lattice Boltzmann” permet de prédire relativement bien la perméabilité de réseaux fibreux. Cette bonne prédiction de la perméabilité, malgré la superposition des simulations (simulation de la structure et simulation de l’écoulement) conforte une fois de plus sur la grande similarité des structures virtuelles et des structures réelles. On peut donc conclure qu’à l’échelle de quelques micromètres les structures (virtuelles et réelles) sont pratiquement identiques. La superposition de ces deux simulations représente un outil puissant pour la recherche fondamentale est la compréhension de l’influence de la morphologie des fibres sur la perméabilité et l’écoulement de fluides au travers du papier. Bien entendu le couple de

simulation (structure et méthode de Lattice Boltzmann) peut être appliqué à d'autres domaines où l'on utilise des matériaux fibreux.

Le temps de calcul important de cette méthode "LBE" peut être un désavantage pour une application industrielle. Pour remédier à cela deux options peuvent être choisies. La première est l'amélioration du temps de calcul de la méthode, en utilisant une méthode de stabilisation de l'écoulement et un ordinateur plus puissant, le temps de calcul pourrait passer d'environ 12 heures à moins d'une heure. La deuxième option est le développement de nouveaux modèles analytiques, introduisant la taille des pores et la tortuosité. L'utilisation de la méthode "Lattice Boltzmann" a permis de valider les structures virtuelles, l'application de différents modèles analytiques ou numériques (plus rapides) peut donc être envisagée.

Conclusion générale

Ce travail fut réalisé dans le cadre d'une thèse CIFRE en collaboration avec l'entreprise TEMBEC, producteur de pâte à papier. L'objectif de ce travail était de simuler en 3D des structures fibreuses les plus proches possibles de structures réelles, avec comme volonté de prédire l'influence de la morphologie des fibres sur ces structures. Dans un deuxième temps, et après la validation des grandeurs de contexture, la prédiction de grandeurs physiques devait être envisagée. Bien entendu les contraintes liées à l'utilisation de la simulation en milieu industriel ont amené à faire des choix lors du développement des modèles et du mode de programmation.

La validation de grandeurs comme la masse volumique et la rugosité, ainsi que la validation de l'influence des fines et des fibres de verre, permet d'affirmer que les structures simulées sont très proches des structures réelles. De plus les prédictions des caractéristiques physiques, comme la longueur de rupture et la perméabilité, en plus de renforcer l'idée de similarité des structures donnent à la simulation de réelles possibilités applications.

On remarquera que la simulation présentée dans ce travail est la première simulation informatique de structure du papier qui peut être directement comparée de manière qualitative et quantitative à des structures réelles.

Sous sa forme actuelle cette simulation est un outil puissant qui permet une meilleure compréhension de l'influence de la morphologie des fibres sur la microstructure du réseau fibreux. Elle a, entre autres, permis de mieux comprendre l'influence de l'épaisseur et de la largeur des fibres sur la longueur de rupture de la structure et elle a mis en évidence l'influence de la longueur pondérée en longueur sur cette grandeur. Elle a aussi aidé à mieux comprendre et prendre en compte le phénomène d'auto-cicatrisation lors de la formation du papier.

Dans l'état actuel de son développement, elle peut permettre de prédire l'influence de mélanges de pâtes brute ou l'influence du classage d'une pâte (par exemple en longueur) et même la combinaison de ces deux actions. A court terme, l'utilisation de cette simulation pour optimiser la composition de papier peut être envisagée, avec la prise en compte de composants tels que des pâtes Kraft, classées puis mélangées, mais aussi des fines, des charges et des fibres de verre. Dans un deuxième temps le développement de la simulation pourrait être appliqué à l'analyse en ligne d'une production et son contrôle en vue d'atteindre les objectifs de qualité. Pour cela la prise en compte du raffinage semble être le prochain objectif à traiter.

Cet outil initialement développé pour l'industrie trouve aussi sa place comme outil de recherche fondamentale, son utilisation permettra sans doute le développement de modèles de la perméabilité soit analytiques, soit basés sur l'analyse stéréométrique d'images. Il permettra aussi l'introduction et la prise en compte des effets des charges et pigments sur la structure et les caractéristiques physiques du papier.

L'industrie papetière française avec un chiffre d'affaire annuel en 2005 de 6 milliards d'euros peut être comparée à l'industrie aéronautique et automobile. Industries qui ont très vite compris et intégré l'importance de la simulation numérique, avec l'utilisation lors de la conception de nouveaux véhicules, de test numérique de crash, d'essai aérodynamique, acoustique et même de compatibilité électromagnétique. De la même manière on peut penser que dans quelques années la production de papier sera directement contrôlée par des simulations de ce type, ayant une action directe sur la puissance de raffinage, la composition du papier (taux de fibres, de charge, etc.), concentration en caisse de tête, etc., ceci dans le but de produire un papier avec exactement les propriétés requises, une consommation d'énergie la plus faible possible et les matières premières les moins chères.

Bibliographie

- [1] Y. AITKEN, F. CADEL et C. VOILLOT : *Constituants fibreux des pâtes papiers et cartons, pratique de l'analyse*. CTP-EFPG, 1988.
- [2] A. TESSADRO : *Caractérisation morphologique des fibres par analyse d'images*. Thèse de doctorat, I.N.P.G, 1994.
- [3] K. NISKANEN : *Paper Physics*. Fapet Oy, 1998.
- [4] J.R. ISTAS et E.L. RAEKELBOOM : *Etude biométrique, chimique et papetière de quelques conifères exotiques*. Régisseur de la Donation Royale, à Bruxelles, 1967.
- [5] J.R. ISTAS et E.L. RAEKELBOOM : *Etude biométrique, chimique et papetière de quelques essences feuillues*. Régisseur de la Donation Royale, à Bruxelles, 1970.
- [6] R.P. KIBBLEWHITE : Fractures and dislocation in the walls of kraft and bisulphite pulp fibres. *Cellulose Chemistry and Technology*, 10(4):497–503, 1976.
- [7] A. COCHAUX : *Résistance au déchirement des pâtes et des papiers : caractérisation et possibilités d'amélioration*. Thèse de doctorat, I.N.P.G, 1994.
- [8] O.L. FORGACS : Structural weaknesses in softwood pulp tracheids. *Tappi Journal*, 44(2):112–119, 1961.
- [9] U.L. MOHLIN, J. DAHLBOM et J. HORNATOWSKA : Fibre deformation and sheet strength. *Tappi Journal*, 79(6):105–111, 1995.
- [10] D.H. PAGE, F. EL-HOSSEINY et K. WINKLER : Elastic modulus of single wood pulp fibers. *Tappi Journal*, 60(4):114–117, 1977.
- [11] T. KANG et H. PAULAPURO : Characterization of chemical pulp fines. *Tappi Journal*, 5(2):25–28, 2006.
- [12] H. WANG et S.M. SHALER : Computer-simulated three-dimensional microstructure of wood fibre composite materials. *Journal of Pulp and Paper Science*, 24(10):J314–J319, 1998.
- [13] C. BARRATTE : *Modélisation de l'influence d'une toile sur la formation et l'imprimabilité d'une feuille de papier*. Thèse de doctorat, I.N.P.G, 2001.
- [14] M. TURUNEM, C. LE NY, T. TIENVIERI et J. TIINIMÄKI : Comparison of fibre morphology analysers. *Appita Journal*, 58(1):28–32, 2005.
- [15] G. EYMIN PETOT TOURTOLLET, G. GILLET, P. LAFAVERGES, J. KERNEIS, J. SABATIER, D. MOINEAU, R. PASCAL, C. VOILLOT et R. PASSAS : Morfi : une avancée décisive dans l'analyse des pâtes. *Revue ATIP*, 54(3):106–114, 2000.
- [16] E.L. LEHMANN et J.P. ROMANO : *Testing statistical hypotheses*. Springer, 2005.

- [17] P. DAGNELIE : *Statistique théorique et appliquée. Interférence statistique à une et à deux dimensions*. De Boeck, 1998.
- [18] H. NANKO et J. WU : Mechanisms of paper shrinkage during drying. *In International Paper Physics Conference, CPPA, Montreal*, pages 103–113, 1995.
- [19] D.H. PAGE : A theory for the tensile strength of paper. *Tappi Journal*, 52(4):674–681, 1969.
- [20] P. SHALLHORN et A. KARNIS : Tear and tensile strength of mechanical pulps. *Pulp and Paper Magazine of Canada*, 80(12):TR92–TR99, 1979.
- [21] W.R. HASSELTON : Gas adsorption by wood, pulp, and paper. the low-temperature adsorption of nitrogen, butane, and carbon dioxide by sprucewood and its components. *Tappi Journal*, 37(9):404–412, 1954.
- [22] W.R. HASSELTON : Gas adsorption by wood, pulp, and paper. the application of gas adsorption techniques to the study of the area and structure of pulps and the unbonded and bonded area of paper. *Tappi Journal*, 38(12):716–723, 1955.
- [23] J.W. SWANSON et A.J. STEBER : Fiber surface area and bonded area. *Tappi Journal*, 42(12):986–994, 1959.
- [24] V.C. SETTERHOLM et W.A. CHILSON : Drying restraint, its effect on the tensile properties of 15 different pulps. *TAPPI Journal*, 48(11):634–640, 1965.
- [25] Pâtes – Préparation des feuilles de laboratoire pour essais physiques – Partie 2 : Méthode Rapid-Köthen, 2004. NF EN ISO 5269-2.
- [26] E.J. SAMUELSEN, P.J. HOUEN, O.W. GREGERSEN, T. HELLE et C. RAVEN : Three-dimensional imaging of paper by use of synchrotron X-ray microtomography. *Journal of Pulp and Paper Science*, 27(2):50–53, 2001.
- [27] C. ANTOINE, P. NYGARD, O.W. GREGERSEN, R. HOLMSTAD, T. WEITKAMP et C. RAU : 3D images of paper obtained by phase-contrast X-ray microtomography : image quality and binarisation. *Nuclear Instrument and Methods in Physics Research*, A490:392–402, 2002.
- [28] M. HASUIKE, T. KAWASAKI et K. MURAKAMI : Evaluation method of 3-D geometric structure of paper sheet. *Journal of Pulp and Paper Science*, 18(3):J114–120, 1992.
- [29] N. REVERDY-BRUAS, J.M. SERRA-TOSIO, J.F. BLOCH et E. BOLLER : Analyse tridimensionnelle du papier par microtomographie aux rayons X. *Revue ATIP*, 54(4):12–19, 2001.
- [30] O.J. KALLMES et H. CORTE : Statistical geometry of ideal two dimensional fiber networks. *Tappi Journal*, 43(9):737–752, 1960.
- [31] O.J. KALLMES et H. CORTE : The structure of paper II : the statistical geometry of a multiplanar fiber network. *Tappi Journal*, 44(7):519–528, 1961.
- [32] B. NORMAN et D. WAHREN : The measurement of mass distribution in paper sheets using a beta radiographic method. *Svensk Papperstidning*, 77(11):397–406, 1974.
- [33] J. GÖRRES, R. GRANT, T. CRESSON et P. LUNER : The effect of the drainage on randomly formed papers : a simulation study. *Tappi Journal*, 69(7):104–105, 1986.
- [34] R.J. KEREEKES et C.J. SCHELL : Characterization of fibre flocculation regimes by a crowding factor. *Journal of Pulp and Paper Science*, 18(1):J32–38, 1992.

- [35] K.J. NISKANEN et M.J. ALAVA : Planar random networks with flexible fibers. *Physical Review Letters*, 73(25):3475–3478, 1994.
- [36] N. NILSEN, M. ZABIHIAN et K.J. NISKANEN : KCL-PAKKA : a tool for simulating paper properties. *Tappi Journal*, 81(5):163–166, 1998.
- [37] C. BARRATTE, J.C. ROUX, C. VOILLOT, J.F. LE NEST, J.C. LONJON et P. MANGIN : Simulation of initial fibre retention by a forming fabric. *APPITA*, 54(4):364–368, 2001.
- [38] M. FAESSEL : *Modélisation 3D de réseaux fibreux : un outil pour l'étude des interactions microstructure-propriétés de panneaux de fibres*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2003.
- [39] S. HEYDEN et P. J. GUSTAFSSON : Simulation of fracture in a cellulose fibre network. *Journal of Pulp and Paper Science*, 24(5):J160–165, 1998.
- [40] *VTK User's Guide*. KitWare, Inc., 2003.
- [41] W. SCHROEDER, K. MARTIN et B. LORENSEN : *The Visualization Toolkit*. KitWare, Inc., 2002.
- [42] *Numerical recipes in C++ : the art of scientific computing*. Cambridge University Press, 2002.
- [43] J. SILVY : *Etude structurale de milieux fibreux : cas des fibres cellulosiques*. Thèse de doctorat, I.N.P.G, 1980.
- [44] J. SIRVIO et I. NURMINEN : A method for assessing the consolidating effect of fines on the structure of paper. In *TAPPI International Paper Physics Conference*, pages 187–192, 2003.
- [45] K.J. STOUT et L. BLUNT : *Three dimensional surface topography*. Penton press, 2000.
- [46] C.T.J. DODSON : On the distribution of pore heights in layered random fibre networks. Source internet (<http://www.maths.manchester.ac.uk/kd/PREPRINTS/poreht.pdf>), 2000.
- [47] W. LU et L.A. CARLSSON : Micro model of paper. Part 2. Statistical analysis of paper structure. *Tappi Journal*, 79(1):203–210, 1996.
- [48] Papier et carton - Détermination des propriétés de traction, d'effort à la rupture, d'absorption d'énergie à la traction et de rigidité à la traction - Partie 3 : Méthode à gradient d'allongement constant (100 mm/min), 2005. Norme NF ISO 1924-3.
- [49] M.W. KANE : The effect of beating on fibre length distribution. *Pulp and Paper Magazine of Canada*, 60(10):T308, 1959.
- [50] T. DIONISSIOS et U. TESTU : Structural disorder effects on the tensile strength distribution of heterogeneous brittle materials with emphasis on fiber networks. *Physical Review B*, 70, 2004.
- [51] H. ALKHASAWNEH et J.H. CAMERON : Effect of fiber fractionation on sheet properties and drying behavior. In *Pulping and Environmental Conference*, Tappi press, 2005.
- [52] C. GAILOLAS, A.P. COSTA, S.M. SANTOS et M.N. BELGACEM : Adsorption of cationic starch on typical furnishes used in the portuguese paper industry. *APPITA Journal*, 57(2):112–115, 2004.

- [53] J. SILVY, D. COUTY et E. ARCONDARA : La microstructure du papier : Caractérisation, influence sur les propriétés physiques, relation entre l'orientation des fibres et la masse au m². *Revue ATIP*, 45(3):115–124, 1991.
- [54] M. KORTEOJA, L.I. SALMINEN, K.J NISKANEN et M.J. ALAVA : Strength distribution in paper. *Material Science and Engineering*, A240:173–180, 1998.
- [55] H. ALKHASAWNEH et J.H. CAMERON : Tensile strength of paper revisited. *In Advances in Paper Science and Technology - Transactions of the 13th Fundamental Research Symposium (Cambridge)*, pages 563–589, 2005.
- [56] H.L COX : The elasticity and strength of paper and other fibrous materials. *British Journal of Applied Physics*, 3(3):72, 1952.
- [57] M.W. KANE : Beating fibre length distribution and tensile strength. *Pulp and Paper Magazine of Canada*, 60(12):T359, 1959.
- [58] O.J. KALLMESS et M. PEREZ : A new theory for the load/elongation properties of paper. *In Consolidation of paper web - Transactions of the 3rd Fundamental Research Symposium (Cambridge)*, page 779, 1966.
- [59] K. JAYARAMAN et M.T. KORTSCHOT : Closed-form network models for the tensile strength of paper - a critical discussion. *Nordic Pulp and Paper Research Journal*, 13(3):233–242, 1998.
- [60] J.A. Van den AKKER, A.L. LATHROP, M.H. VOELKER et L.R. DEARTH : Importance of fiber strength to sheet strength. *Tappi Journal*, 41(8):416–425, 1958.
- [61] A.J. WATSON et H.E. DADSWELL : Influence on fibre morphology of paper properties - Part 1. Fibre length. *APPITA Journal*, 14(5):168–178, 1961.
- [62] R.W. DAVISON : The weak link in paper dry strength. *Tappi Journal*, 55(4):567–573, 1972.
- [63] J. HE, W.J. BATCHELOR et R.E. JOHNSTON : An analytical model for number of fibre-fibre contacts in paper and expressions for relative bonded area (RBA). *In 2003 International Paper Physics Conference*, pages 77–83, 2003.
- [64] P.C. CARMAN : *L'écoulement des gaz à travers les milieux poreux*. Saclay : Institut national des sciences et techniques nucléaires ; Paris P.U.F, 1961.
- [65] W.L. INGMANSON, B.D. ANDREWS et R.C. JOHNSON : The effect of beating on filtration resistance and its components of specific surface and specific volume. *Tappi Journal*, 42(1):29–35, 1959.
- [66] P. PETTERSON, T.S. LUNDSTROM et T. WIKSTROM : A method to measure the permeability of dry fiber mats. *Wood and Fiber Science*, 38(3):417–426, 2006.
- [67] H. DARCY : *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Dalmont, 1856.
- [68] Papier et carton - Détermination de la perméabilité à l'air (méthode Bendtsen), 1992. Norme NF EN ISO 5636-1.
- [69] A. ERN et J.L. GUERMOND : *Elements finis*. Springer, 2002.
- [70] C. SCHWAB : *P- and HP- finite element methods*. Oxford University Press, 1999.
- [71] S. SUCCI : *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford University Press, 2001.

- [72] D.A WOLF-GLADROW : *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models*. Springer, 2000.
- [73] U. AALTOSALMI : *Fluid flow in porous media with the lattice-Boltzman method*. Thèse de doctorat, University of Jyväskylä, 2005.
- [74] A. DUPUIS : *From a lattice Boltzmann model to a parallel and reusable implementation of a virtual river*. Thèse de doctorat, Université de Genève, 2002.
- [75] U. FRICH, B. HASSLACHER et Y. POMEAU : Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical Review Letters*, 56:1505–1508, 1986.
- [76] H. CHEN, S. CHEN et W.H. MATTHAEUS : Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Physical Review A*, 45:R5359–R5342, 1992.
- [77] Y.H QIAN, S. SUCCI et S.A. ORSZAG : Recent advances in lattice Boltzmann computing. *In Annual Reviews of Computational Physics III*, pages 195–242, 1996.
- [78] M. ATIG : *Non-linéarité acoustique localisée à l'extrémité ouverte d'un tube*. Thèse de doctorat, Université du Maine, 2004.
- [79] A. KOPONEN, D. KANDHAI, E. HELLÉN, M. ALAVA, A. HOEKSTRA, M. KATAJA, K. NISKANEN, P. SLOOT et J. TIMONEN : Permeability of three-dimensional random fiber webs. *Physical Review Letters*, 80:716–719, 1998.
- [80] R. COMOLET : *Mécanique expérimentale des fluides, tome II : Dynamique des fluides réels, turbomachines*. Edition Masson, 1976.

Publications pendant la thèse

Publications

R. VINCENT, M. RUEFF, C. VOILLOT. 3-D Simulation of handsheets made of different pulps. Conference CostE36, Espoo (Finlande) 2005.

R. VINCENT, M. RUEFF, C. VOILLOT. 3-D Simulation of paper structure in view of optimizing paper production. Tappi Papermakers Conference, Atlanta (USA) 2006.

R. VINCENT, M. RUEFF, C. VOILLOT. Modélisation en trois dimensions de la structure du papier, Revue ATIP Vol. 60 (1), p. 25-28, 2006.

Prix

Ce travail a reçu un prix spécial du jury au grand prix de l'innovation décerné par l'ATIP (Association Technique de l'Industrie Papetière). Congrès 2005, Grenoble.

Modélisation et simulation en trois dimensions d'un réseau fibreux en vue de prédire ses propriétés physiques.

Résumé

Les fabricants de papier disposent de sources de matières premières fibreuses très diversifiées parmi lesquelles ils font leur choix en fonction de critères économiques et de potentiel papetier. L'art du papetier consiste à choisir les matières premières et leur faire subir les traitements adaptés.

En vue de mieux comprendre l'influence de la morphologie des fibres sur les caractéristiques du papier, nous avons développé un outil de simulation qui permet de générer, manipuler et visualiser un réseau fibreux dont la structure ressemble à celle d'un papier de laboratoire. Les principales propriétés de contexture ainsi que la résistance à la rupture en traction du réseau sont déterminées. Une méthode de Lattice-Boltzmann a été appliquée pour estimer la perméabilité du réseau. Toutes les étapes ont été validées par un travail expérimental.

Mots-clés

Modélisation, simulation numérique, papier, réseau fibreux, propriétés physiques, morphologie des fibres, perméabilité, résistance à la traction.

3-D modelling and simulation of fibrous network in view of predicting its physical properties

Abstract

Numerous types of commercial pulps are available on the market among which paper manufacturers make their choice according to economical criteria as well as papermaking ability. Papermaker's expertise consists in choosing appropriate raw materials and performing adapted treatments.

In view of getting a better comprehension of the influence of fibre morphology upon paper properties, we developed a new computational tool which generates a fibre network whose structure resembles to that of a laboratory paper. Moreover, with this software, a user can manipulate and visualise the network. The main structure properties and tensile strength are computed. A "Lattice-Boltzmann" method was used to assess the value of the permeability of the structure. All the development stages were validated through experimental work.