IMT Nord Europe
École Mines-Télécom
IMT-Université de Lille

ENGSYS 632
Ecole Doctorale

Université de Lille

Thèse de doctorat

Pour obtenir le grade de **Docteur**

en

Mécanique, Énergétique, Génie des Procédés et Génie Civil

Présentée par **Sarabilou KPEREGUENI**

Modélisation éléments finis multi-échelles des écoulements diphasiques en milieux poreux

Soutenue le 3 avril 2026 devant le jury composé de :

Mme. Luisa R. DA SILVA	Professeure, Centrale Nantes	Présidente
Mme. Catherine CHOQUET	Professeure, Université de La Rochelle	Rapporteure
M. Didier LASSEUX	Directeur de recherche, CNRS Bordeaux	Rapporteur
M. Thomas TOULORGE	Ingénieur de recherche, Cenaero	Examinateur
M. Chung-Hae PARK	Professeur, IMT Nord Europe	Codirecteur
M. Modesar SHAKOOR	Maître-Assistant, HDR, IMT Nord Europe	Directeur de thèse

Laboratoire d'accueil

Centre d'Enseignement, de Recherche et d'Innovation (CERI) Matériaux et Procédés de IMT Nord Europe

anr agence nationale de la recherche

MISSA

Remerciements

Ce manuscrit représente l'aboutissement d'une aventure à la fois intellectuelle et humaine de trois années au laboratoire centre de recherche et d'enseignement matériaux et procédés, de l'école IMT Nord Europe. A ce titre, je souhaitais remercier chaleureusement les personnes qui ont été impliqués, directement ou indirectement, dans la réalisation de ce projet MISSA ANR JCJC.

Je souhaite avant tout exprimer ma profonde gratitude à mon directeur de thèse, M. Modesar SHAKOOR. Je vous remercie chaleureusement pour m'avoir accompagné avec tant de bienveillance tout au long de ces années. Votre expertise, vos conseils précieux et votre engagement constant ont été des éléments clés dans l'aboutissement de ce travail. Travailler sous votre direction a été une expérience enrichissante et un véritable plaisir.

Mes remerciements s'adressent également à M. Chung-Hae PARK pour avoir co-dirigé ce travail. Je lui suis profondément reconnaissant pour ses conseils avisés et son soutien indéfectible durant ces années de recherche. L'encadrement complémentaire de mes deux directeurs, alliant rigueur scientifique de haut niveau et exigence, a été un moteur essentiel pour développer ma maturité scientifique et consolider ma confiance.

Je remercie également les membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce travail et d'assister à la soutenance de cette thèse. Mes sincères remerciements vont à Mme Catherine CHOQUET. et M. Didier LASSEUX pour avoir accepté d'en être la rapporteure et le rapporteur, ainsi que pour le temps et l'attention consacrés à la lecture de ce manuscrit. Vos commentaires enrichissants ainsi que la richesse de nos échanges lors de la soutenance ont contribué à améliorer la version finale de ce mémoire de thèse.

J'exprime ma gratitude à Mme Luisa SILVA et M. Thomas TOULORGE pour avoir accepté d'examiner ce travail. Je remercie tout particulièrement ce dernier pour son implication en tant qu'expert externe lors de mes comités de suivi de thèse. La richesse de nos échanges lors de la soutenance a contribué à développer ma maturité scientifique.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude envers mes collègues et amis du laboratoire CERI Matériaux et procédés, leurs encouragements et les moments de convivialité partagés ont largement contribué à rendre ces années de thèse plus agréables. Je remercie également M. Salim CHAKI pour son soutien moral, dans les moments difficiles.

Je remercie sincèrement mes proches et amis pour leur présence et leur compréhension

pendant les périodes intenses de travail. Leur soutien moral et leurs encouragements ont été essentiels.

Je voudrais remercier particulièrement ma famille, qui a toujours été présente à mes côtés, pour son soutien constant et tout l'amour partagé. Mes remerciements vont tout spécialement à mes parents pour leurs encouragements et leurs précieux conseils, ainsi qu'à mon grand frère Aliou pour sa présence rassurante au quotidien.

Enfin, je veux remercier très tendrement ma compagne, Hamoudiyatou. Au travers de cette aventure du doctorat, ton amour, ton soutien et l'espoir que tu me donnes chaque jour ont été des sources de force inestimables. Merci de m'accompagner.

« Petit à petit, l'oiseau fait son nid.»

— Proverbe français

Table des matières

Remerciements 2
Table des figures . . . 8
Liste des tableaux . . . 13

Résumé 14

Abstract 16

1 **Introduction générale** 21
1.1 Procédés de mise en œuvre des composites : aspects physiques . . . 23
1.2 Procédés de mise en œuvre des composites : modèles . . . 25
1.3 Objectifs de la thèse . . . 26
1.4 Méthodologie . . . 26
1.5 Plan du manuscrit . . . 28

2 **Méthodes numériques et techniques d'homogénéisation** 29
2.1 Procédés d'imprégnation . . . 30
2.1.1 Écoulement de résine à l'échelle macro . . . 31
2.1.2 Écoulement de résine à l'échelle mésoscopique : Notion de double porosité . . . 32
2.1.3 Écoulement de la résine à l'échelle microscopique . . . 36
2.1.4 Méthode de suivi d'interface . . . 36
2.2 Méthodes numériques . . . 45
2.2.1 Méthode des différences finies . . . 45
2.2.2 Méthode des volumes finis . . . 47
2.2.3 Méthode des éléments finis . . . 50
2.2.4 Choix de la méthode numérique retenue . . . 53
2.3 Logiciel FEMS . . . 54
2.3.1 Fonctionnalités principales . . . 54
2.3.2 Calcul parallèle dans FEMS . . . 54
2.4 Techniques d'homogénéisation . . . 55
2.4.1 Méthode de puissance virtuelle multi-échelle et extensions par éléments finis au carré . . . 56
2.4.2 Homogénéisation d'ordre 2 . . . 62
2.4.3 Homogénéisation asymptotique . . . 63
2.4.4 Choix de la méthode d'homogénéisation retenue . . . 67
Conclusion . . . 67

3 **Homogénéisation de l'équation d'advection** 69
Introduction . . . 70
3.1 Homogénéisation d'ordre un sans fluctuations . . . 71
3.1.1 Hypothèses de modélisation . . . 71
3.1.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 71
3.1.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 72
3.1.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 73
3.1.5 Identification des grandeurs duales à la grande échelle . . . 73
3.1.6 Conclusion . . . 74
3.2 Homogénéisation d'ordre un avec fluctuations . . . 75
3.2.1 Hypothèses de modélisation . . . 75
3.2.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 75
3.2.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 76
3.2.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 77
3.2.5 Transport et contrainte normale effectifs de l'interface grossière . . . 80
3.2.6 Conclusion . . . 80
3.3 Homogénéisation d'ordre deux . . . 81
3.3.1 Hypothèses de modélisation . . . 81
3.3.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 82
3.3.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 82
3.3.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 83
3.3.5 Transport, diffusion et dispersion effectifs de l'interface grossière . . . 84
3.3.6 Réduction du modèle d'ordre 2 et méthode level-set . . . 89
3.3.7 Conclusion . . . 90
3.4 Analyse comparative des modèles et choix du modèle retenu . . . 90
Conclusion . . . 91

4 **Modélisation multi-échelle de l'effet capillaire** 93
Introduction . . . 94
4.1 Modèle multi-échelle diphasique . . . 94
4.1.1 Cinématique multi-échelle . . . 95
4.1.2 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 97
4.1.3 Problème de petite échelle . . . 100
4.1.4 Identification des grandeurs duales de la grande échelle . . . 103
4.2 Méthodes numériques multi-échelles . . . 105
4.2.1 Problème de petite échelle . . . 105
4.2.2 Problème de grande échelle . . . 107
4.2.3 Réinitialisation de la fonction Level-Set . . . 110
4.3 Résultats et discussions . . . 111
4.3.1 Problème de bulle statique dans un milieu fluide . . . 111
4.3.2 Problème de bulle statique dans un milieu poreux . . . 116
4.3.3 Transition d'une bulle carrée vers une bulle circulaire . . . 120
4.3.4 Application aux composites à renforts en fibres de carbone . . . 127
Conclusion . . . 134

5 **Modélisation multi-échelle de la mouillabilité** 136

Introduction . . . 137
5.1 Modèle multi-échelle diphasique . . . 137
5.1.1 Problème de grande échelle . . . 138
5.1.2 Problème à la petite échelle . . . 138
5.2 Méthode numérique . . . 142
5.2.1 Discrétisation éléments finis . . . 142
5.2.2 Algorithme du couplage multi-échelle . . . 144
5.3 Résultats mono-échelle . . . 145
5.3.1 Simulation de l'étalement d'une goutte . . . 145
5.3.2 Simulation d'un écoulement diphasique à interface courbe . . . 151
5.4 Résultats multi-échelle . . . 154
5.4.1 Simulation d'une montée capillaire dans un milieu poreux . . . 154
5.4.2 Simulation d'injection de résine dans un milieu poreux . . . 158
5.4.3 Influence de la condition de Navier . . . 163
Conclusion . . . 167

6 Conclusion et perspectives 169
6.1 Conclusion . . . 169
6.2 Perspectives . . . 172

A Valorisation des travaux de recherche 174
A.1 Communications . . . 174
A.1.1 Communications nationales . . . 174
A.1.2 Communications internationales . . . 174
A.2 Publications . . . 174

Bibliographie 176

Table des figures

1.1 Domaines d'application des matériaux composites : (a) Airbus A350 XWB fabriqué à 53 % de matériaux composites, (b) avion de combat pour des applications de défense, (c) portière automobile en composite, (d) navire militaire pour le domaine naval. Figures reproduites d'après [31, 64, 67]. . 22
1.2 Les matrices avant la mise en œuvre : (a) polymère thermoplastique et (b) polymère thermodurcissable. Figure reproduite d'après [38]. 23
1.3 Différents types de renforts utilisés dans les matériaux composites : (a) filament de fibres formant un torron, (b) fibres de verre courtes, (c) torrons de fibres, (d) rouleau des mèches [38, 111]. 24
1.4 Représentation multi-échelle périodique d'une structure composite, Figure reproduite depuis [74]. 26

2.1 Différentes types de fabrication composites par RTM, Figure reproduite depuis [104]. 31
2.2 Dispositif expérimental utilisé par Darcy pour établir sa loi. Figure reproduite depuis [40]. 31
2.3 Écoulement à l'échelle mésoscopique et longueurs caractéristiques. Image reproduite depuis [118]. 33
2.4 Schéma d'un volume de moyenne V et de sa surface S au sein d'un milieu poreux. Figure issue de [111]. 34
2.5 Longueurs caractéristiques et mécanismes de formation des zones sèches dans le procédé RTM : (a) longueurs caractéristiques et espaces d'écoulement à l'intérieur du toron ; (b) migration, compression et formation des bulles. Figures reproduites depuis [119]. 35
2.6 Illustration du champ de fraction volumique γ utilisé dans la méthode VOF. 37
2.7 Approches SLIC et PLIC pour la reconstruction d'une interface. (a) reconstruction de l'interface par la méthode SLIC et (b) reconstruction de l'interface par la méthode PLIC [172]. 38
2.8 Illustration de la position de l'interface entre les deux phases Ω_1 et Ω_2, séparées par une interface. Figure adaptée de [175]. 39
2.9 Fonction Heaviside en fonction de $\boldsymbol{x}$ (mm). 40
2.10 Illustration de l'angle de contact formé entre une interface liquide/gaz et un solide à surface lisse [47]. 42
2.11 Illustration de l'angle de contact dynamique formé entre deux phases fluides et un solide [174]. 43
2.12 Réinitialisation géométrique sur un maillage avec interpolation P1 : (a) collection et (b) calcul de distance. Images reproduites depuis [144] . . . 45
2.13 Maillage unidimensionnel régulier de pas h. 46

2.14 Maillage régulier constitué de deux volumes de contrôle carrés adjacents. 49
2.15 Éléments finis triangulaires : (a) interpolation linéaire P1 et (b) interpolation quadratique P2. 50
2.16 Éléments finis quadrilatéraux : (a) interpolation Q1 et (b) interpolation Q2. 51
2.17 Représentation d'un domaine carré : (a) domaine continu Ω, (b) discrétisation en éléments finis triangulaires. 51
2.18 Partition d'un maillage triangulaire en quatre sous-domaines, chacun traité indépendamment par un processeur. 55
2.19 Illustration de la séparation des échelles. Figures reproduites depuis [175]. 56
2.20 Schéma du couplage bidirectionnel entre échelles dans le cadre du PPVM. Chaque point de grande échelle $\boldsymbol{x} \in \Omega^M$ est associé à un VER décrit par les coordonnées locales $\boldsymbol{y} \in \Omega^m$ [21]. 57
2.21 Influence de la taille du VER ($l = 0.025$ m) sur les résultats du modèle multi-échelle : (a) pression issue de la DNS (Pa), (b) vitesse issue de la DNS ($\mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$), (c) pression obtenue par l'approche multi-échelle (Pa) et (d) vitesse obtenue par l'approche multi-échelle ($\mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$). Figures reproduites d'après [143]. 61
2.22 Schéma multi-échelle d'un écoulement diphasique en milieu poreux : le domaine de grande échelle Ω^M est composé de cellules de taille ς. Le VER Ω^m contient une phase solide Ω_s^m, une phase liquide Ω_l^m, une phase gazeuse Ω_g^m et une interface liquide–gaz Γ_{lg}^m. 65

3.1 Schéma du couplage entre les petites et grandes échelles. La descente d'échelle transmet les grandeurs cinématiques : la position ϕ^M et son gradient $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M$. La remontée d'échelle fournit les grandeurs effectives : le scalaire g^M et le tenseur (ou vecteur) $\boldsymbol{\tau}^M$. 72
3.2 VER hétérogène : représentation réelle et image miroir. 77
3.3 Schéma du couplage entre les petites et grandes échelles. La descente d'échelle transmet les grandeurs cinématiques : la position ϕ^M, le gradient de position $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^{\mathbf{M}}$ et le gradient de gradient de position $\nabla^{\mathbf{2}}_{\boldsymbol{x}}\phi^{\mathbf{M}}$. La remontée d'échelle fournit les grandeurs effectives : scalaire (g^M), vectorielle ($\boldsymbol{\tau}^M$) et tensorielle d'ordre 2 ($\boldsymbol{\Sigma}^M$). 81

4.1 Représentation du VER triphasique avec interface liquide-gaz courbe (Γ_{lg}^m) et frontières périodiques associées ($\Gamma_{\mathrm{B}} \equiv \Gamma_{\mathrm{H}}$ et $\Gamma_{\mathrm{G}} \equiv \Gamma_{\mathrm{D}}$). 96
4.2 Illustration de la stratégie de discrétisation FE^2, comprenant un maillage de grande échelle de type P2/P1/P2, un élément de grande échelle représentatif, ainsi que le maillage et l'élément représentatif du domaine de petite échelle associé. 105
4.3 Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de la bulle statique : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine homogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en $\mathrm{mm \cdot s^{-1}}$. 112

4.4 Figures illustrant l'approche de validation du modèle multi-échelle pour le problème de bulle statique dans un milieu sans fibres, à l'instant considéré. $t = 4 \times 10^{-5}$ s : (a) saturation mono-échelle, (b) saturation dans le VER cible et (c) saturation multi-échelle. 113
4.5 Convergence de la courbe de saturation tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique dans un milieu sans les fibres, comparée aux solutions analytique et mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h = h^M = 32$ μm, (b) $h = h^M = 16$ μm, (c) $h = h^M = 8$ μm et (d) $h = h^M = 4$ μm. 114
4.6 Convergence de la courbe de pression tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique dans le milieu sans les fibres, comparée aux solutions analytique et mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h = h^M = 32$ μm, (b) $h = h^M = 16$ μm, (c) $h = h^M = 8$ μm et (d) $h = h^M = 4$ μm. 115
4.7 Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de bulle statique dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en mm s^{-1}. 117
4.8 Champ de saturation et de pression à la grande échelle à $t = 4 \times 10^{-5}$ s et $h^M = 4$ μm, comparé à la simulation mono-échelle pour le problème de bulle statique en milieu poreux (a) saturation mono-échelle, (b) pression mono-échelle, (c) saturation grande échelle et (d) pression grande échelle. 118
4.9 Convergence des champs de pression tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique en milieu poreux, comparée à la simulation mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h^M = 32$ μm, (b) $h^M = 16$ μm, (c) $h^M = 8$ μm et (d) $h^M = 4$ μm. 119
4.10 Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de transition d'une bulle carrée dans un milieu sans fibres : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en mm s^{-1}. 120
4.11 Forme de l'interface résine–air pour un problème de transition d'une bulle carrée statique en milieu sans fibres, comparée entre l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures (a), (c) et (e) correspondent à $t = 0$ s, tandis que (b), (d) et (f) correspondent à $t = 0.01$ s. 122
4.12 Circularité pour le problème de transition d'une bulle carrée statique en milieu sans fibres, comparée entre l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures (a) correspondent à $h = 32$ μm, (b) à $h = 16$ μm, (c) à $h = 8$ μm, et (d) présente un zoom sur (c). 123
4.13 Circularité en fonction de la taille d'élément et du diamètre de la bulle. . 124
4.14 Domaines, conditions aux limites et discrétisation par éléments finis utilisés pour le problème de transition d'une bulle carrée dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle avec $h = 0.4$ μm, (b) domaine de grande échelle avec $h^M = 8$ μm, (c) domaine hétérogène de petite échelle avec $h = 0.4$ μm. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en mm s^{-1}. 125

4.15 Évolution transitoire de la bulle carrée en milieu poreux, comparant l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures présentent les résultats pour : (a) $h^M = 32$ μm, (b) $h^M = 16$ μm et (c) $h^M = 8$ μm. 126
4.16 Domaine de grande échelle et conditions aux limites pour la simulation de la migration d'une bulle au sein d'une mèche de composite. Les longueurs sont exprimées en micromètres (μm) et les vitesses en millimètres par seconde ($\mathrm{mm} \cdot \mathrm{s}^{-1}$). 128
4.17 Domaine mono-échelle pour la simulation de la migration de la bulle d'air au sein d'une mèche de composite. 128
4.18 Position et morphologie de la bulle d'air dans la mèche aux instants : (a) $t = 0.0$ s, (b) $t = 0.264$ s et (c) $t = 0.60$ s. 130
4.19 Évolution de la pression le long de l'axe $\boldsymbol{x}$, évaluée pour $\boldsymbol{y} = 0.165\,\mathrm{mm}$, pour le problème de migration de la bulle dans la mèche. 131
4.20 Vitesse de migration de la bulle dans la mèche. 132
4.21 Rapport adimensionnel entre la vitesse moyenne de la bulle d'air et la vitesse d'injection de la résine, en fonction de la vitesse imposée, pour le problème de migration au sein de la mèche. 133

5.1 Schéma de la dynamique de la ligne de contact et définition de l'angle de contact. 139
5.2 Configuration bidimensionnelle considérée pour l'étude de l'étalement d'une goutte : (a) domaine de simulation et conditions aux limites associées (Neumann sur le bord supérieur Γ_N à $y = 1$ et Dirichlet homogène sur $\Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_N$), (b) zoom sur le point triple. 146
5.3 Illustration du champ de saturation et de pression : (a) saturation à $t = 0$ s, (b) saturation à $t = 1.0 \times 10^{-2}$ s, (c) pression à $t = 0$ s et (d) pression à $t = 1.0 \times 10^{-2}$ s. La pression est en Pa 147
5.4 Évolution de la forme de la goutte à différents instants : (a) profil initial à $t = 0$ s, (b) profil à $t = 0.01$ s. 148
5.5 Simulation de l'étalement d'une goutte : (a) comparaison du champ de pression à $t = 0,01$ s et (b) évolution de l'angle de contact en fonction du temps. 149
5.6 Dynamique du point triple : (a) évolution de la position du point triple au cours du temps et (b) évolution du nombre capillaire associé. 150
5.7 Configuration du canal rectangulaire : (a) géométrie et conditions aux limites ; (b) maillage de référence avec $h = 0.2$ μm. 151
5.8 Évolution de la saturation pour une tension de surface $\sigma_s = 0.2$ $\mathrm{N} \cdot \mathrm{m}^{-1}$: (a) $t = 0$ s et (b) $t = 1.0 \times 10^{-5}$ s. 152
5.9 Dynamique du point triple dans la géométrie rectangulaire : (a) évolution de la position du point triple au cours du temps et (b) évolution de l'angle de contact en fonction du temps. 153
5.10 Géométrie et conditions aux limites de la simulation de la montée capillaire dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine macroscopique et (c) domaine microscopique avec $l = 10$ μm. 156

5.11 Comparaison du champ de saturation lors de la simulation de la montée capillaire dans un milieu poreux à $t = 1,0\times10^{-5}$ s : (a) champ de saturation mono-échelle ; (b) zoom sur (a). 157
5.12 Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème d'injection de résine dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm, les vitesses en mm s^{-1} et la pression en MPa . . . 159
5.13 Champs de saturation et de pression à la grande échelle à $t = 8 \times 10^{-4}$ s, comparés à la simulation mono-échelle pour le problème d'injection de résine en milieu poreux : (a) saturation mono-échelle, (b) pression mono-échelle, (c) saturation grande échelle et (d) pression grande échelle. . . . 160
5.14 Évolution de la saturation et de la pression tracé en $x = 0.005$ mm pour $t = 0.0008$ s : (a) saturation et (b) pression. La pression est exprimée en MPa. 161
5.15 Comparaison de la vitesse globale du front de résine entre les approches mono-échelle et multi-échelle. 162
5.16 Influence du coefficient de friction de la résine sur la position du point triple pour deux valeurs du coefficient de friction : (a) point rose représente le point triple et (b) comparaison des déplacements verticaux des points triples pour différentes valeurs des coefficients de friction. 163
5.17 Champs de saturation et comparaison de la vitesse de migration à $t = 0.157$ s : (a) saturation à la grande échelle, (b) saturation à la petite échelle et (c) comparaison de la vitesse de migration de la bulle. 164
5.18 Résultats de la simulation de la migration de la bulle : (a) saturation, et comparaison de la vitesse de migration de la bulle pour (b) $h^M = 25.6$ μm et (c) $h^M = 12.8$ μm. 166

Liste des tableaux

2.1 Comparaison des méthodes numériques classiques. 53

4.1 Erreur relative sur le champ de pression entre les solutions monoscale et analytique. 116
4.2 Temps de calcul post-traités pour les approches mono-échelle et multi-échelle. 126
4.3 Comparaison des coûts de calcul entre les approches mono-échelle et multi-échelle pour le problème de migration de la bulle d'air. 131

5.1 Tableau récapitulatif de l'étude de l'influence de la tension de surface. Avec Ca obtenu par l'expression (5.28), et Ca_{max} est issu de la référence. . . . 153

Résumé

La modélisation des écoulements diphasiques en milieux poreux, associée au suivi de l'évolution de l'interface résine–air, constitue un enjeu majeur dans de nombreux problèmes d'ingénierie, notamment pour la simulation des procédés de fabrication des matériaux composites par moulage par transfert de résine. Ce procédé consiste à placer un renfort en fibres de carbone ou de verre dans un moule initialement rempli d'air, puis à injecter une résine polymère liquide afin d'imprégner le renfort et de former une structure composite légère aux bonnes propriétés mécaniques. Dans une approche de modélisation directe, la prise en compte explicite de millions de fibres au sein d'un domaine de calcul unique nécessiterait un maillage par éléments finis capable de discrétiser simultanément l'hétérogénéité à l'échelle des fibres et le domaine du moule, ce qui conduirait à un coût de calcul prohibitif. Cette thèse vise ainsi à développer un modèle numérique multi-échelle permettant de séparer l'échelle du moule de celle des fibres, tout en réalisant des simulations avec des temps de calcul raisonnables.

Le modèle proposé repose sur un écoulement diphasique avec tension de surface à l'interface résine–air à l'échelle des fibres, et un modèle représentatif à la grande échelle obtenu par homogénéisation, basé sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle. Ce dernier est couplé à une équation d'avancement du front de résine, également déduite par homogénéisation. Le lien entre les deux échelles est assuré par une stratégie de type éléments finis au carré (FE^2), dans laquelle les tenseurs effectifs nécessaires à la résolution du problème de grande échelle sont construits à partir des contraintes et des forces homogénéisées à partir des simulations de petite échelle.

Le modèle multi-échelle ainsi développé est utilisé pour simuler la migration de bulles au cours des procédés d'imprégnation. Des configurations de bulles statiques, de transitions de formes en milieu fluide et en milieu poreux, ainsi que des cas de migration de bulles au sein d'une mèche fibreuse, sont étudiés. Ces simulations reposent sur une formulation par éléments finis couplant, à la grande échelle, les équations d'écoulement et le transport de l'interface, tandis que la petite échelle intègre les effets capillaires, avec une condition de non-glissement aux parois des fibres.

Les comparaisons des temps de calcul entre l'approche directe et l'approche multi-échelle dans le cas des milieux poreux, mettent en évidence la capacité du modèle proposé à réaliser des simulations à un coût computationnel raisonnable. Enfin, afin de mieux représenter les conditions réelles des procédés d'imprégnation, la modélisation à l'échelle des fibres est enrichie par la prise en compte de la mouillabilité. Celle-ci permet de régulariser les singularités de contraintes de cisaillement au voisinage de la ligne de contact, au moyen de l'introduction d'une condition de glissement de Navier associée à une condition d'angle de contact.

Mots-clés : modélisation multi-échelle, écoulements diphasiques, élément finis, homogénéisation numérique, milieux poreux.

Abstract

The modeling of two-phase flows in porous media, combined with the tracking of the fluid–fluid interface evolution, constitutes a major challenge in many engineering applications, particularly in the simulation of composite material manufacturing processes such as resin transfer molding. This process involves placing a carbon- or glass-fiber reinforcement in a mold initially filled with air, followed by the injection of a liquid polymer resin to impregnate the reinforcement and form a lightweight composite structure with good mechanical properties. In a direct modeling approach, the explicit representation of millions of fibers within a single computational domain would require a finite-element mesh capable of simultaneously resolving the heterogeneity at the fiber scale and the mold-scale domain, leading to a prohibitive computational cost. This thesis therefore aims to develop a numerical multiscale model that separates the mold scale from the fiber scale, while enabling simulations with reasonable computational times.

The proposed model is based on a coupling between a two-phase flow with surface tension at the resin–air interface at the fiber scale, and a representative coarse-scale model obtained by homogenization, based on the multiscale virtual power principle. This coarse-scale model is coupled with a a governing equation for the advancement of the resin flow front, which is also derived through homogenization. The interaction between the two scales is ensured by a finite-element-squared (FE^2) strategy, in which the effective tensors required for the coarse-scale problem are constructed from the stress and force residuals obtained from the fine-scale simulations.

The resulting multiscale model is used to simulate bubble migration during impregnation processes. Static bubble configurations, bubble shape transitions in fluid and porous media, as well as bubble migration within a fibrous tow, are investigated. These simulations rely on a finite-element formulation that couples, at the coarse scale, the flow equations and interface transport, while the fine scale incorporates capillary effects with a no-slip boundary condition at the fiber walls.

Comparisons of computational times between the single-scale and multi-scale approaches in porous media demonstrate the ability of the proposed model to perform simulations at a reasonable computational cost. Finally, in order to better represent realistic impregnation conditions, the fiber-scale model is enriched by incorporating wettability effects. This allows regularization of shear-stress singularities near the contact line through the introduction of a Navier slip condition combined with a prescribed contact angle.

Keywords : multi-scale modeling, two-phase flows, finite elements, computational homogenization, porous media.

Février 2023 - Mars 2026

Nomenclature

Grandeurs

$\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}$	Partie déviatorique du tenseur de contrainte grande échelle	Pa
$\boldsymbol{I}$	Tenseur identité	–
$\boldsymbol{N}$	Tenseur de projection sur interface liquide-solide	–
$\boldsymbol{v}$	Vitesse moyenne du fluide	$\mathrm{m.s}^{-1}$
$\boldsymbol{v}_s$	Vitesse tangentielle du fluide à l'interface solide	$\mathrm{m}.s^{-}1$
$\boldsymbol{x}$	Coordonnée spatiale à la grande échelle	
$\boldsymbol{y}$	Coordonnée spatiale à la petite échelle	
Δp	Différence de pression	Pa
$\mathbf{K}$	Tenseur de perméabilité du milieu poreux	m^2
$\mathbf{n}$	Vecteur normal unitaire au mur	–
$\nabla \cdot \nabla$	Laplacien	m^{-2}
$\nabla\cdot$	Opérateur de divergence	m^{-1}
∇p	Gradient de pression	$\mathrm{Pa.m}^{-1}$
∇	Opérateur gradient	m^{-1}
$\nabla_y, \nabla_{\mathbf{x}}$	Gradient à la petite échelle y	m^{-1}
$\nabla_{\boldsymbol{x}}, \nabla_{\mathbf{X}}$	Gradient à la grande échelle x	m^{-1}
$\otimes$	Produit tensoriel	
L	Longueur du milieu poreux	m
p	Pression du fluide	Pa
p^M	Pression à la grande échelle	Pa
p^m	Pression à la petite échelle	Pa
T	Température	K
t	Temps	s
V_p	Volume de pore	m^3

V_T Volume total ..... m^3

x Coordonnée spatiale dans la direction de la conduction ..... m

Lettres grecques

$\boldsymbol{\alpha}$ Multiplicateur de lagrange ..... –

$\boldsymbol{\beta}$ Multiplicateur de lagrange .....

$\boldsymbol{\tau}$ Tenseur des contraintes visqueuses ..... Pa

δ Fonction delta centrée sur l'interface ..... $m.^{-1}$

$\delta_\epsilon(\phi)$ Fonction delta régulière centrée sur l'interface ..... $m.^{-1}$

$\eta(\phi)$ Coefficient de frottement effectif ..... $Pa{\cdot}s.m^{-1}$

η_{CL} Coefficient de frottement sur la ligne de contact ..... $N{\cdot}s.m^{-2}$

η_N Coefficient de frottement normal ..... $Pa{\cdot}s.m^{-1}$

$\gamma(\boldsymbol{x}, t)$ Fonction scalaire ..... –

$\nabla^{\mathbf{2}}_{\boldsymbol{x}}\phi^{\mathbf{M}}$ Hessien de la fonction position d'interface à grande échelle .....

μ Viscosité dynamique ..... Pa·s

μ_e Viscosité effective ..... Pa·s

$\nabla\phi$ Gradient de la fonction Level-Set ..... m^{-1}

$\nabla_{\boldsymbol{x}}$ Opérateur gradient par rapport à la grande échelle ..... –

$\nabla_{\boldsymbol{y}}$ Opérateur gradient par rapport à la petite échelle ..... –

Ω^M Domaine de grande échelle ..... m^3

Ω^m Volume Elementaire Representative ..... m^3

$\partial\Omega^m$ Frontière du domaine Ω^m ..... m^2

ϕ Fonction distance signée (Level-Set) ..... –

ϕ_f Porosité du milieu ..... –

ρ Masse volumique du fluide ..... $kg.m^{-3}$

σ_s Tension de surface entre les deux phases ..... $N.m^{-1}$

σ_{sg} Tension de surface entre le solide et le gaz ..... $N.m^{-1}$

σ_{sl} Tension interfaciale entre le solide et le liquide ..... $N.m^{-1}$

σ_s Tension de surface entre le liquide et le gaz ..... $N.m^{-1}$

θ Angle de contact entre le liquide et le solide ..... rad

θ_D Angle de contact dynamique ..... rad

θ_S Angle de contact statique au point triple ..... rad

$\tilde{\phi}$	Terme de fluctuation de la position de l'interface	–
ε	Paramètre de séparation d'échelle	–
ϕ^M	Position de l'interface à la grande échelle	–
ϕ^m	Position de l'interface à la petite échelle	–

Nombres sans dimension

Ca	Nombre de capillarité	–

Indices

0	État initial	–
$_h$	Taille d'élément finis	mm
K	Élément finis	-
M	Indice de grande échelle	–
m	Indice de petite échelle	–

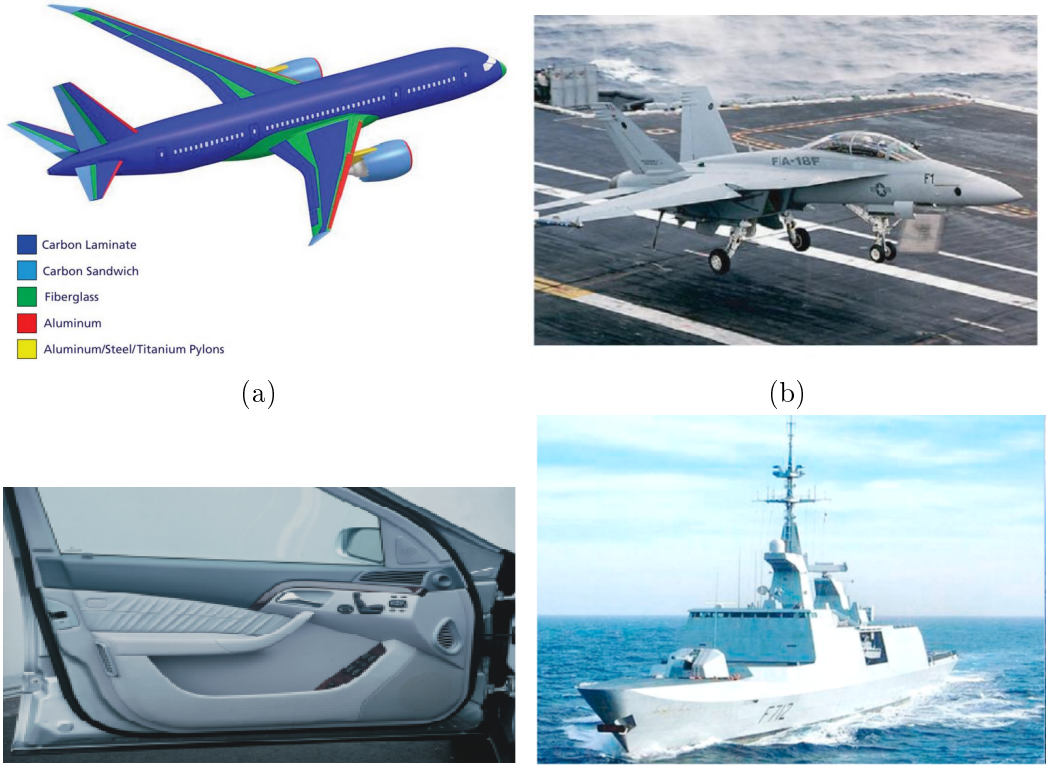
Chapitre 1

Introduction générale

Introduction

Les matériaux composites à matrice polymère sont constitués de fibres continues noyées dans une matrice polymère, conférant à l'ensemble d'excellentes propriétés mécaniques spécifiques [2, 111]. Leur fabrication repose sur des procédés de mise en œuvre déterminants pour obtenir des pièces légères, performantes, fiables et adaptées à une large gamme d'exigences industrielles. Ces applications couvrent de nombreux secteurs tels que l'aéronautique, le spatial, l'automobile ou le domaine naval, comme illustré à la figure 1.1.

Pour répondre à ces besoins, les procédés de mise en œuvre englobent un vaste ensemble de techniques, allant des méthodes conventionnelles aux approches automatisées, aujourd'hui parfois assistées par l'intelligence artificielle [33, 92, 116, 123]. Dans ce cadre, la présente étude s'intéresse particulièrement aux phénomènes physiques intervenant au cours de la fabrication de ces matériaux, ainsi qu'aux modèles prédictifs développés dans la littérature.



(a) (b)

(c) (d)

FIGURE 1.1 – Domaines d'application des matériaux composites : (a) Airbus A350 XWB fabriqué à 53 % de matériaux composites, (b) avion de combat pour des applications de défense, (c) portière automobile en composite, (d) navire militaire pour le domaine naval. Figures reproduites d'après [31, 64, 67].

1.1 Procédés de mise en œuvre des composites : aspects physiques

Les matériaux composites reposent sur l'association d'une matrice et de renforts fibreux [44, 118, 119]. On distingue principalement deux grandes familles de matrices polymères : les polymères thermoplastiques (figure 1.2(a)) [38] et les polymères thermodurcissables (figure 1.2(b)) [38, 44]. Chaque type de polymère requiert des procédés de mise en œuvre spécifiques, adaptés à sa nature chimique. Néanmoins, leur fabrication comporte généralement plusieurs étapes clés communes telles que la préparation des fibres, l'imprégnation et la consolidation du matériau.

L'étape d'imprégnation, au cours de laquelle la résine sature entièrement le renfort, est suivie par la phase de consolidation, tandis que dans le cas d'une résine thermodurcissable, elle est relayée par la phase de polymérisation [4, 31]. Les principaux procédés industriels permettant de réaliser ces opérations incluent notamment le moulage par transfert de résine (*Resin Transfer Molding*, RTM), le moulage sous vide ainsi que le moulage par autoclave.



(a) (b)

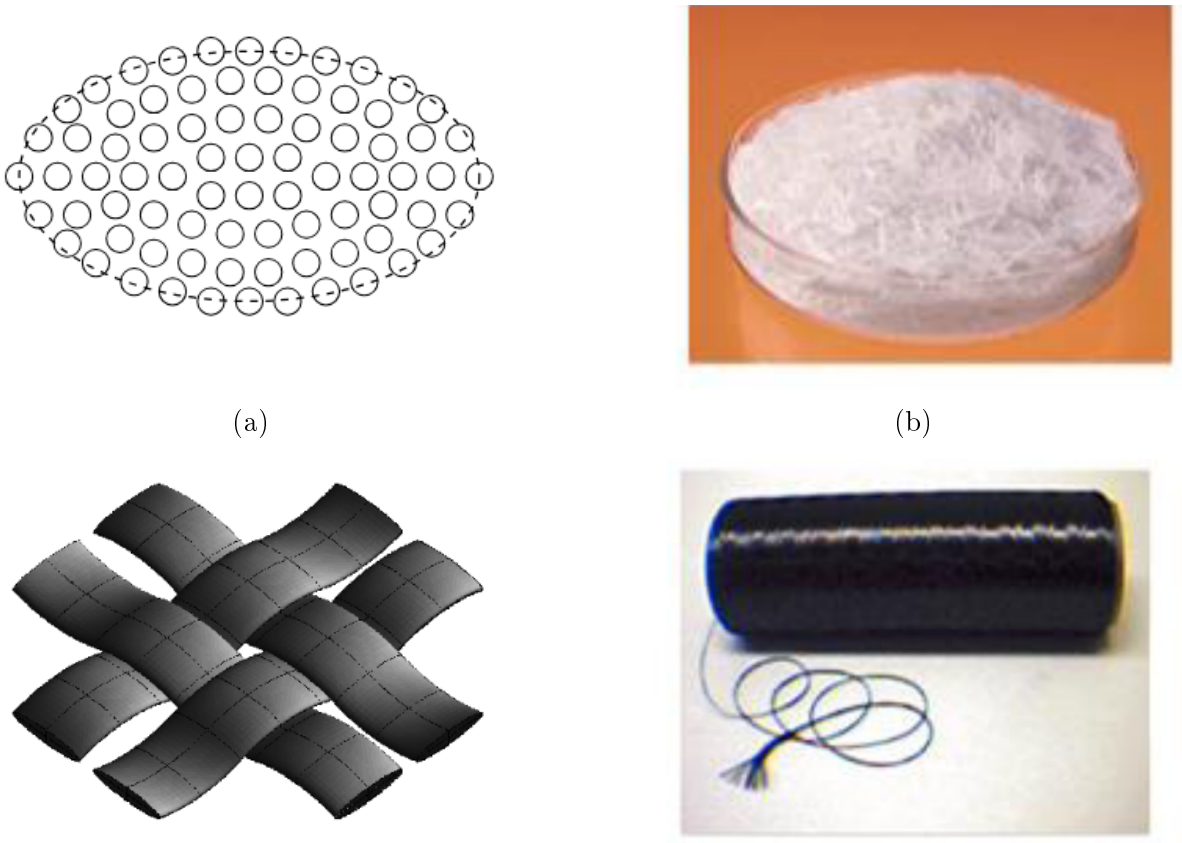
FIGURE 1.2 – Les matrices avant la mise en œuvre : (a) polymère thermoplastique et (b) polymère thermodurcissable. Figure reproduite d'après [38].

Parallèlement à la matrice, le choix des renforts est tout aussi crucial. Parmi les géométries les plus courantes, on distingue deux grandes catégories, illustrées sur la figure 1.3(a-c).

D'une part, les **fibres courtes** [7, 110, 163] boostent les propriétés mécaniques dans de nombreux domaines, qu'il s'agisse du secteur dentaire, des polymères, des céramiques, des bétons ou encore des géopolymères, à condition de maîtriser strictement leur longueur, leur teneur et l'interface fibre–matrice. Toutefois, une teneur trop élevée en fibres courtes réduit la ductilité du matériau et complique sa mise en œuvre, tandis que l'optimum est généralement atteint pour une teneur intermédiaire [163].

D'autre part, les **fibres longues** offrent des ténacités élevées grâce à leur continuité, mais exigent un contrôle encore plus fin de l'interface fibre et matrice ainsi que des

paramètres de mise en oeuvre [70, 112]. Un compromis s'impose toutefois entre longueur et teneur en fibres, processabilité et durabilité à long terme. Dans le cadre de ce travail, l'attention se porte plus particulièrement sur les composites à fibres longues.



(a) (b)

(c) (d)

FIGURE 1.3 – Différents types de renforts utilisés dans les matériaux composites : (a) filament de fibres formant un torron, (b) fibres de verre courtes, (c) torrons de fibres, (d) rouleau des mèches [38, 111].

La mise en œuvre des matériaux composites fait intervenir une combinaison de phénomènes multiphysiques complexes [111]. Ces derniers incluent les transferts thermiques, les déformations mécaniques ainsi que divers écoulements de fluides. Ces écoulements concernent aussi bien le déplacement de la résine et de l'air que l'imprégnation progressive des fibres [2, 118]. Sous l'effet de forces capillaires, visqueuses et inertielles, on observe également la formation puis la migration de bulles d'air [2]. Enfin, diverses transformations chimiques entrent en jeu, notamment les réactions de polymérisation [24, 100] ou de cristallisation.

Tous ces phénomènes conditionnent directement la qualité finale des pièces obtenues. Une compréhension approfondie et une maîtrise rigoureuse de ces mécanismes s'avèrent donc essentielles pour optimiser la performance et la fiabilité des structures composites [17, 31]. À cet effet, le développement de modèles prédictifs constitue un outil indispensable pour simuler et optimiser les procédés de mise en œuvre.

1.2 Procédés de mise en œuvre des composites : modèles

La modélisation des procédés de fabrication des composites est un processus qui permet de créer un modèle capable de prédire, d'optimiser et d'améliorer la qualité des pièces en intégrant les phénomènes physiques complexes et les interactions multiphysiques. Elle contribue à réduire les coûts liés aux campagnes expérimentales, à s'affranchir des limites de la mesure, à anticiper l'apparition de défauts et à accélérer le développement industriel. Les modèles développés dans ce domaine peuvent être regroupés en trois grandes familles :

- Les *modèles physiques*, fondés sur les équations de la physique des milieux continus, permettent de décrire les phénomènes couplés intervenant lors de la mise en œuvre des composites [17, 31, 118].
- Les *modèles numériques* reposent sur des approches telles que la méthode des éléments finis, des volumes finis ou des différences finies, permettant de discrétiser les modèles physiques et de simuler les processus d'infusion, de consolidation ou de déformation des préformes [17, 118].
- Enfin, les *modèles hybrides et* data-driven intègrent des approches combinées ou fondées sur l'intelligence artificielle afin d'accélérer les simulations, d'optimiser les paramètres du procédé et de prédire des phénomènes complexes à moindre coût [92, 116, 164].

La modélisation a progressivement évolué vers des approches **multi-échelles** [78, 173]. L'objectif de cette démarche est de relier les phénomènes physiques et mécaniques observés à différentes échelles, de l'échelle micrométrique à l'échelle macromécanique, tout en tenant compte de l'architecture complexe des matériaux. Ce changement de paradigme permet de mieux comprendre, prédire et optimiser le comportement des composites en considérant que leurs propriétés finales sont étroitement liées à l'état de leurs, microstructures et mésostructures à l'issue du procédé de fabrication.

Dans ce cadre, on distingue principalement deux grandes familles de modèles :

- Les **modèles séquentiels** transmettent l'information de la petite échelle vers la grande échelle à l'aide de volumes élémentaires représentatifs (VER) et de techniques d'homogénéisation [49, 51] (voir figure 1.4).
- À l'inverse, les **approches par éléments finis au carré directes** (FE^2) couplent et résolvent simultanément les calculs aux différentes échelles. Bien qu'ils permettent de capturer finement les interactions locales et globales, cela se fait au prix d'un coût de calcul élevé [177].

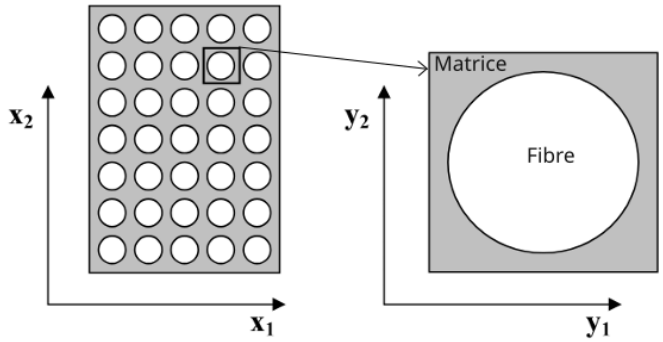


FIGURE 1.4 – Représentation multi-échelle périodique d'une structure composite, Figure reproduite depuis [74].

Dans le cas particulier de l'écoulement diphasique, qui correspond à l'écoulement de la résine fluide autour des fibres solides (figure 1.4), la modélisation multi-échelle constitue un outil déterminant. Elle permet d'analyser précisément la distribution de la résine ainsi que les mécanismes de formation des micro- et macro-porosités.

L'évaluation de ces différentes approches multi-échelles met en évidence la complexité de verrouiller simultanément la précision locale et le temps de calcul. C'est précisément pour lever ces verrous scientifiques que s'articulent les objectifs de ce travail de thèse.

1.3 Objectifs de la thèse

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet ANR JCJC MISSA dédié à la modélisation et à l'apprentissage des interfaces dans les écoulements diphasiques. La contribution principale de cette thèse réside dans le développement et la mise en œuvre d'un modèle numérique multi-échelle. Ce modèle permet de représenter les hétérogénéités de petite taille présentes dans les écoulements diphasiques en milieux poreux, tout en maintenant un coût de calcul raisonnable.

La première étape consiste à identifier les équations régissant chaque échelle, avant d'établir un couplage cohérent entre la petite et la grande échelle. La méthode numérique constitue ensuite l'élément central pour discrétiser le modèle proposé. Elle permet ensuite d'exploiter ce nouvel outil de modélisation afin d'étudier l'imprégnation des milieux fibreux ainsi que la migration des bulles dans les composites. L'ensemble de ces objectifs et démarches constitue l'originalité et l'enjeu principal de cette thèse. En effet, les approches existantes reposent principalement sur des extensions de la loi de Darcy et des relations empiriques.

1.4 Méthodologie

La modélisation de l'écoulement diphasique en milieu poreux repose sur deux grandes approches : l'approche directe, telle que la simulation numérique directe (DNS), et l'approche multi-échelle, basée sur une séparation explicite des échelles spatiales.

La première consiste à représenter directement chaque fibre au sein du domaine du moule [2, 69, 118]. Si cette méthode permet une description précise des interactions

locales, son coût de calcul prohibitif, ainsi que sa sensibilité à la taille du problème et au nombre de Reynolds, la rendent impraticable comme outil de conception industrielle de routine [69, 77, 169]. C'est pourquoi, dans l'industrie, la DNS est, dans la mesure du possible, remplacée par la loi de Darcy afin de réaliser la simulation de l'injection à l'échelle de la pièce industrielle [68, 97, 135].

Par conséquent, l'approche multi-échelle s'impose comme une alternative de choix. Elle vise à dissocier l'échelle des fibres de celle du moule afin d'en déduire le modèle à grande échelle du système, tout en intégrant les effets locaux via des modèles représentatifs [32, 84, 111]. Dans le cadre de ce travail, cette approche est privilégiée car elle offre un compromis optimal entre précision physique et coût numérique, particulièrement adapté aux milieux poreux complexes tels que les composites renforcés de fibres.

En pratique, l'application de ces théories repose presque entièrement sur des techniques d'homogénéisation numérique par éléments finis [23]. En mécanique des matériaux, ces approches s'avèrent matures pour simuler divers phénomènes tels que la plasticité, les couplages thermomécaniques, la dégradation des structures ou encore les effets dynamiques. En revanche, en mécanique des fluides et pour l'étude des milieux poreux, bien que ces méthodes d'homogénéisation soient documentées [13, 15, 84, 121], leur mise en œuvre pour des écoulements diphasiques représente encore un défi majeur, principalement en raison de la complexité liée à la dynamique des interfaces.

Pour répondre à ces enjeux, le cadre multi-échelle proposé dans cette étude s'articule en trois volets :

1. **Homogénéisation d'ordre un sans fluctuations** : ce premier volet repose sur la formulation homogénéisée du problème d'écoulement et de l'avancement de l'interface, en négligeant les termes de fluctuation. Il permet de modéliser les écoulements diphasiques en milieux poreux présentant une interface plane.
2. **Prise en compte des fluctuations d'ordre un** : le second volet intègre les conditions de périodicité sur les bords opposés du VER, à partir des termes de fluctuation, que ce soit dans l'écoulement ou dans le transport de l'interface. Ce volet vise à représenter les comportements à petite échelle liés à la courbure de l'interface et à la tension de surface, caractéristiques des écoulements diphasiques.
3. **Homogénéisation d'ordre deux sans fluctuations** : enfin, le dernier volet consiste à étendre le modèle à une homogénéisation d'ordre supérieur pour le transport de l'interface, afin de mieux prendre en compte les hétérogénéités à différentes échelles.

L'ensemble du modèle repose sur les hypothèses de modélisation suivantes :

- Les fluides sont considérés comme incompressibles dans chaque phase et à toutes les échelles ;
- Le problème est simplifié à deux échelles, avec un rapport significatif entre la taille de la pièce et le diamètre des fibres ;
- L'écoulement est supposé visqueux et newtonien ;

- Les conditions aux limites sur les parois fibreuses respectent soit la condition de non-glissement, soit la condition de glissement de Navier ;
- La tension de surface est prise en compte explicitement à l'interface entre les phases.

1.5 Plan du manuscrit

Un premier chapitre précise le contexte de la modélisation des matériaux composites par le procédé d'injection RTM, les objectifs de la thèse ainsi que la méthodologie.

Le deuxième chapitre de ce manuscrit est consacré aux modèles physiques de l'écoulement, aux méthodes numériques nécessaires à la discrétisation des modèles d'écoulements diphasiques en milieux poreux, ainsi qu'aux techniques d'homogénéisation appliquées au procédé RTM. Il introduit les deux approches d'homogénéisation les plus répandues dans la littérature afin de justifier le choix du principe des puissances virtuelles multi-échelle. Ce chapitre expose également les méthodes numériques dédiées à la modélisation des écoulements diphasiques à l'échelle des fibres.

Le troisième chapitre formalise l'homogénéisation de l'équation d'advection par ce même principe des puissances virtuelles, en y intégrant la méthode Level-Set. Trois modèles d'interface y sont ainsi développés. Dans un premier temps, un modèle d'ordre un sans fluctuation est proposé ; il est couplé au modèle d'écoulement afin de former un modèle d'écoulement diphasique multi-échelle permettant de prédire ce phénomène. Ensuite, les limites du modèle précédent conduisent au développement d'un modèle d'ordre un avec fluctuation, qui intègre la périodicité sur le terme de fluctuation afin de représenter au mieux l'écoulement diphasique. Enfin, la prise en compte de la courbure de l'interface pour caractériser la capillarité mène au développement d'un modèle d'ordre deux sans fluctuation.

Le quatrième chapitre est dédié à la modélisation multi-échelle de l'effet capillaire. Il présente le modèle d'écoulement diphasique multi-échelle retenu, puis détaille sa méthode de résolution numérique par la méthode des éléments finis au carré (FE^2). L'accent est mis sur l'algorithme de couplage entre les deux échelles, ainsi que sur les équations d'écoulement et d'advection. Enfin, des cas tests issus de la littérature sont présentés afin de valider le modèle développé, à travers une comparaison systématique avec des résultats de simulation numérique directe (DNS).

Le cinquième chapitre étend l'homogénéisation numérique de l'écoulement diphasique en milieu poreux en y intégrant l'influence de la mouillabilité, via l'angle de contact entre les fibres et les phases liquides. Dans un premier temps, la modélisation de l'angle de contact par une approche implicite basée sur la méthode Level-Set est présentée. Ensuite, des cas de validation à une seule échelle sont exposés afin d'analyser l'effet de la mouillabilité en milieux poreux, et des cas multi-échelles y sont également présentés.

Enfin, **le sixième chapitre** présente la conclusion générale de ce manuscrit, plus précisément la synthèse des principaux résultats. Il propose une analyse critique de ces derniers, puis ouvre sur les perspectives envisagées pour la suite de ces travaux.

Chapitre 2

Méthodes numériques et techniques d'homogénéisation appliquées aux procédés d'imprégnation

Contents

2.1 Procédés d'imprégnation 30
2.1.1 Écoulement de résine à l'échelle macro 31
2.1.2 Écoulement de résine à l'échelle mésoscopique : Notion de double porosité 32
2.1.3 Écoulement de la résine à l'échelle microscopique 36
2.1.4 Méthode de suivi d'interface 36
2.2 Méthodes numériques 45
2.2.1 Méthode des différences finies 45
2.2.2 Méthode des volumes finis 47
2.2.3 Méthode des éléments finis 50
2.2.4 Choix de la méthode numérique retenue 53
2.3 Logiciel FEMS 54
2.3.1 Fonctionnalités principales 54
2.3.2 Calcul parallèle dans FEMS 54
2.4 Techniques d'homogénéisation 55
2.4.1 Méthode de puissance virtuelle multi-échelle et extensions par éléments finis au carré 56
2.4.2 Homogénéisation d'ordre 2 62
2.4.3 Homogénéisation asymptotique 63
2.4.4 Choix de la méthode d'homogénéisation retenue 67
Conclusion 67

Introduction

La prédiction du procédé d'imprégnation dans les matériaux composites [2, 32, 114] repose généralement sur des modèles décrivant les écoulements au sein du milieu poreux. Ces modèles se traduisent par des équations aux dérivées partielles, dont la résolution nécessite le recours à une méthode numérique adaptée pour leur discrétisation et leur calcul. Une telle approche permet d'estimer la progression du front de résine [118], la saturation des fibres ainsi que l'apparition de vides [2, 111], facilitant ainsi l'optimisation de paramètres clés tels que la pression, la température, le temps de cycle et la structure textile. À cet égard, les recherches récentes couplent de plus en plus des modèles analytiques (de type Darcy), des simulations numériques multi-échelles [98] et des validations expérimentales.

Ce chapitre débute par la présentation des différents modèles mathématiques du procédé d'imprégnation décrivant les écoulements en milieux poreux selon les échelles d'observation. Trois méthodes numériques de discrétisation des équations aux dérivées partielles sont ensuite présentées, afin de motiver le choix de la méthode des éléments finis. Deux approches numériques de suivi d'interface dans les écoulements diphasiques sont également introduites, pour justifier la préférence accordée à la méthode Level-Set. Enfin, deux techniques d'homogénéisation des équations d'écoulement pour une approche multi-échelle sont exposées, en vue de motiver le choix du principe des puissances virtuelles multi-échelle.

2.1 Modélisation des procédés d'imprégnation

La modélisation du procédé d'imprégnation est un domaine clé pour optimiser la fabrication de matériaux composites, tels que le RTM. Cette technique est employée pour fabriquer des pièces composites à renforts tissés [132, 160]. Les différentes étapes de cette méthode de fabrication sont illustrées sur la figure 2.1.

La première étape est appelée étape de préformage. Elle consiste à placer le renfort tissé dans un moule à l'aide d'un poinçon, puis à disposer deux parties rigides permettant de mieux contrôler la compression du renfort lors de la mise en forme, et donc son épaisseur finale. Afin d'éviter la formation de plis pendant l'emboutissage, des serre-flancs peuvent être utilisés pour appliquer une légère tension aux mèches. Une fois que le renfort tissé a pris la forme souhaitée dans le moule, la résine est injectée. L'ensemble est ensuite chauffé afin de permettre la polymérisation. Après la consolidation de la résine, le moule est ouvert et la pièce est démoulée.

Après la présentation des différentes étapes de ce procédé, il est nécessaire de s'intéresser aux modèles permettant de représenter ce procédé RTM. En effet, la modélisation du RTM s'articule autour de plusieurs sous-modèles : remplissage du moule, cinétique de polymérisation, évolution de la viscosité, transfert thermique, formation de vides et déformations induites [6, 118, 146]. Dans le cadre du remplissage du moule, précisement écoulement de la résine, la loi de Darcy est utilisée pour décrire ce phénomène à l'échelle de la pièce, couplée à des équations de conservation de masse, d'énergie et de réaction chimique [34, 118, 146].

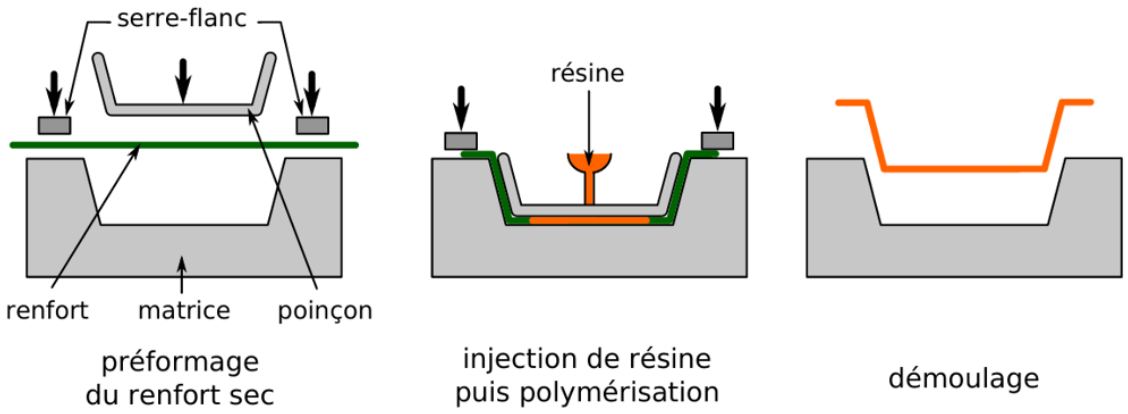


FIGURE 2.1 – Différentes types de fabrication composites par RTM, Figure reproduite depuis [104].

Dans la suite de ce travail, nous présentons en détail la modélisation de l'écoulement de la résine aux différentes échelles caractéristiques de la fabrication des pièces composites.

2.1.1 Écoulement de résine à l'échelle macroscopique : Loi de Darcy

La loi de Darcy est une relation empirique formulée en 1856 par Henry Darcy dans son ouvrage fondateur consacré à la distribution d'eau de la ville de Dijon [40]. Son dispositif expérimental, schématisé sur la figure 2.2, consistait à faire écouler de l'eau à travers une colonne verticale de sable. Il observa que le débit volumique était proportionnel à la section de la colonne ainsi qu'à la différence de pression, tandis qu'il était inversement proportionnel à la hauteur de la charge de sable. Cette observation a permis d'établir la loi de Darcy, qui relie la vitesse macroscopique de filtration, souvent désignée comme vitesse de Darcy, au gradient de pression.

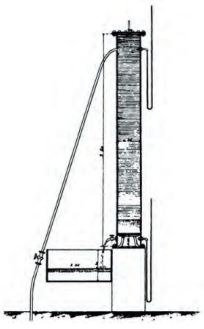


FIGURE 2.2 – Dispositif expérimental utilisé par Darcy pour établir sa loi. Figure reproduite depuis [40].

Pour s'affranchir du caractère unidirectionnel de l'expérience historique et décrire des structures géométriques complexes, la loi de Darcy est aujourd'hui généralisée sous une

forme tensorielle :

$$\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\mu}\,\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\nabla} p, \tag{2.1}$$

où $\boldsymbol{v}$ désigne le vecteur vitesse de filtration, μ la viscosité dynamique du fluide, et $\mathbf{K}$ le tenseur de perméabilité intrinsèque d'ordre $d \times d$ caractérisant la géométrie et l'anisotropie du milieu poreux, sachant que la variable d représente la dimension spatiale du domaine.

Bien qu'initialement établie pour des lits de sable, cette formulation macroscopique s'est imposée comme le pilier de la modélisation des écoulements en milieux poreux. Elle occupe aujourd'hui une place majeure dans l'ingénierie des matériaux composites, notamment pour simuler l'imprégnation des renforts fibreux lors des procédés de moulage [2, 111, 118]. Dans ce contexte, la viscosité du fluide et la perméabilité tensorielle du renfort constituent des paramètres critiques [12, 72]. Toutefois, la validité de la loi de Darcy repose sur l'hypothèse d'un écoulement purement visqueux à faible nombre de Reynolds pour un fluide newtonien, des conditions strictes qui rendent parfois la caractérisation de la perméabilité des renforts fibreux complexe à appréhender.

Pour étendre ce formalisme aux problématiques industrielles d'imprégnation, l'écoulement doit être traité à l'échelle macroscopique, également qualifiée d'échelle de Darcy, en tant que système diphasique composé d'air et de résine. À cette échelle, le suivi du front de résine et la cinétique de remplissage du milieu poreux au cours du temps sont prédits en couplant la loi de Darcy à une équation de transport de l'interface [68, 71, 165]. Selon les choix numériques retenus, ce suivi d'interface est assuré soit par l'équation de transport (2.12) dans le cadre de la méthode *Level-Set*, soit par la relation d'advection (2.10) pour la méthode *Volume of Fluid*, fréquemment désignée par son acronyme VOF.

2.1.2 Écoulement de résine à l'échelle mésoscopique : Notion de double porosité

Dans le procédé RTM, le renfort tissé constitue un milieu poreux à double échelle. À l'échelle des canaux, dont la taille s'étend généralement de 0.1 à 1 mm et qui correspondent aux espaces *inter-torons* figure 2.3, l'écoulement du fluide est dominé par le gradient de pression ainsi que par les forces visqueuses [118, 161]. Comme le montre la figure 2.3, cet écoulement est alors décrit par les équations de Stokes :

$$-\nabla p + \mu\nabla^2\boldsymbol{v} = \mathbf{0} \tag{2.2}$$

où p désigne la pression, $\boldsymbol{v}$ le champ de vitesse et μ la viscosité dynamique du fluide.

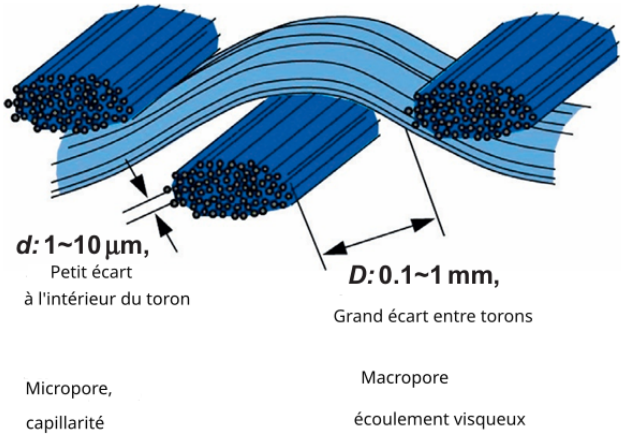


FIGURE 2.3 – Écoulement à l'échelle mésoscopique et longueurs caractéristiques. Image reproduite depuis [118].

Au sein du toron, dont l'espace entre les fibres, qualifié *d'intra-toron*, est de l'ordre de 1 à 10 μm, une équation de type Darcy-Brinkman doit être formulée en fonction de la vitesse interstitielle, $\boldsymbol{v}_f$, pour décrire l'écoulement de la résine, c'est-à-dire :

$$\rho\left(\frac{\partial \boldsymbol{v}_f}{\partial t} + \boldsymbol{v}_f \cdot \nabla \boldsymbol{v}_f\right) = -\nabla p - \frac{\mu}{\mathbf{K}}\boldsymbol{v}_f + \mu_e \nabla^2 \boldsymbol{v}_f \tag{2.3}$$

où μ_e désigne la viscosité effective, définie par la relation $\mu_e = \mu/\Phi_f$ avec Φ_f le taux de porosité du milieu comme en témoigne l'équation (2.5) ci-après.
D'une part, au sein des torons, la norme du tenseur de perméabilité $\mathbf{K}$ est conditionnée par l'espace inter-fibres et varie selon la relation $\mathbf{K} \propto d^2$. À cette échelle, le terme de Brinkman devient négligeable, ce qui permet de ramener le membre de droite de l'équation (2.3) à la formulation classique de la loi de Darcy.

D'autre part, dans les régions inter-torons, la norme de $\mathbf{K}$ varie selon $\mathbf{K} \propto D^2$. Les effets de Brinkman y deviennent alors prépondérants, et le comportement asymptotique tend vers le modèle de Stokes. Il convient également de noter que l'expression du membre de gauche dans l'équation (2.3) relève d'une démarche purement empirique. Il est d'usage de négliger ce terme de transport lorsque l'accélération est minime, d'autant plus qu'un modèle de Stokes est attendu dans l'espace inter-torons [118].

De plus, si la taille des pores est très faible, la pression capillaire peut devenir prépondérante à l'intérieur de ces torons. À l'interface des deux fluides (air et résine), la condition aux limites de capillarité [96] s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{n}_{12}(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2) = 2\sigma_s \kappa \mathbf{n}_{12}, \tag{2.4}$$

où $\mathbf{n}_{12}$ désigne la normale unitaire pointant du fluide 1 vers le fluide 2. Le terme $(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)$ représente la discontinuité des contraintes à travers l'interface, et κ est la courbure moyenne. Le signe de cette dernière doit être en accord avec l'orientation de la normale $\mathbf{n}_{12}$, c'est-à-dire positif si la concavité est dirigée dans le sens de cette normale, et négatif dans le cas contraire.

En outre, par définition, la porosité est le rapport entre le volume de l'espace vide avant imprégnation et le volume total du VER [2, 9, 111]. La figure 2.4 illustre un exemple de VER.

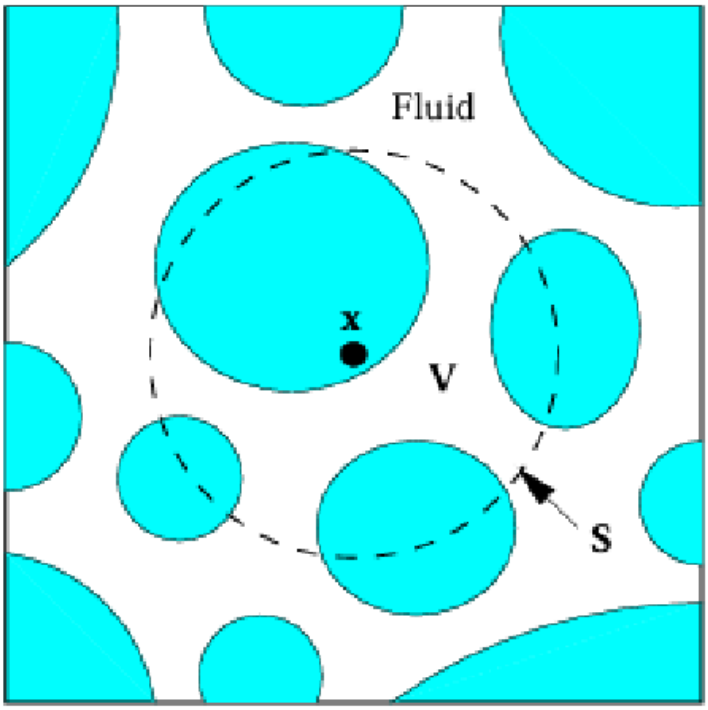


FIGURE 2.4 – Schéma d'un volume de moyenne V et de sa surface S au sein d'un milieu poreux. Figure issue de [111].

La porosité, notée Φ_f, est définie formellement comme le rapport entre le volume de la phase fluide (l'espace vide destiné à être imprégné) et le volume total V du VER :

$$\Phi_f = \frac{V_f}{V}, \tag{2.5}$$

où V_f désigne le volume occupé par le fluide, c'est-à-dire la région où s'effectue l'écoulement. De manière analogue, la fraction volumique de fibres est définie par :

$$\Phi_s = \frac{V_s}{V}, \tag{2.6}$$

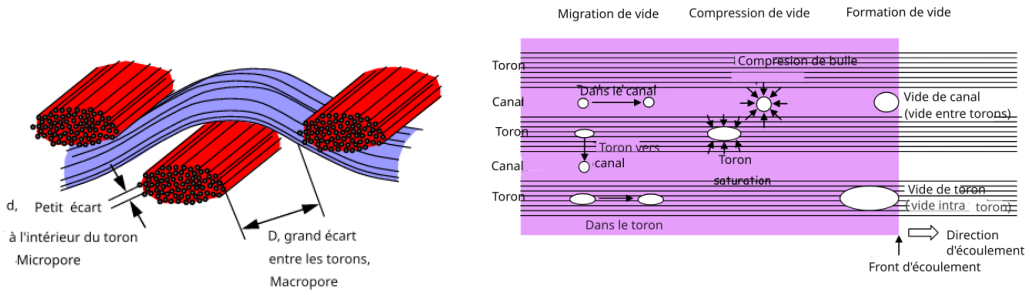
où V_s désigne le volume de la phase solide. Ces deux grandeurs respectent naturellement la relation de fermeture suivante :

$$\Phi_s + \Phi_f = 1. \tag{2.7}$$

Dans le cas des composites à renforts tissés, cette description globale doit être affinée. En effet, plusieurs travaux numériques [9, 55, 118] portant sur la simulation de l'écoulement de la résine ont mis en évidence l'existence de ces deux échelles géométriques distinctes au sein de ces milieux, qualifiés de renforts textiles à double porosité : l'échelle *inter-torons*, et l'échelle *intra-toron* (figure 2.5(a)). Cette double échelle structurelle influence directement la dynamique d'imprégnation de la résine lors de la fabrication de

structures composites de grandes dimensions de l'ordre de 10^{-2} à 10^{1} m. Un déséquilibre de vitesse d'écoulement entre ces deux échelles peut entraîner le piégeage d'air et la formation de zones sèches non imprégnées [2, 9, 55, 118, 119].

Plus précisément, C.H. Park et W.I. Lee [119] ont étudié les mécanismes de formation, de compression et de transport de ces défauts en fonction de la vitesse du front de fluide. Ils distinguent ainsi les *micro-porosités*, qui correspondent aux bulles d'air piégées au sein des torons lors de vitesses d'imprégnation élevées, des *macro-porosités*, définies comme les espaces vides formés entre les torons à des vitesses plus faibles. Cette distinction fondamentale ainsi que l'influence cinétique associée sont illustrées sur la figure 2.5. Néanmoins, leur modèle ne prend en compte que des mécanismes de porosité spécifiques à l'échelle des pores et propres aux conditions LCM (Liquid Composite Molding).



(a) (b)

FIGURE 2.5 – Longueurs caractéristiques et mécanismes de formation des zones sèches dans le procédé RTM : (a) longueurs caractéristiques et espaces d'écoulement à l'intérieur du toron ; (b) migration, compression et formation des bulles. Figures reproduites depuis [119].

Les zones sèches constituent des défauts critiques [1, 19] dans la fabrication des pièces composites par injection, car elles altèrent les propriétés mécaniques, la durabilité et la résistance à la fatigue de la structure finale [1]. Certes, les macro-porosités peuvent être comprimées par la pression hydrostatique provenant de la région saturée environnante [63] et transportées lors de l'imprégnation. En revanche, les micro-porosités restent piégées au sein des torons fibreux, ce qui les rend beaucoup plus difficiles, voire impossibles, à éliminer. Leur formation et leur taille sont gouvernées par la compétition entre les forces visqueuses et capillaires, un phénomène au sein duquel le nombre capillaire joue un rôle clé [119, 170].

Pour illustrer que les porosités ne sont pas repartir uniformement lors de la fabrication de la pièce composite, contrairement aux prédictions basées sur la théorie du nombre capillaire, Aaboud *et al.* [2] ont proposé une approche géométrique multi-échelle pour prédire cette repartition des porosités lors du procédé RTM. Cela a été réalisé à partir d'un modèle de pores idéalisés (double échelle), qui ne capte pas toute l'hétérogénéité réelle des renforts industriels [2] et n'est pas basé sur l'homogénéisation.

La compétition entre les forces visqueuses et capillaires au sein du toron mène à l'étude des écoulements à l'échelle des fibres. La sous-section suivante présente ainsi les équations régissant ces écoulements, en intégrant explicitement les effets capillaires et l'influence de

l'angle de contact.

2.1.3 Écoulement de la résine à l'échelle microscopique

À l'échelle des fibres de l'ordre de 10 μm, la faible dimension des pores implique des nombres de Reynolds très faible. En négligeant ainsi les effets inertiels à cette échelle, ainsi que les forces de volume telles que la gravité, l'écoulement microscopique de la résine est peut être décrit par les équations de Stokes. De plus, à cette échelle locale, les phénomènes capillaires deviennent prépondérants, ce qui impose une prise en compte explicite de la tension de surface à l'interface résine–air. Ainsi, en définissant Ω comme le domaine d'écoulement occupé par la résine, le système de Stokes enrichi par les effets de tension de surface s'écrit :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{v}, p) + \boldsymbol{f}_s = \boldsymbol{0}, & \boldsymbol{x} \in \Omega, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega, \end{cases} \tag{2.8}$$

où $\boldsymbol{v}$ désigne le champ de vitesse, p le champ de pression, et $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy défini par :

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{v}, p) = \mu_i \left(\nabla \boldsymbol{v} + \nabla^T \boldsymbol{v} \right) - p\boldsymbol{I}, \tag{2.9}$$

avec $\boldsymbol{I}$ la matrice identité et μ_i la viscosité de la phase i, pour $i = 1, 2$. Le terme $\boldsymbol{f}_s$ dans l'équation (2.8) représente la force de tension superficielle agissant à l'interface pour équilibrer la discontinuité de pression de part et d'autre de celle-ci. Ce terme sera détaillé par la suite.

Pour fermer le problème d'écoulement diphasique à l'échelle microscopique, le système d'équations (2.8) doit être couplé à une équation de transport décrivant l'évolution temporelle de l'interface séparant les deux phases fluides.

Selon la méthode numérique de suivi d'interface choisie, cette relation s'écrit sous la forme de l'équation de transport associée à la méthode Volume of Fluid (VOF), donnée par la relation (2.10), ou sous la forme de l'équation de transport de la fonction Level-Set, donnée par l'équation (2.12). Les principes et spécificités de chacune de ces méthodes seront détaillés dans la sous-section suivante.

2.1.4 Méthode de suivi d'interface

Dans le cadre des simulations numériques d'écoulements diphasiques, plusieurs méthodes permettent de suivre l'évolution de l'interface entre les phases. Parmi celles-ci, on distingue notamment la méthode *Volume of Fluid* (VOF) et la méthode *Level-Set*. Les sous-sections suivantes présentent brièvement les principes de ces deux méthodes.

2.1.4.1 La méthode *Volume of Fluid*

La méthode *Volume of Fluid* (VOF) constitue l'une des approches numériques les plus utilisées pour la simulation d'écoulements multiphasiques, notamment pour le suivi

et la localisation de l'interface entre deux fluides non miscibles. Elle repose sur l'introduction d'un champ scalaire, appelé *fraction volumique*, représentant la proportion du fluide suivi dans chaque volume de contrôle. Cette quantité permet de décrire la distribution des phases tout en assurant la conservation de la masse [61, 65, 108, 172]. Le champ représentatif, noté $\gamma(\boldsymbol{x}, t)$, varie entre 0 et 1 selon la fraction de fluide contenue dans une cellule. Il est illustré sur la figure 2.6.

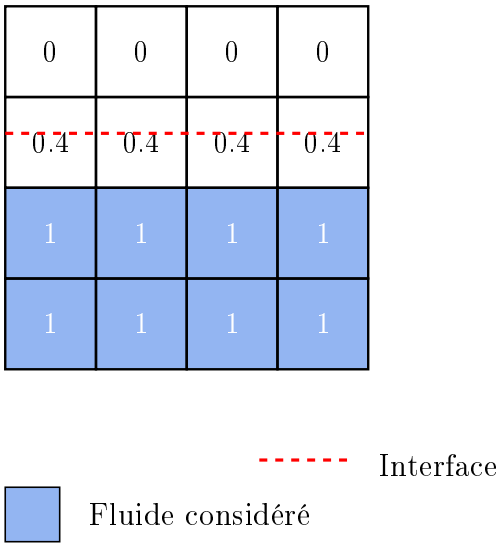


FIGURE 2.6 – Illustration du champ de fraction volumique γ utilisé dans la méthode VOF.

Selon la répartition des phases, γ prend les valeurs suivantes :

$$\gamma = \begin{cases} 1, & \text{si le volume de contrôle est entièrement rempli par la phase 1,} \\ 0, & \text{si le volume de contrôle est entièrement rempli par la phase 2,} \\ 0 < \gamma < 1, & \text{si le volume de contrôle contient les deux phases.} \end{cases}$$

Ainsi, les cellules pour lesquelles $0 < \gamma < 1$ indiquent la présence de l'interface, sans pour autant en préciser la position exacte. Le transport de la fraction volumique est gouverné par l'équation d'advection sous sa forme conservative :

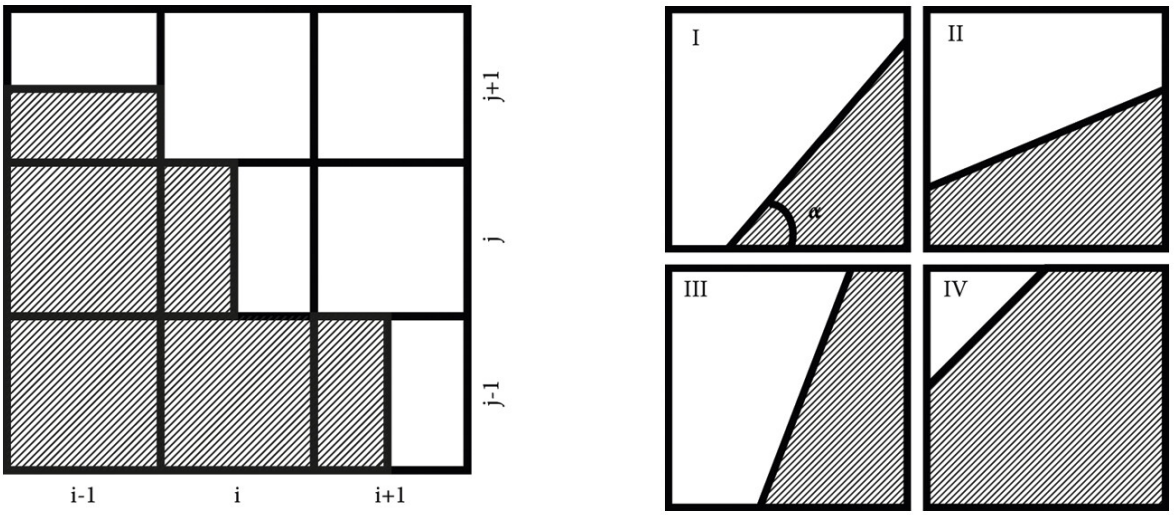
$$\frac{\partial \gamma(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{v}\gamma(\boldsymbol{x}, t)) = 0, \tag{2.10}$$

où $\boldsymbol{v}$ désigne le champ de vitesse du fluide. Cette équation est résolue de manière conservative.

Cependant, la difficulté majeure de la méthode VOF réside dans la reconstruction géométrique de l'interface à partir du champ γ, puisque cette dernière est représentée de manière implicite. Différents algorithmes ont donc été développés pour estimer la forme de l'interface ; les plus utilisés sont les suivants :

- La méthode SLIC (*Simple Line Interface Calculation*) : elle reconstruit l'interface à l'aide de segments horizontaux ou verticaux alignés sur le maillage (figure 2.7a). Cette approche est simple à mettre en œuvre mais tend à générer des interfaces grossières.

- La méthode PLIC (*Piecewise Linear Interface Calculation*) : elle repose sur une approximation linéaire locale de l'interface, calculée à partir du gradient de $\gamma(\boldsymbol{x}, t)$, permettant d'obtenir des interfaces obliques et plus précises (figure 2.7b).



(a) (b)

FIGURE 2.7 – Approches SLIC et PLIC pour la reconstruction d'une interface. (a) reconstruction de l'interface par la méthode SLIC et (b) reconstruction de l'interface par la méthode PLIC [172].

Les deux méthodes assurent la reconstruction de l'interface à partir du champ de fraction volumique, mais présentent des compromis différents. En effet, la méthode SLIC, bien que simple et robuste pour des géométries régulières, offre une précision limitée dans la représentation de la courbure et des discontinuités [172]. Dans un procédé d'imprégnation où le front de résine progresse souvent obliquement par rapport aux mailles du maillage, comme autour des mèches de fibres, la méthode SLIC introduit un effet de marches d'escalier qui altère la courbure réelle du ménisque et introduit une diffusion numérique artificielle du front [113].

En revanche, la technique PLIC offre une représentation précise et géométriquement cohérente des interfaces complexes, même si elle entraîne des coûts d'implémentation plus élevés. Toutefois, la reconstruction par morceaux propre à la méthode PLIC ne garantit pas la convergence de la courbure de l'interface avec le raffinement du maillage, ce qui nuit directement au calcul de la pression capillaire au niveau du ménisque [66].

Ainsi, en dépit de sa robustesse numérique globale et de sa capacité à garantir la conservation de la masse, la méthode VOF présente une difficulté majeure lors de la reconstruction d'interfaces dans des géométries tridimensionnelles complexes, où le calcul du vecteur normal et de la courbure devient particulièrement délicat [50, 172].

2.1.4.2 La méthode *Level-Set*

La méthode *Level-Set* a été introduite par Osher et Sethian en 1988 [115]. Elle permet de modéliser l'évolution d'interfaces dans des domaines variés tels que la science des

matériaux ou la mécanique des fluides, notamment lorsqu'il existe d'importantes variations morphologiques de la surface de séparation [80, 115]. Dans le cadre de l'étude des écoulements diphasiques, le domaine global Ω est divisé en deux sous-domaines, Ω_1 et Ω_2, respectivement occupés par la phase 1 et la phase 2, tels que :

$$\Omega_1 \cup \Omega_2 = \Omega \quad \text{et} \quad \Omega_1 \cap \Omega_2 = \Gamma_{1,2}.$$

Cette représentation est illustrée sur la figure 2.8. Les sous-domaines ainsi que l'interface évoluent au cours du temps, c'est-à-dire que $\Omega_1 = \Omega_1(t)$, $\Omega_2 = \Omega_2(t)$ et $\Gamma_{1,2} = \Gamma_{1,2}(t)$.

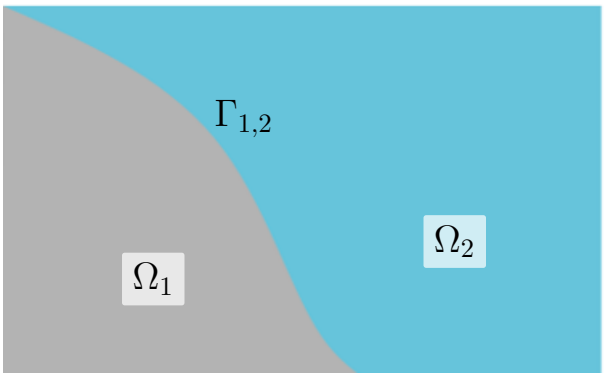


FIGURE 2.8 – Illustration de la position de l'interface entre les deux phases Ω_1 et Ω_2, séparées par une interface. Figure adaptée de [175].

Le principe repose sur une représentation implicite de l'interface par une fonction scalaire ϕ, appelée fonction Level-Set. Cette fonction est définie dans tout le domaine à partir de la distance signée à l'interface $\Gamma_{1,2}$. L'isovaleur $\phi = 0$ correspond exactement à la position de l'interface. Par convention, la phase 1 est caractérisée par une valeur positive de ϕ, tandis que la phase 2 correspond à une valeur négative, selon la relation suivante :

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} +\mathrm{d}(\boldsymbol{x}, \Gamma_{1,2}(t)), & \boldsymbol{x} \in \Omega_1(t), \\ -\mathrm{d}(\boldsymbol{x}, \Gamma_{1,2}(t)), & \boldsymbol{x} \in \Omega_2(t), \\ 0, & \boldsymbol{x} \in \Gamma_{1,2}(t), \end{cases} \tag{2.11}$$

où $\boldsymbol{x}$ désigne les coordonnées des nœuds du maillage. L'évolution de l'interface dans le temps et dans l'espace, pour un écoulement diphasique de fluides incompressibles, est modélisée par l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\boldsymbol{x}, t) + \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \nabla \phi(\boldsymbol{x}, t) = 0 \tag{2.12}$$

où $\boldsymbol{v}$ désigne le vecteur vitesse obtenu par la résolution des équations de Stokes.

2.1.4.2.1 Propriétés de la fonction Level-set

L'intérêt majeur de la méthode Level-Set réside dans sa capacité à fournir une description précise de la morphologie complexe de l'interface en 2D ou 3D, notamment en ce qui concerne la normale et la courbure [3, 28, 107, 141, 162] , données par :

$$\boldsymbol{n}_s = \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \quad \text{et} \quad \kappa_s = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \right) \tag{2.13}$$

Dans la zone de transition entre les deux phases immiscibles, localisée sur une faible épaisseur, les propriétés physiques subissent des variations abruptes. Plus précisément, la variation de la viscosité dans cette région est modélisée à l'aide de la fonction distance signée et d'une fonction de Heaviside régularisée H_ε, qui permet d'assurer un lissage continu [107, 115, 141] :

$$\mu(\boldsymbol{x},t) = H_\varepsilon(\phi(\boldsymbol{x},t))\mu_1 + (1 - H_\varepsilon(\phi(\boldsymbol{x},t)))\,\mu_2 \tag{2.14}$$

où μ_1 et μ_2 sont les viscosités respectives des deux phases.

La fonction de Heaviside régularisée H_ε est définie par :

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi > \varepsilon, \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\phi}{\varepsilon} + \dfrac{1}{\pi}\sin\left(\dfrac{\pi\phi}{\varepsilon}\right)\right) & \text{si } |\phi| \leq \varepsilon, \\ 0 & \text{si } \phi < -\varepsilon. \end{cases} \tag{2.15}$$

L'épaisseur ε est définie par la relation :

$$\varepsilon = n \cdot h \tag{2.16}$$

où h représente la taille d'un élément fini issu de la discrétisation du domaine et n le nombre d'éléments définissant l'épaisseur.

La figure 2.9 illustre la différence entre une fonction de Heaviside régularisée et une fonction non régularisée, pour deux épaisseurs différentes.

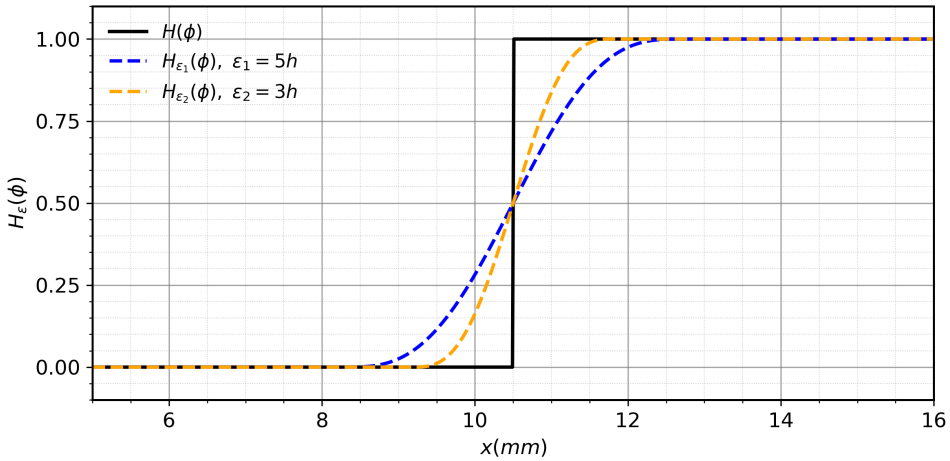


FIGURE 2.9 – Fonction Heaviside en fonction de $\boldsymbol{x}$ (mm).

La fonction de Dirac régularisée, notée δ_ε, est définie par la relation suivante :

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{si } |\phi| > \varepsilon, \\ \dfrac{1}{2\varepsilon}\left(1 + \cos\left(\dfrac{\pi\phi}{\varepsilon}\right)\right), & \text{si } |\phi| \leq \varepsilon. \end{cases} \tag{2.17}$$

La problématique le plus souvent mentionnée de la méthode *Level-Set* est sa tendance intrinsèque à perdre de la masse. Même lorsque la réinitialisation (détaillée plus tard

dans la sous-sous-section 2.1.4.4) est réalisée sans altération de la ligne de niveau zéro, l'emploi de fonctions lissées à l'aide de la formulation standard — telles que les fonctions de Heaviside et de Dirac — engendre une transgression du principe de conservation de la masse. Ainsi, ce problème n'est pas seulement lié à la qualité numérique de la réinitialisation, mais aussi à la définition même de la méthode. Dans le cadre de l'imprégnation de composites, cela se traduit par des inexactitudes dans l'estimation du taux et du temps de remplissage, des paramètres qui sont pourtant essentiels pour le calcul des procédés RTM [76, 148].

Compte tenu des avantages de la méthode Level-Set par rapport au suivi morphologique de l'interface, ainsi que des travaux existants au sein du laboratoire CERI Matériaux et Procédés (CERI MP) [137, 141], cette approche a été retenue pour cette étude. La sous-section suivante présente ainsi le phénomène capillaire à l'aide de cette méthode.

2.1.4.2.2 Force de tension de surface

Dans le cadre des procédés d'imprégnation, la pression capillaire, issue de la tension de surface est identifiée comme un facteur clé dans la formation et le transport des vides, ainsi que dans la saturation des mèches [43, 119]. Cette tension de surface n'est généralement pas modélisée de manière isolée, mais plutôt appréhendée à travers des termes de forces de surface introduits à différentes échelles : l'échelle locale de la fibre, l'échelle intermédiaire du toron et l'échelle globale du textile [118]. Afin d'alimenter et de valider ces modèles, des caractérisations expérimentales, telles que la capillarimétrie ou la mesure de l'angle de contact, permettent de quantifier précisément la cinétique de saturation et les conditions d'apparition des zones sèches [79].

Pour intégrer numériquement ces phénomènes locaux au sein des modèles d'écoulement, la méthode *Level-Set* présente l'avantage de permettre le calcul direct de cette force de tension de surface à l'interface entre les deux phases. Introduite sous forme d'un terme source volumique, elle permet d'équilibrer la discontinuité de pression de part et d'autre de l'interface [28, 30, 139, 141] selon la relation suivante :

$$\boldsymbol{f}_s(\phi) = \sigma_s \, \kappa_s(\phi) \, \nabla H_\varepsilon(\phi) \,, \tag{2.18}$$

où σ_s désigne le coefficient de tension superficielle, κ_s la courbure moyenne de l'interface, et ∇H_ε le gradient de la fonction de Heaviside régularisée. Bien que cette formulation joue un rôle central dans la prédiction de la pénétration de la résine au cœur des torons, les effets capillaires sont longtemps restés négligés en procédé d'imprégnation car jugés faibles devant la pression d'injection, alors qu'ils contrôlent pourtant la formation et le transport de vides à double échelle [106]

En revanche, la pression capillaire n'est pas seulement issue de la tension de surface seule, mais également de la condition de mouillabilité des fibres [43]. Pour cette raison, la partie suivante présente en détail la modélisation de l'angle de contact, qui est un paramètre clé pour caractériser la mouillabilité.

2.1.4.3 Angle de contact

En physique de la mouillabilité, l'angle de contact constitue un paramètre clé permettant de caractériser l'état de mouillabilité d'un liquide au contact d'un solide [25, 47, 91, 150, 174]. Cet angle peut être relié aux énergies interfaciales grâce à l'équation de Young, qui exprime l'équilibre des tensions de surface au niveau de la ligne triple (solide–liquide–gaz) :

$$\sigma_{sg} = \sigma_{sl} + \sigma_s \cos\theta, \tag{2.19}$$

où σ_{sg}, σ_{sl} et σ_s désignent respectivement les tensions surface solide–gaz, solide–liquide et liquide–gaz, tandis que θ représente l'angle de contact. La figure 2.10 illustre les différentes possibilités d'angle de contact selon l'affinité du fluide avec le solide.

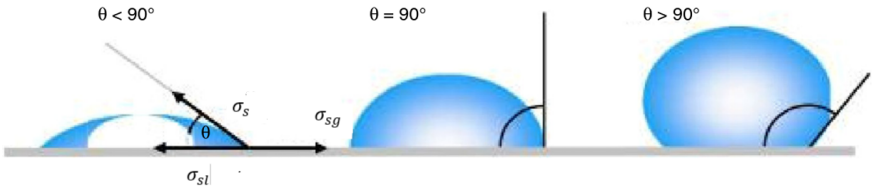


FIGURE 2.10 – Illustration de l'angle de contact formé entre une interface liquide/gaz et un solide à surface lisse [47].

Dans le cas des écoulements diphasiques, on distingue l'angle de contact statique, issu de l'équilibre thermodynamique, de l'angle de contact dynamique qui intervient lors du mouvement de l'interface fluide–fluide au voisinage de la paroi solide. La description de cette ligne de contact dynamique constitue un enjeu majeur pour la modélisation des écoulements en milieux poreux.

Plusieurs méthodes numériques ont été développées pour simuler la dynamique de la ligne de contact dans les écoulements multiphasiques, comme l'illustre la figure 2.11. Parmi elles, la méthode *Level-Set* s'intègre particulièrement bien dans le cadre de cette thèse, puisqu'elle permet de représenter l'interface entre les deux fluides de manière implicite.

Dans ce formalisme, l'angle de contact dynamique émerge naturellement au niveau de la paroi solide. Une approche récente supprime la singularité de la ligne de contact en introduisant des conditions de glissement associées à deux coefficients de friction. L'angle de contact dynamique est alors résolu directement par la solution numérique, sans être imposé géométriquement. Cette méthode permet en outre de traiter l'hystérésis de l'angle de contact de façon efficace et indépendante du maillage [174]. Cela est traduit par la relation (2.20) :

$$\eta(\phi)\boldsymbol{v}_s = -\left[\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau} + \sigma_s\,\delta\left(\cos\theta_S - \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\cdot\mathbf{n}\right)\nabla\phi\right]\cdot\mathbf{N}(\mathbf{n}), \tag{2.20}$$

où ϕ représente la fonction de distance signée associée à la méthode *Level-Set*, $\boldsymbol{v}_s = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}_w$ désigne la vitesse de glissement, $\boldsymbol{v}$ la vitesse du fluide newtonien, $\boldsymbol{v}_w$ la vitesse de la paroi solide, θ_S l'angle de contact statique, et $\boldsymbol{\tau}$ représente le tenseur des contraintes visqueuses défini par :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu\left[\nabla\boldsymbol{v} + (\nabla\boldsymbol{v})^{\mathrm{T}}\right]. \tag{2.21}$$

Par ailleurs, le tenseur de projection $\mathbf{N}(\mathbf{n})$ sur l'interface solide-fluide, introduit dans la relation (2.20), est défini par :

$$\mathbf{N}(\mathbf{n}) = I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \tag{2.22}$$

et $\eta(\phi)$ le coeficient de friction défini par :

$$\eta(\phi) = \eta_N + \eta_{CL}\, \delta\, |\nabla\phi \cdot \boldsymbol{N}(\mathbf{n})|, \tag{2.23}$$

avec η_N le coefficient de friction entre le fluide Newtonien et le solide et η_{CL} le coefficient de friction sur la ligne de contact.

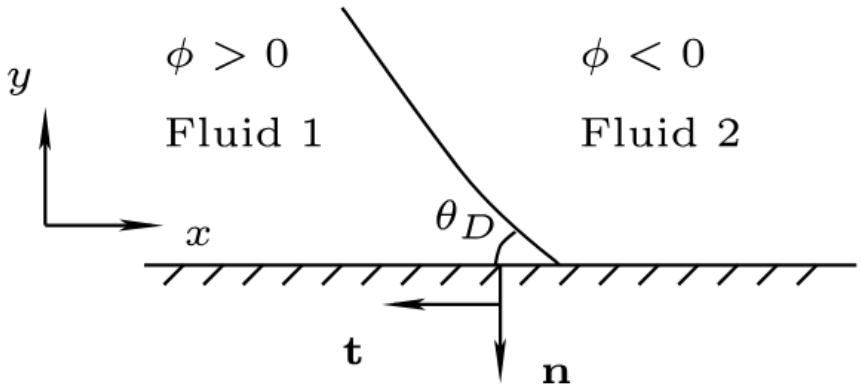


FIGURE 2.11 – Illustration de l'angle de contact dynamique formé entre deux phases fluides et un solide [174].

En effet, au lieu de considérer une condition de non-glissement sur la surface des fibres, il est possible d'adopter une condition de glissement de type Navier. Dans ce cas, l'épaisseur de lissage ε des propriétés physiques tend vers zéro, et la relation (2.20) s'écrit sous la forme :

$$\eta_N\, \boldsymbol{v}_s = -(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{n}). \tag{2.24}$$

Au sein des phases ($\phi \neq 0$), on obtient :

$$\eta_{CL}\, \boldsymbol{v}_s = -\sigma_s\, (\cos\theta_S - \cos\theta_D)\, \frac{\nabla\phi \cdot \mathbf{N}(\mathbf{n})}{|\nabla\phi \cdot \mathbf{N}(\mathbf{n})|} \tag{2.25}$$

avec θ_D l'angle de contact dynamique défini géométriquement par :

$$\cos\theta_D = \mathbf{n}_\phi \cdot \mathbf{n} = \frac{\nabla\phi \cdot \mathbf{n}}{|\nabla\phi|}. \tag{2.26}$$

Dans le cas d'un écoulement bidimensionnel (2D), l'expression générale (2.20) se simplifie sous forme scalaire. Néanmoins, l'analogie usuelle avec le profil de vitesse linéaire n'est rigoureusement valable que sous l'hypothèse où la normale à l'interface $\mathbf{n}$ et le vecteur

unitaire de l'axe vertical $\mathbf{e}_y$ sont colinéaires. En définissant le vecteur tangent $\mathbf{t}$ de telle sorte que le repère local $(\mathbf{t}, \mathbf{n})$ soit direct, la condition de Navier s'écrit alors :

$$\eta_N \, \boldsymbol{v}_s = (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{t} = \mu \, \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial y} \tag{2.27}$$

où $\mathbf{t}$ désigne le vecteur unitaire tangent à la surface des fibres, $\boldsymbol{v}_s$ la vitesse scalaire de glissement et $\boldsymbol{u}$ la composante tangentielle de la vitesse du fluide.

En outre, d'autres travaux de la littérature étendent la méthode *Level-Set* à la simulation de lignes de contact mobiles multiples, en intégrant de façon couplée les effets d'inertie, de glissement et d'hystérésis. Ces approches numériques démontrent une excellente concordance avec les modèles asymptotiques de lubrification [25, 150].

2.1.4.4 Réinitialisation de la fonction Level-Set

La résolution de l'équation (2.12) ne permet pas de préserver la propriété de distance signée de la fonction *Level-Set* au cours du transport et de la déformation de l'interface [120]. Pour y remédier, il est nécessaire d'employer une méthode de réinitialisation de cette fonction à chaque pas de temps, au vu de la représentation implicite de l'interface.

Plusieurs stratégies de réinitialisation ont été proposées dans la littérature. La méthode la plus classique consiste à résoudre une équation de type Hamilton–Jacobi, bien qu'elle puisse introduire des erreurs numériques et soulever des difficultés quant à sa stratégie d'application [89, 120]. D'autres approches alternatives ont également été développées, telles que la méthode de *Fast-Marching* [120, 136], la formulation variationnelle intégrant un terme de régularisation de la distance [88], ou encore la méthode de réinitialisation géométrique directe [102].

Pour ce faire, nous nous basons sur les travaux existants au sein du laboratoire CERI MP, notamment la méthode de réinitialisation géométrique directe de Shakoor *et al.* [144]. Cette option permet non seulement de tirer parti de l'expertise numérique du laboratoire CERI MP, en poursuivant directement les développements antérieurs, mais elle s'appuie également sur la solidité éprouvée de cette méthode pour assurer la conservation de la masse au niveau de l'interface. Cette dernière consiste à reconstruire la distance signée à chaque pas de temps en identifiant explicitement le point le plus proche de l'interface, préservant ainsi rigoureusement les propriétés de la fonction. La figure 2.12 illustre cette technique de reconstruction de la fonction distance signée :

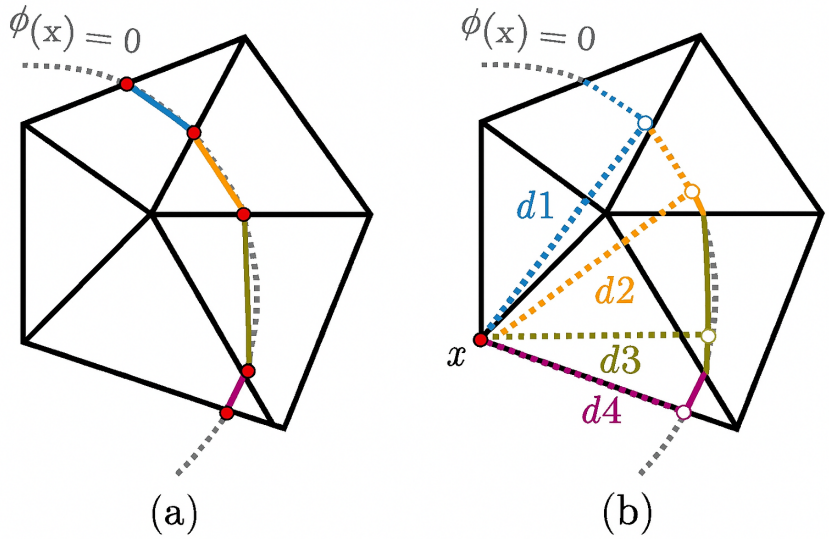


FIGURE 2.12 – Réinitialisation géométrique sur un maillage avec interpolation P1 : (a) collection et (b) calcul de distance. Images reproduites depuis [144]

Les détails relatifs aux différentes techniques de réinitialisation sont présentés dans l'article de revue proposé par Shakoor [139].

Après la présentation des différents phénomènes intervenant lors de l'écoulement diphasique en présence de fibres, ainsi que des modèles représentatifs correspondants, nous présentons dans la section suivante les principales méthodes numériques permettant de discrétiser ces modèles dans la littérature.

2.2 Méthodes numériques

Les méthodes numériques sont des approches utilisées pour résoudre les équations aux dérivées partielles noté EDP, telles que celles qui décrivent les écoulements de fluides. Dans les sous-sections suivantes, chaque méthode numérique (méthode des différences finies, méthode des volumes finis et méthode des éléments finis) sera brièvement décrite, afin de rappeler ses principes de base et ses spécificités d'utilisation. Ensuite, des détails seront fournis sur l'approche éléments finis et level-set développée précédemment au CERI MP.

2.2.1 Méthode des différences finies

La méthode des différences finies (MDF) constitue l'une des approches les plus classiques pour la discrétisation des EDP. Son principe repose sur le remplacement des dérivées continues de la fonction inconnue $T(x)$ par des expressions approchées à l'aide de différences finies. Cette méthode est reconnue pour sa simplicité de mise en œuvre.

Afin d'illustrer le principe de la méthode MDF, considérons un milieu continu noté Ω, représentant un matériau ou une structure au sein duquel se produit un phénomène de diffusion thermique, décrit par le champ de température T. Dans ce cadre, l'évolution du champ thermique est gouvernée par l'équation de la chaleur en régime stationnaire,

en l'absence de terme source, qui constitue l'équation de référence pour la modélisation de la diffusion de la chaleur :

$$D\,\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0, \tag{2.28}$$

où D désigne le coefficient de diffusion thermique et T la température, inconnue du problème. On suppose que le domaine est discrétisé à l'aide d'un maillage régulier, comme illustré sur la figure 2.13. La dérivée première de la fonction $T(x)$ au point x_i

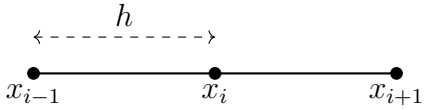


FIGURE 2.13 – Maillage unidimensionnel régulier de pas h.

peut être approchée à partir de son développement en série de Taylor :

$$T_{i+1} = T_i + h\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(h^3). \tag{2.29}$$

En isolant la dérivée première dans l'expression (2.29), on obtient :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i = \frac{T_{i+1} - T_i}{h} - \frac{h}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + \underbrace{\mathcal{O}(h^2)}_{\text{erreur de troncature}}. \tag{2.30}$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur, on obtient l'approximation :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i \simeq \frac{T_{i+1} - T_i}{h}, \tag{2.31}$$

qui correspond à un **schéma décentré en aval** d'ordre un. Pour obtenir un schéma d'ordre deux, on considère le développement de Taylor des points T_{i+1} et T_{i-1} autour de x_i :

$$T_{i+1} = T_i + h\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i + \frac{h^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_i + \mathcal{O}(h^4), \tag{2.32}$$

$$T_{i-1} = T_i - h\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i - \frac{h^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_i + \mathcal{O}(h^4). \tag{2.33}$$

En soustrayant les équations (2.33) et (2.32), il vient :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}\left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_i + \underbrace{\mathcal{O}(h^3)}_{\text{erreur de troncature}}. \tag{2.34}$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur, on obtient le **schéma centré d'ordre deux** :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i \simeq \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2h}. \tag{2.35}$$

De manière analogue, la dérivée seconde peut être obtenue en additionnant les équations (2.32) et (2.33) :

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2), \tag{2.36}$$

soit, à l'ordre deux :

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i \simeq \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2}. \tag{2.37}$$

En remplaçant l'expression (2.37) dans l'équation continue (2.28), on obtient la **forme discrète de l'équation de la chaleur**, directement exploitable pour une résolution numérique.

Ce principe peut naturellement être étendu aux dimensions supérieures (2D ou 3D), en appliquant la même logique de discrétisation sur un maillage régulier. Cependant, la méthode des différences finies présente une limitation majeure : elle est adaptée uniquement aux **maillages structurés**, ce qui la rend peu appropriée pour les géométries complexes, telles que les écoulements dans des milieux poreux ou des moules contenant des fibres cylindriques.

Néanmoins, la méthode des différences finies, lorsqu'elle est appliquée à des maillages conformes aux frontières, est largement utilisée dans le domaine des composites pour prédire la vitesse d'écoulement de la résine, la distribution du champ de pression et le temps de remplissage en RTM [54, 158, 167]. Toutefois, la résolution numérique de l'équation de level-set pour le suivi du front requiert des techniques numériques avancées. En effet, les schémas aux différences finies se révèlent insuffisants pour garantir la stabilité et la précision de la solution [118]. De plus, cette approche induit un coût de calcul supplémentaire non négligeable. Ces limitations ont conduit la communauté scientifique à s'orienter vers d'autres approches, notamment les formulations par éléments finis ou par volumes finis [134].

2.2.2 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis (MVF) est une approche numérique apparue dans les années 1980 afin de compléter la méthode des différences finies pour la résolution de problèmes présentant des géométries complexes. Elle est largement utilisée pour simuler l'écoulement de la résine lors des procédés d'injection dans les matériaux composites. Parmi les grandeurs clés que cette méthode permet de prédire figurent le front d'avancement de la résine, la répartition de la pression et l'évolution de la porosité, en tenant compte de la mèche et de la résine [8, 147, 171]. Elle permet également de simuler le temps de remplissage et d'optimiser l'imprégnation du renfort [45, 99]. Ces capacités ont constitué une avancée majeure dans la simulation numérique des écoulements en mécanique des fluides. Comme toute méthode numérique, la MVF consiste à discrétiser les EDP pour obtenir un système d'équations algébriques à résoudre. Cependant, sa particularité réside dans la manière dont cette discrétisation est réalisée, suivant deux étapes principales [101].

2.2.2.1 Intégration sur le volume de contrôle

Cette opération transforme les intégrales de volume et de surface en relations algébriques discrètes, définies sur chaque volume de contrôle et ses frontières, à l'aide d'une quadrature d'intégration d'un ordre de précision donné. On obtient ainsi un système d'équations semi-discrétisées.

2.2.2.2 Approximation spatiale

Elle consiste à introduire des fonctions d'interpolation pour approximer la variation spatiale des inconnues à l'intérieur de chaque volume de contrôle. Ces fonctions relient les valeurs aux centres de surface aux valeurs au centre des volumes de contrôle, permettant de transformer les équations de bilan en un système d'équations algébriques finales.

Pour illustrer le principe de la méthode, considérons un problème stationnaire de convection-diffusion sans terme source :

$$\nabla \cdot (D\,\nabla T) = 0 \tag{2.38}$$

où T désigne la température et D le coefficient de diffusion.
En intégrant l'équation (2.38) sur un volume de contrôle V, on obtient :

$$\int_V \nabla \cdot (D\,\nabla T)\ \mathrm{d}V = 0. \tag{2.39}$$

L'application du théorème de la divergence conduit à une intégrale surfacique :

$$\int_{\partial V} (D\,\nabla T) \cdot \mathbf{n}\,\mathrm{d}S = 0. \tag{2.40}$$

où ∂V désigne la frontière du volume de contrôle et $\mathbf{n}$ le vecteur normal sortant. En remplaçant l'intégrale surfacique par la somme des flux diffusifs traversant les faces du volume de contrôle, l'application du théorème de la divergence à la relation (2.40) conduit à l'écriture discrète suivante :

$$\sum_{f \in \text{faces}(V)} \Big[(D\,\nabla T)_f\Big] \cdot \mathbf{S}_f = 0, \tag{2.41}$$

où $\mathbf{S}_f$ désigne le vecteur surface associé à la face f du volume de contrôle.
Les centres des faces du volume de contrôle considéré sont notés f_w, f_e, f_n et f_s, correspondant respectivement aux faces ouest, est, nord et sud, comme illustré sur la figure 2.14. En particulier, le flux diffusif évalué au centre de la face est f_e dépend des valeurs de la variable scalaire T dans les volumes de contrôle adjacents V et P.

Le vecteur surface normal à la face est f_e est défini [101] par :

$$\mathbf{S}_e = (\Delta y)_e\, \boldsymbol{i}, \tag{2.42}$$

tandis que celui associé à la face ouest f_w s'écrit :

$$\mathbf{S}_w = -(\Delta y)_w\, \boldsymbol{i}. \tag{2.43}$$

En tenant compte de l'orientation des normales aux faces et en supposant une section constante dans le cadre d'un maillage régulier unidimensionnel, l'équation de conservation discrète (2.41) se réduit à l'équilibre des flux diffusifs aux faces est et ouest :

$$\left[\left(D\,\frac{\partial T}{\partial x}\right)_e\right] - \left[\left(D\,\frac{\partial T}{\partial x}\right)_w\right] = 0. \tag{2.44}$$

À ce stade, la suite sera de déterminer les valeurs de T_e et T_w à partir des centres des volumes de contrôle adjacents. Pour ce faire, considérons le maillage régulier illustré à la figure figure 2.14.

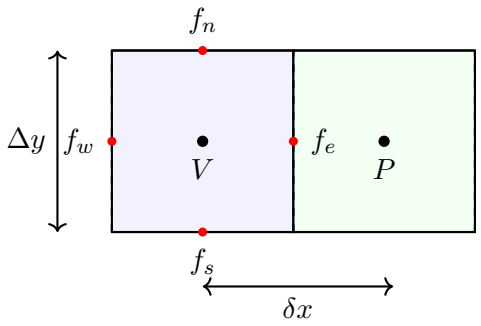


FIGURE 2.14 – Maillage régulier constitué de deux volumes de contrôle carrés adjacents.

On interpole alors la grandeur T à cette face à partir de ses valeurs dans les centres V et P. Selon la figure 2.14, l'interpolation du gradient de la température au centre f_e dans la direction x est donné par :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_e = \frac{T_P - T_V}{(\delta x)_e} \tag{2.45}$$

où $(\delta x)_e$ désigne la distance entre le centre V et P des volumes de contrôle. Par analogie, la même procédure appliquée à la face f_w conduit à :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_w = \frac{T_P - T_V}{(\delta x)_w}, \tag{2.46}$$

où $(\delta x)_w$ représente la distance entre le centre V et le centre du volume de contrôle situé à sa gauche. En se mettant dans le cas de cette variation dans la direction x, l'équation (2.44), peut devenir en remplaçant (2.45) et (2.46) :

$$\left[\left(D\,\frac{T_P - T_V}{(\delta x)_e}\,\Delta y\right)_e\right] - \left[\left(D\,\frac{T_P - T_V}{(\delta x)_w}\,\Delta y\right)_w\right] = 0. \tag{2.47}$$

Pour des raisons de simplicité, posons :

$$\Gamma_e = \frac{(\Delta y)_e}{(\delta x)_e}, \qquad \Gamma_w = \frac{(\Delta y)_w}{(\delta x)_w}. \tag{2.48}$$

En injectant dans (2.47), on obtient la forme simplifée :

$$[D_e\Gamma_e\ (T_P - T_V\ )] - [D_w\Gamma_w\ (T_P - T_V\ )] = 0. \tag{2.49}$$

Ces expressions d'interpolation (2.45), (2.46) et (2.49) peuvent également être établies sur les faces f_n et f_s. Elles permettent d'obtenir les formes discrètes nécessaires à l'assemblage du système d'équations et à la construction de la matrice globale à inverser pour déterminer le champ de température. L'objectif étant de présenter les principes fondamentaux de la méthode, l'analyse est ici limitée à ces deux faces.Pour en revenir au cas de la modélisation de l'imprégnation de résine, l'écoulement dans la préforme étant décrit par la loi de Darcy, le couple moule/préforme est maillé et la forme conservative des équations de transport (pression, vitesse, fraction volumique, température et degré de réticulation) est intégrée sur chaque volume de contrôle. Cela conduit à un système d'équations algébriques de bilan de flux [8, 149, 134, 36]. Les approches fondées sur les volumes finis constituent aujourd'hui des outils robustes et largement validés sur le plan expérimental pour la modélisation de l'écoulement de la résine dans les procédés RTM et LCM, notamment lorsqu'elles sont associées à la loi de Darcy et à des techniques de suivi d'interface.

2.2.3 Méthode des éléments finis

Reprenons l'équation de la chaleur (2.38) et procédons à sa discrétisation selon l'approche des éléments finis. Nous aborderons l'interpolation de la fonction T aux nœuds des éléments, ainsi que l'approximation de la solution correspondante.

2.2.3.1 Interpolation d'une fonction et de son gradient

Considérons alors l'équation de chaleur :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (D\,\nabla T) = 0, & \text{dans } \Omega, \\ T = T_D, & \text{sur } \Gamma_D, \\ D\,\nabla T \cdot \boldsymbol{n} = q_N, & \text{sur } \Gamma_N. \end{cases} \tag{2.50}$$

L'interpolation de la fonction T sur les nœuds et sur les éléments consiste à discrétiser le domaine continu en un ensemble d'éléments finis, constitué soit de triangles ou de quadrilatères en 2D, soit de tétraèdres ou d'hexaèdres en 3D [53, 37]. Pour cette raison, les figure 2.15 et figure 2.16 illustrent les différents types d'éléments finis couramment utilisés.



FIGURE 2.15 – Éléments finis triangulaires : (a) interpolation linéaire P1 et (b) interpolation quadratique P2.



FIGURE 2.16 – Éléments finis quadrilatéraux : (a) interpolation Q1 et (b) interpolation Q2.

Pour mettre en œuvre cette approche, considérons la figure 2.17(a). La première étape consiste à générer un maillage conforme (figure 2.17(b)), composé d'éléments K et de nœuds i_K.



FIGURE 2.17 – Représentation d'un domaine carré : (a) domaine continu Ω, (b) discrétisation en éléments finis triangulaires.

Sur ce maillage, la température peut être interpolée aux nœuds des éléments finis à partir des fonctions de forme de Lagrange [37, 53, 82, 178], ce qui donne :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad T(\mathbf{x}) \approx T_h(\mathbf{x}) \approx \sum_{i_K \in \mathcal{N}(K)} T_{i_K} N_{i_K}(\mathbf{x}), \quad K \in \mathcal{T}, \ \ \mathbf{x} \in K, \tag{2.51}$$

où N_{i_K} désigne la fonction de forme associée au nœud i_K de l'élément K. Ces fonctions satisfont la condition d'interpolation suivante :

$$\forall\, j_K \in \mathcal{N}(K), \quad N_{i_K}(\mathbf{A}_j) = \begin{cases} 1, & j_K = i_K, \\ 0, & j_K \neq i_K, \end{cases} \tag{2.52}$$

où $\mathbf{A}_j$ représente les coordonnées des noeuds j de l'élément de référence K.
Cette approximation est dite linéaire lorsque les N_{i_K} sont des fonctions affines. Si la fonction est régulière ($T \in H^1(\Omega)$), il est possible d'approximer aussi son gradient :

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \nabla T(\mathbf{x}) \approx \sum_{i_K \in \mathcal{N}(K)} T_{i_K} \nabla N_{i_K}(\mathbf{x}), \quad K \in \mathcal{T}, \ \ \mathbf{x} \in K. \tag{2.53}$$

Les fonctions de forme et leurs dérivées sont connues sur un élément de référence (segment, triangle, quadrilatère, etc.). Elles sont ensuite transférées sur chaque élément réel

du maillage par une transformation bijective. Dans le cas d'un champ vectoriel, l'interpolation s'effectue composante par composante selon le même principe [140, 178].

2.2.3.2 Approximation

Dans l'approche par éléments finis de Lagrange, les valeurs de la fonction ne sont connues qu'à certains nœuds du maillage, tandis que sur d'autres, elles restent inconnues. Les valeurs aux nœuds restants peuvent être déterminées par la résolution de l'EDP. Cela représente ce que l'on appelle l'approximation. La première équation du système (2.50) correspond à la forme forte de l'équation de diffusion thermique. La deuxième représente la condition aux limites de Dirichlet et la troisième celle de Neumann, toutes deux appliquées sur les frontières Γ_D et Γ_N.

La première équation fait apparaître une dérivée seconde du champ scalaire, en raison de la présence de l'opérateur de divergence $(\nabla\cdot)$ appliqué au gradient en tout point du domaine. Cela implique que ces dérivées doivent exister en tout point de Ω. La forme faible permet d'alléger cette contrainte. Elle s'obtient en multipliant la première équation de (2.50) par une fonction test, puis en intégrant sur Ω. on obtient alors :

$$\int_\Omega \nabla\cdot(D\,\nabla T)\,\delta T_h\,\mathrm{d}\Omega = 0, \tag{2.54}$$

où δT_h désigne la fonction test.
En appliquant le théorème de Green, on obtient :

$$-\int_\Omega (D\,\nabla T)\cdot\nabla\delta T_h\,\mathrm{d}\Omega + \int_\Gamma \left[(D\,\nabla T)\,\delta T_h\right]\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\Gamma = 0. \tag{2.55}$$

En tenant compte des conditions aux limites de type Neumann sur un bord Γ_N du domaine, on obtient finalement la **forme faible** :

$$\text{Trouver } T\in V \text{ tel que } \int_\Omega (D\,\nabla T)\cdot\nabla\delta T_h\,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Gamma_N} q_N\,\delta T_h\,\mathrm{d}\Gamma,\quad \forall\,\delta T_h\in V_0, \tag{2.56}$$

où

$$V=\{T\in H^1(\Omega)\,|\,T=T_D \text{ sur } \Gamma_D\},\qquad V_0=\{\delta T_h\in H^1(\Omega)\,|\,\delta T_h=0 \text{ sur } \Gamma_D\}.$$

Chaque terme de la forme faible peut être interpolé à l'aide des définitions d'interpolation de la fonction et de son gradient présentées précédemment. Cela permet ensuite de construire la matrice de contribution locale associée à chaque élément. Par la suite, la matrice de contribution globale peut être assemblée à partir de ces matrices locales. Cette matrice globale est alors utilisée pour résoudre le système linéaire $\mathbf{A}\,(T_{iK})_iK=\mathbf{B}$, dont le vecteur $(T_{iK})_iK$ des inconnues contient les valeurs de la température à chaque nœud du maillage en éléments finis.

Après avoir présenté le principe de la méthode des éléments finis appliquée au champ de température, il est important de passer en revue les travaux utilisant cette méthode et les capacités qu'elle offre. En effet, dans les procédés d'imprégnation, la méthode des éléments finis est couramment employée pour modéliser l'écoulement de type Darcy au

sein d'une préforme poreuse et suivre la progression du front d'injection. Cela permet d'anticiper la distribution du remplissage, les champs de pression et le temps de mise en œuvre avant la conception du moule.

À cette fin, le moule (en 2D ou 3D) est discrétisé par des éléments de type triangulaire ou quadrangulaire. Les champs de pression et de saturation sont interpolés par les fonctions de forme (2.52) présentées dans cette sous-section [34, 90, 109, 159]. Il existe aussi des travaux couplant les éléments finis et les volumes finis pour résoudre les problèmes de distribution de pression et de saturation, afin de prédire la formation de vides et leur progression [42, 56].

2.2.4 Choix de la méthode numérique retenue

Le tableau 2.1 récapitule les principales méthodes numériques présentées précédemment, en mettant en évidence leurs avantages et leurs limites.

Critère	**Différences finies**	**Volumes finis**	**Éléments finis**
Implémentation	Simple	Moyennement complexe	Complexe
Formulation	Simple	Moyennement complexe	Complexe
Maillage complexe / géométrie	Très limité	Faisable	Faisable
Ordre élevé	Possible	Très limité	Possible
Modèle conservatif	Limité	Oui	Possible

TABLE 2.1 – Comparaison des méthodes numériques classiques.

Dans la littérature, et plus particulièrement en mécanique des fluides numérique (CFD), la méthode numérique la plus répandue est celle des volumes finis. En tenant compte des limites de la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis s'avère mieux adaptée aux maillages non structurés, tout en offrant une implémentation relativement simple par rapport à celle des éléments finis. Par ailleurs, elle garantit une bonne conservation des grandeurs transportées au cours de l'écoulement.

Cependant, la discrétisation des équations d'écoulement par la méthode des éléments finis a longtemps été considérée comme complexe, en raison des instabilités numériques associées aux schémas classiques. Des développements récents ont toutefois permis de surmonter ces difficultés grâce à l'introduction de techniques de stabilisation issues des formulations variationnelles discrètes [18, 141].

Malgré la prédominance de la méthode des volumes finis dans le domaine de la CFD, la méthode des éléments finis présente plusieurs atouts. Des géométries complexes peuvent être modélisées à l'aide d'éléments d'ordre supérieur [109]. De plus, comme on le verra par la suite, les approches multi-échelles s'appuient sur des formes variationnelles, qui peuvent naturellement être approximées par la méthode des éléments finis.

2.3 Logiciel FEMS

Au sein du CERI MP de l'IMT Nord Europe, un code éléments finis nommé *FEMS* [137] a été développé.

2.3.1 Fonctionnalités principales

FEMS dispose d'un module d'adaptation du maillage qui ajuste la densité des éléments en fonction des besoins de la simulation [137]. Cette fonctionnalité permet d'obtenir une bonne précision pour un nombre de nœuds donné. Le code prend en charge des interpolations linéaires et quadratiques.

Les fichiers d'entrée utilisés par *FEMS* sont de deux types : `.xml`, qui contient les paramètres physiques, les conditions aux limites, les options algébriques, le nom du fichier de maillage et le type d'écoulement étudié ; et `.msh`, qui correspond au maillage généré par le logiciel *Gmsh*. Les fichiers de sortie sont produits aux formats `.vtu` et `.pvtu`, compatibles avec le logiciel de visualisation *ParaView*.

Le code *FEMS* présente une grande polyvalence en mécanique. Il permet de traiter aussi bien des problèmes de mécanique des solides que des écoulements fluides, y compris les phénomènes turbulents et multiphasiques. Plus précisément, il résout les écoulements diphasiques transitoires de deux fluides Newtoniens incompressibles à l'aide du schéma de Taylor–Hood (P2/P1). Les interfaces entre phases sont représentées de manière implicite par adaptation de maillage ou par la méthode de *Level-Set*, incluant une étape de réinitialisation de la fonction décrivant l'interface.

2.3.2 Calcul parallèle dans FEMS

Le code intègre des capacités de calcul parallèle basées sur *MPI*, grâce au partitionnement des tâches d'un même calcul sur plusieurs processeurs, comme illustré à la figure 2.18.

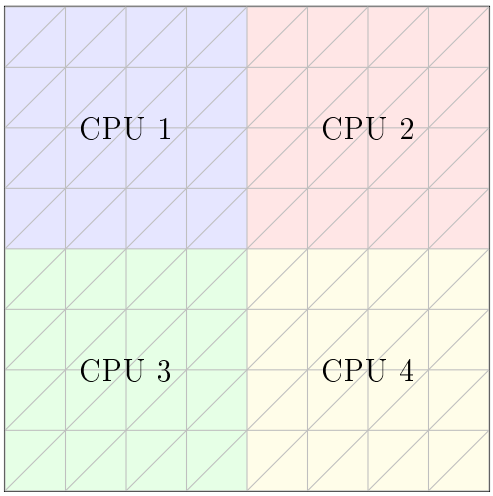


FIGURE 2.18 – Partition d'un maillage triangulaire en quatre sous-domaines, chacun traité indépendamment par un processeur.

FEMS réalise des opérations locales, telles que l'addition de fonctions ou de variables, directement élément par élément ou nœud par nœud, sans difficulté particulière liée à la distribution des calculs sur plusieurs processeurs. En revanche, l'assemblage global, le pré-conditionnement, la résolution du système linéaire ou non-linéaire ainsi que les communications entre les nœuds du réseau sont assurés par la bibliothèque PETSc [16]. Cette stratégie a été mise en œuvre et validée dans les travaux de Shakoor et Park [142, 143].

2.4 Techniques d'homogénéisation

L'homogénéisation constitue une approche multi-échelle fondamentale permettant de modéliser les matériaux ou les milieux hétérogènes en leur attribuant des propriétés effectives à grande échelle [23, 35, 58]. Cette démarche est éprouvée en mécanique des milieux continus, en science des matériaux ainsi qu'en génie civil. Parmi les principales techniques d'homogénéisation développées dans la littérature, on distingue notamment l'homogénéisation asymptotique, l'homogénéisation numérique, l'homogénéisation de champ moyen, ainsi que les méthodes fondées sur la conservation de la puissance entre les échelles, communément désignées sous le nom de *principe de puissance virtuelle multi-échelle*.

Dans le cadre de cette étude bibliographique, nous concentrons notre attention sur deux approches majeures : l'homogénéisation asymptotique et le principe de puissance virtuelle multi-échelle. Bien que distinctes dans leur formulation, ces deux méthodes partagent des fondements communs essentiels, à savoir l'hypothèse de séparation des échelles et l'introduction d'un volume élémentaire représentatif (VER). Cette séparation d'échelles sous-jacente est illustrée sur la figure 2.19.

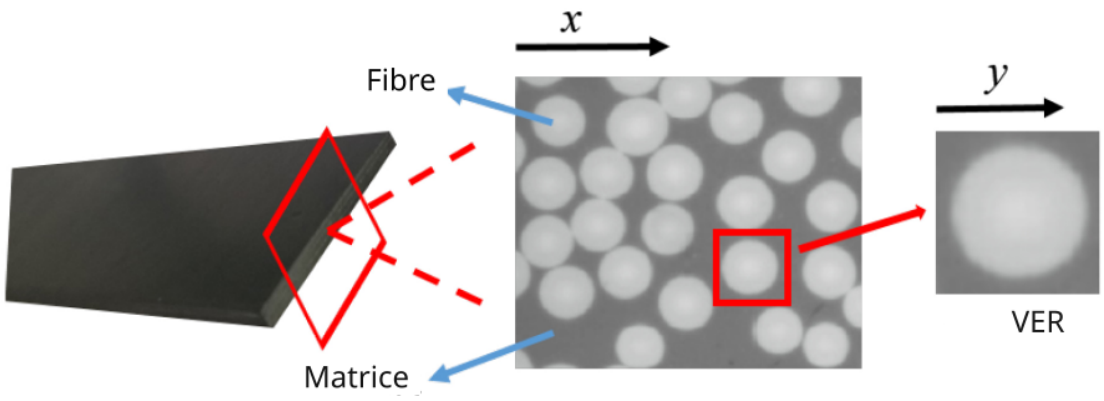


FIGURE 2.19 – Illustration de la séparation des échelles. Figures reproduites depuis [175].

Pour formaliser cette transition d'échelles, on désigne par $\boldsymbol{x}$ la variable lente associée à la grande échelle et par $\boldsymbol{y}$ la variable rapide associée à la petite échelle. Ces deux coordonnées spatiales sont reliées par le paramètre d'homothétie ς, défini comme le rapport des longueurs caractéristiques :

$$\boldsymbol{y} = \frac{\boldsymbol{x}}{\varsigma}, \tag{2.57}$$

avec le paramètre de séparation ς quantifié selon [73, 168, 175] par :

$$\varsigma = \frac{l}{L} \ll 1, \tag{2.58}$$

où l représente la dimension caractéristique du VER et L désigne la dimension du domaine de grande échelle.

Cependant, malgré ce cadre géométrique commun, leurs développements mathématiques divergent fondamentalement. D'une part, l'homogénéisation asymptotique repose sur un développement en série du champ (telque déplacement, vitesse et pression) par rapport aux puissances de ς [48, 73, 168, 175]. D'autre part, le principe de puissance virtuelle multi-échelle s'appuie sur une formulation variationnelle [21, 22, 23, 142] qui s'affranchit notamment de l'obligation d'appliquer des conditions de périodicité strictes aux frontières du VER.

Afin de mettre en lumière leurs spécificités respectives, nous détaillons tout d'abord, dans la sous-section suivante, le formalisme du principe de puissance virtuelle multi-échelle, avant de présenter les principes de la méthode d'homogénéisation asymptotique.

2.4.1 Méthode de puissance virtuelle multi-échelle et extensions par éléments finis au carré

Le *principe de puissance virtuelle multi-échelle* (PPVM) constitue une approche variationnelle générale et rigoureuse pour la modélisation des milieux poreux hétérogènes. Fondé sur une extension du principe de macro-homogénéité de Hill–Mandel [23], ce formalisme permet de coupler de manière cohérente les petites et grandes échelles par un raisonnement exclusivement énergétique. Ce cadre unifié fournit naturellement les relations d'homogénéisation associées aux grandeurs de grande échelle, analogues aux

forces volumiques et aux tenseurs de contraintes [23, 142].

Le transfert d'informations entre le niveau global et le niveau local repose sur un double processus de transition d'échelles, communément défini par les phases de descente d'échelle (*downscaling*) et de remontée d'échelle (*upscaling*).

D'une part, la phase de *downscaling* consiste à projeter les variables cinématiques globales issues de la grande échelle (Ω^M) vers la petite échelle (Ω^m). Dans ce formalisme, la vitesse grande échelle $\boldsymbol{v}^M$ et son gradient grande échelle $\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M$ sont projetés sur le VER. Une spécificité remarquable du PPVM réside dans le fait que, contrairement aux méthodes classiques d'homogénéisation, les conditions aux limites locales à appliquer sur les frontières du VER ne sont pas connues ni postulées. En revanche, les équations de conservation régissant l'écoulement local au sein du fluide sont parfaitement définies et connues [21, 142]. Les conditions aux limites locales émergent alors naturellement et de manière cohérente comme une conséquence mathématique directe de la formulation variationnelle globale et du couplage énergétique entre les échelles.

D'autre part, la phase d' *upscaling* réalise le chemin inverse. À partir de la résolution du problème de petite échelle ainsi défini sur le VER, on détermine par principe de puissance virtuelle multi-échelle les efforts de grande échelle équivalents. Cette étape permet de calculer la force volumique $\boldsymbol{f}^M$ et la partie déviatorique du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}$, alimentant ainsi directement le modèle grande échelle. Cette synergie bidirectionnelle entre la grande échelle et la petite échelle est illustrée par la figure 2.20.

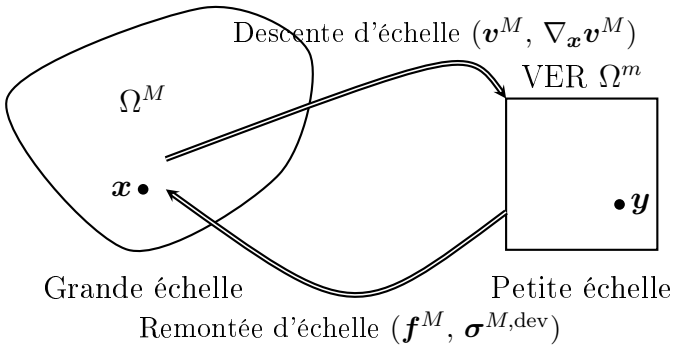


FIGURE 2.20 – Schéma du couplage bidirectionnel entre échelles dans le cadre du PPVM. Chaque point de grande échelle $\boldsymbol{x} \in \Omega^M$ est associé à un VER décrit par les coordonnées locales $\boldsymbol{y} \in \Omega^m$ [21].

Dans la littérature, la mise en œuvre de cette méthodologie a franchi plusieurs étapes clés. Les travaux pionniers de Blanco *et al.* [21, 23] ont d'abord validé ce cadre rigoureux en l'appliquant à l'homogénéisation de l'équation de Navier–Stokes pour un écoulement monophasique incompressible de fluide newtonien en régime permanent au sein de milieux poreux hétérogènes. Plus récemment, une extension significative a été proposée par Shakoor et Park [142] afin d'intégrer les effets d'inertie transitoire et les termes de convection dans les micro-écoulements. Cette contribution a permis d'élargir le domaine de validité du PPVM à des régimes d'écoulement non linéaires plus complexes, grâce à une implémentation sophistiquée basée sur la méthode des éléments finis au carré (FE^2).

La résolution numérique des équations de couplage issues du PPVM requiert une stratégie de calcul multi-échelle robuste. En effet, l'évaluation des termes de grande échelle nécessite de résoudre, en chaque point d'intégration du domaine global Ω^M, un problème aux limites local sur le VER associé. Pour ce faire, la méthode des FE^2 s'impose comme le cadre algorithmique naturel. Cette approche consiste à imbriquer deux calculs par éléments finis : un solveur de grande échelle qui régit le comportement équivalent du milieu poreux, et un solveur de petite échelle qui résout localement les équations d'écoulement au sein de la géométrie du VER afin de renvoyer les variables homogénéisées requises.

Shakoor et Park [142] ont, quant à eux, étendu ce formalisme à l'homogénéisation numérique des écoulements instationnaires de fluide au sein de milieux poreux comportant des obstacles solides. Cette contribution constitue une extension directe des travaux fondateurs de Blanco *et al.* [21]. La forme forte du modèle à la petite échelle est :

$$\begin{cases} -\nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \left(2\mu^m(\boldsymbol{y})\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\right) + \nabla_{\boldsymbol{y}} p^m(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{0}, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \\ \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = \boldsymbol{0}, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Gamma_O^m, \\ \left(2\mu^m(\boldsymbol{y})\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) - p^m(\boldsymbol{y},t)\boldsymbol{I}\right) \cdot \boldsymbol{n}^m(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{n}^m(\boldsymbol{y}), & \forall\, \boldsymbol{y} \in \partial\Omega^m \setminus \Gamma_O^m, \\ \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = 0, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \\ \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t), & \\ \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t). & \end{cases} \tag{2.59}$$

Au sein de ce système (2.59), la première équation décrit la quantité de mouvement locale, où $\mu^m(\boldsymbol{y})$ désigne la viscosité dynamique locale du fluide, $\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)$ représente le tenseur des taux de déformation symétrique déviatorique et p^m représente la pression hydrostatique à la petite échelle. Le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\alpha}$ y apparaît naturellement comme un terme de force volumique constante sur le VER, assurant ainsi le couplage avec la grande échelle.

La deuxième équation traduit la condition d'adhérence aux parois de l'obstacle, imposant une vitesse nulle ($\boldsymbol{v}^m = \boldsymbol{0}$) sur Γ_O^m. La troisième ligne définit la condition aux limites sur la frontière externe du VER ($\partial\Omega^m \setminus \Gamma_O^m$) : le vecteur contrainte locale, projeté selon la normale sortante $\boldsymbol{n}^m$, y est relié au multiplicateur de Lagrange tensoriel $\boldsymbol{\beta}$. Cette relation permet de modéliser la transition d'efforts aux frontières sans imposer de cinématique arbitraire. Enfin, les trois dernières lignes expriment respectivement la condition d'incompressibilité locale et les contraintes cinématiques d'ancrage associées au principe d'homogénéisation.

La transition entre la vitesse petite échelle $\boldsymbol{v}^m$ et la vitesse de grande échelle $\boldsymbol{v}^M$ s'effectue par une opération de moyenne volumique sur le domaine représentatif Ω^m.

Plus précisément, l'expression s'écrit :

$$\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) \tag{2.60}$$

Dans cette intégrale, d$\boldsymbol{y}$ est l'élément de volume qui représente la variable spatiale locale $\boldsymbol{y}$. Si le domaine est bidimensionnel, la variable petite-échelle est un vecteur de coordonnées $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2)$, et l'élément différentiel est le produit $\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \mathrm{d}y_1\mathrm{d}y_2$.

On obtient ainsi que la notation condensée relativement à la variable vectorielle $\boldsymbol{y}$ représente en fait une intégrale double sur le domaine Ω^m, dont la mesure (surface ou volume) est notée $|\Omega^m|$.

En s'appuyant sur le même cadre variationnel multi-échelle proposé par le PPVM, les auteurs formulent le problème de grande échelle. Ainsi, la forme forte du modèle à grande échelle s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{f}^M(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} p^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{v}_D^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_D^M, \\ \left(\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) - p^M(\boldsymbol{x})\mathbf{I}\right)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{t}_N^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_N^M. \end{cases} \tag{2.61}$$

À partir des puissances virtuelles définies aux petite et grande échelles, ainsi que du principe de puissance virtuelle multi-échelle associé à la transition entre les échelles [21, 142], les grandeurs duales de grande échelle $\boldsymbol{f}^M$ et $\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}$ sont identifiées en fonction des multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\beta}$ par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \boldsymbol{f}^M = \boldsymbol{\alpha}, \\ \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} = \boldsymbol{\beta} + p^M \boldsymbol{I}, \end{cases} \tag{2.62}$$

où $\boldsymbol{I}$ désigne le tenseur identité du second ordre et p^M est la pression hydrostatique de grande échelle. Pour plus de détails sur la formulation variationnelle et une identification rigoureuse de ces grandeurs duales, nous renvoyons le lecteur aux travaux de Shakoor et Park [142].

Dans cette approche, le calcul des dérivées de la force d'une part, et des dérivées de la contrainte déviatorique d'autre part, permet de construire la matrice de rigidité de grande échelle sous la forme :

$$\boldsymbol{K} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \boldsymbol{v}^M} & \dfrac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M} \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \boldsymbol{v}^M} & \dfrac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M} \end{pmatrix} \tag{2.63}$$

où $\frac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \boldsymbol{v}^M}$ représente le tenseur de résistance de Darcy pour les milieux poreux, $\frac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M}$ le couplage entre force et taux de déformation à grande échelle, $\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \boldsymbol{v}^M}$ tenseur de la sensibilité de la contrainte déviatorique aux variations de vitesse, et $\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M}$ tenseur

de la viscosité effective du milieu poreux. Par rapport aux études de la littérature sur la modélisation de l'écoulement en milieux poreux, ce tenseur $\boldsymbol{K}$ vient effectivement remplacer le tenseur de perméabilité de la loi de Darcy classique dans la description du milieu poreux.

Dans le cas d'une étude portant sur le couplage entre un milieu purement fluide et un milieu poreux, la figure 2.21 présente un extrait des résultats prédictifs obtenus à l'aide du modèle multi-échelle considéré. Ce dernier repose sur l'algorithme FE^2 [143]. Cette figure compare les champs de pression et de vitesse prédits par cette approche avec ceux issus d'une DNS. Les deux sous-figures du haut, à savoir les figure 2.21a et figure 2.21b, correspondent à la DNS, tandis que les deux sous-figures du bas représentent les résultats de l'approche multi-échelle.

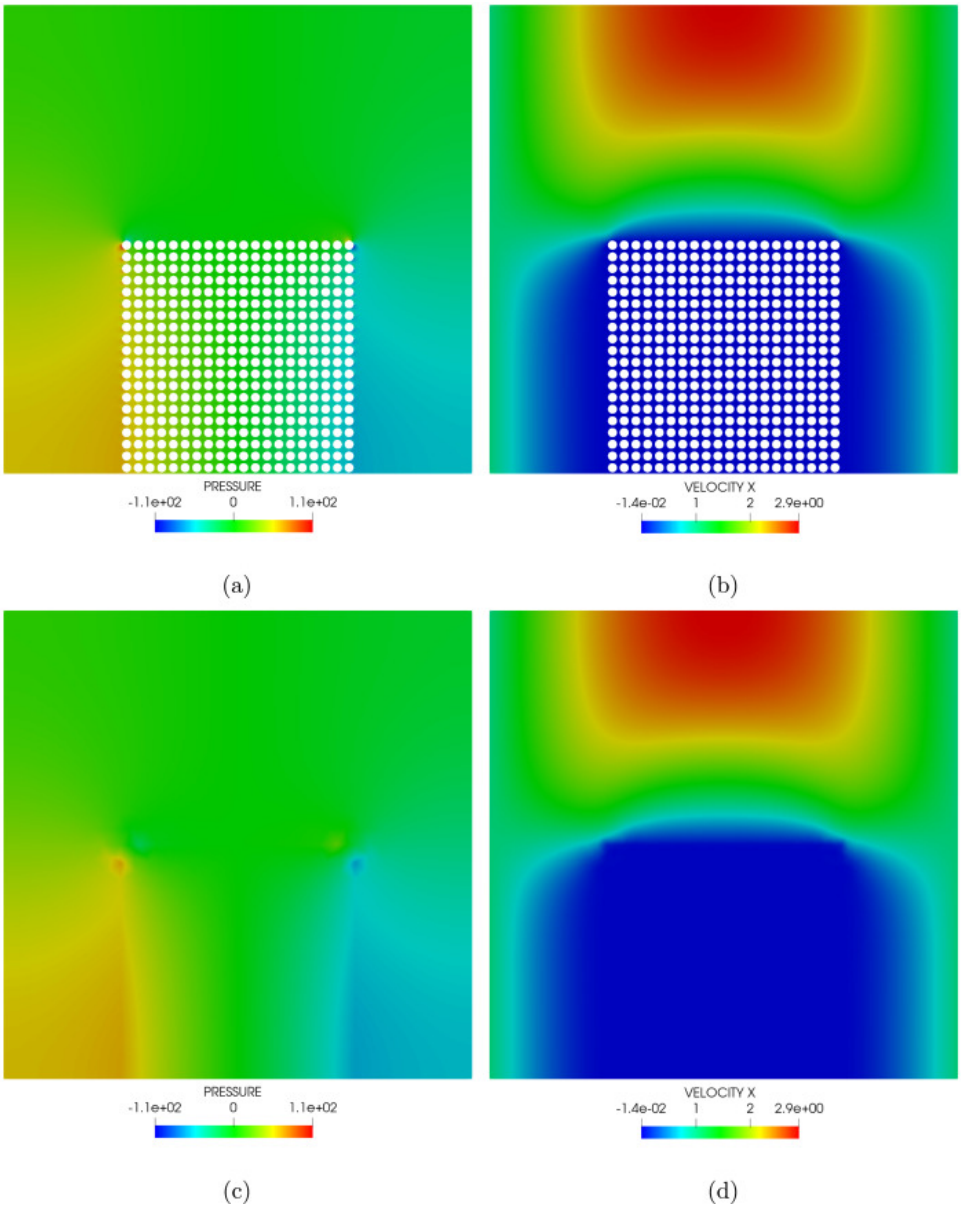


FIGURE 2.21 – Influence de la taille du VER ($l = 0.025$ m) sur les résultats du modèle multi-échelle : (a) pression issue de la DNS (Pa), (b) vitesse issue de la DNS ($\mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$), (c) pression obtenue par l'approche multi-échelle (Pa) et (d) vitesse obtenue par l'approche multi-échelle ($\mathrm{m{\cdot}s^{-1}}$). Figures reproduites d'après [143].

Les auteurs notent que la précision du modèle multi-échelle augmente au fur et à mesure que le taux de porosité décroît. Cette tendance montre que l'approche PPVM avec un couplage FE^2 est capable de rendre fidèlement les effets de confinement et les fortes interactions fluide–solide au niveau du VER, ce qui rend ce modèle adapté à la description de milieux poreux denses.

L'homogénéisation fondée sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle ne se limite pas au cas d'ordre 1 ; plusieurs travaux dans la littérature l'ont étendue jusqu'à l'ordre 2, principalement en mécanique des solides. À l'exception de Thiesen et al. [156], peu de recherches ont appliqué cette approche à la mécanique des fluides. Ces auteurs ont effectivement proposé un cadre d'homogénéisation numérique du second ordre pour les milieux poromécaniques en grandes déformations. Leur contribution principale réside dans le remplacement du développement classique d'ordre 1 de la pression par un développement d'ordre 2, ce qui rend possible une modélisation plus fidèle des variations de volume microstructurales et du caractère non uniforme de l'écoulement du fluide aux limites du VER.

2.4.2 Homogénéisation d'ordre 2

Les méthodes d'homogénéisation d'ordre 1 présentent des limites intrinsèques pour décrire fidèlement les phénomènes de transport aux échelles hautement hétérogènes. Dans ce cadre classique, les champs de grande échelle (pression, vitesse) sont injectés dans le problème à petite échelle via des conditions aux limites purement linéaires, imposant de strictes restrictions cinématiques au sein du VER. Cette approche s'avère incapable de capturer les flux non uniformes aux frontières du VER, les effets de paroi locaux ou les fortes variations de vitesse induites par de grands gradients à la grande échelle [156].

Pour lever ces verrous et s'affranchir d'une hypothèse de premier gradient qui postule une séparation d'échelles parfaite, les formulations d'ordre supérieur enrichissent le développement cinématique local. En introduisant un terme quadratique dans le développement en série de Taylor du champ de vitesse de grande échelle, l'homogénéisation d'ordre 2 intègre des gradients spatiaux d'ordre supérieur, notamment le second gradient de vitesse. Sous cette forme, l'approximation cinématique de la vitesse locale $\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})$ s'exprime par :

$$\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{v}^M + \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M \cdot \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M : (\boldsymbol{y} \otimes \boldsymbol{y}) + \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}), \quad \forall \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \tag{2.64}$$

où Ω^m désigne le domaine du VER, $\boldsymbol{y}$ désigne le vecteur des coordonnées locales, $\tilde{\boldsymbol{v}}$ est le champ de fluctuation de vitesse, et $\boldsymbol{v}^M$ correspond au champ de vitesse de grande échelle. Cette extension permet de mieux modéliser les variations spatiales du contenu en fluide, les écoulements transitoires [122], ainsi que les effets d'échelle et les phénomènes de localisation hydro-mécanique [22, 57, 81, 130, 156]. Ce cadre enrichi est particulièrement critique aux interfaces entre un fluide libre et un milieu poreux, où l'ordre 1 échoue à modéliser la discontinuité des forces de frottement. À ce titre, des approches basées sur le modèle de Darcy–Brinkman [152] intègrent des conditions de glissement généralisées de type Beavers–Joseph, permettant de restituer rigoureusement la vitesse de transpiration

et le saut de pression interfacial, des grandeurs singulières systématiquement lissées par les formulations classiques. Plusieurs approches numériques ont été développées pour résoudre cette cinématique enrichie, notamment les algorithmes d'éléments finis au carré (FE^2), les formulations variationnelles multi-échelles et les méthodes mixtes, qui assurent un couplage bidirectionnel cohérent entre les grande et petite échelles [95, 129].

Mais le passage à l'ordre 2 augmente la sensibilité du problème aux conditions aux limites à petite échelle (périodiques ou directes). Un choix inapproprié ou une mauvaise régularisation de ces conditions conduit fréquemment à des artefacts numériques majeurs, tels que des réponses non physiques ou une dépendance pathologique de la solution au maillage en zone de localisation [81, 94, 130].

Cependant, malgré la robustesse démontrée du PPVM pour la modélisation des écoulements monophasiques (qu'ils soient de type Stokes linéaire ou inertiels), à l'ordre 1 comme à un ordre supérieur, son application souffre encore de limites majeures en modélisation d'écoulement diphasique. En effet, à notre connaissance, il n'existe encore aucun travail dans la littérature fondé sur le formalisme du PPVM appliqué aux écoulements diphasiques en milieux poreux.

Le passage d'un écoulement monophasique à un écoulement diphasique introduit des verrous physiques et mathématiques complexes, tels que la présence d'interfaces mobiles entre les phases fluides, la prise en compte des tensions superficielles locales (capillarité), et la gestion des conditions aux limites du VER. Relever ce défi et étendre le PPVM à la physique des écoulements diphasiques, tout en préservant cette propriété d'obtention naturelle des conditions aux limites locales par couplage variationnel, constitue l'un des verrous scientifiques majeurs que cette étude s'attache à lever.

Pour situer les caractéristiques du PPVM par rapport à ces verrous scientifiques, il est utile de se pencher sur les façons dont sont traités ces phénomènes par d'autres approches classiques. La sous-section qui suit est consacrée à la méthode d'homogénéisation asymptotique, en mettant l'accent sur son utilisation dans les écoulements diphasiques en milieux poreux.

2.4.3 Homogénéisation asymptotique

La méthode d'homogénéisation asymptotique, également appelée méthode des développements asymptotiques à deux échelles, constitue l'un des piliers théoriques de la modélisation multi-échelle. Elle permet de dériver des lois à la grande échelle, telles que la loi de Darcy, à partir des équations de Navier-Stokes ou de Stokes régissant l'échelle des pores.

2.4.3.1 Origine et principe d'homogénéisation asymptotique

L'application de la méthode d'homogénéisation asymptotique aux écoulements diphasiques en milieux poreux trouve ses fondements dans les travaux précurseurs d'Auriault [13] et d'Auriault et al. [15]. Bien que cette approche classique ait été enrichie avec succès, notamment par Bourgeat et al. [27] ou Picchi et Battiato [121], elle présente des limites

intrinsèques. En effet, ces formulations reposent souvent sur l'hypothèse d'interfaces simplifiées entre les phases fluides, ce qui restreint leur capacité à décrire la dynamique complexe des lignes de contact ainsi que les changements morphologiques des interfaces à l'échelle locale.

Pour s'affranchir de ces limitations tout en capturant la physique multi-échelle, cette approche repose sur l'hypothèse d'une séparation stricte des échelles, caractérisée par un petit paramètre $\varsigma = l/L \ll 1$ [73, 168, 175]. En s'appuyant sur ce formalisme, tout champ inconnu ψ (tel que la pression p ou la vitesse $\boldsymbol{v}$) est exprimé en fonction de deux variables d'espace indépendantes : une variable de grande échelle $\boldsymbol{x}$ et une variable de petite échelle $\boldsymbol{y}$ [131]. Mathématiquement, cette séparation d'échelles conduit à redéfinir l'opérateur gradient sous la forme :

$$\nabla \;\mapsto\; \nabla_{\boldsymbol{x}} + \frac{1}{\varsigma}\nabla_{\boldsymbol{y}}, \tag{2.65}$$

où $\nabla_{\boldsymbol{x}}$ agit sur la variable de grande échelle lente $\boldsymbol{x}$, tandis que $\nabla_{\boldsymbol{y}}$ agit sur la variable de petite échelle rapide $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}/\varsigma$.

Dans ce cadre de modélisation asymptotique, la définition géométrique du VER constitue une étape cruciale pour l'expression des problèmes locaux. Pour un écoulement monophasique, Ambrosi et al. [11] ont formalisé une décomposition rigoureuse du VER, partagé entre la matrice solide et une unique phase fluide. Afin d'étendre ce concept aux problématiques diphasiques, nous proposons d'adapter cette représentation en fractionnant le domaine poreux pour y intégrer la coexistence de deux fluides non miscibles (voir figure 2.22). Cette approche permet de conserver la structure géométrique solide initiale tout en introduisant explicitement l'interface fluide-fluide au cœur des écoulements diphasiques.

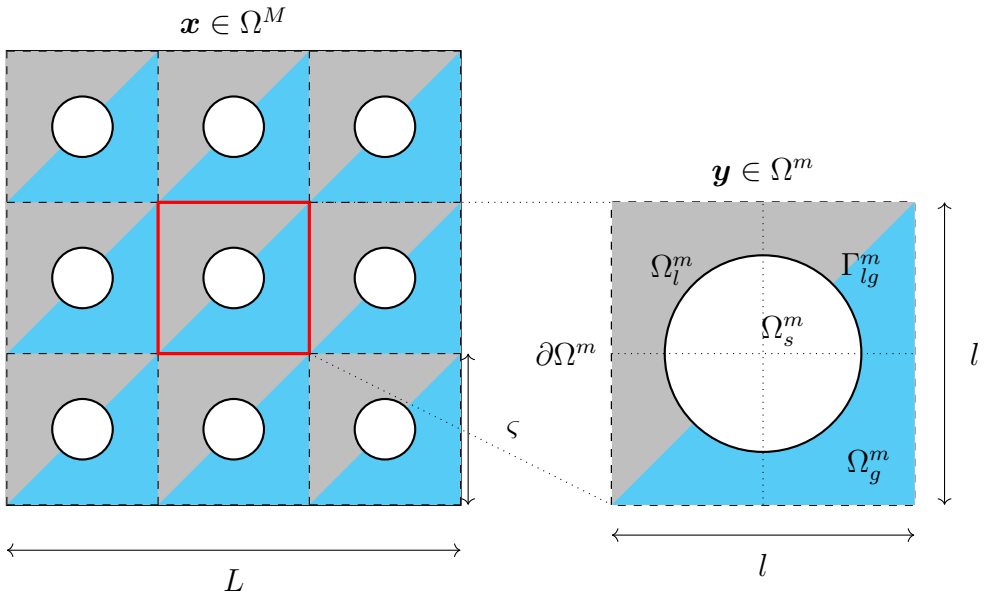


FIGURE 2.22 – Schéma multi-échelle d'un écoulement diphasique en milieu poreux : le domaine de grande échelle Ω^M est composé de cellules de taille ς. Le VER Ω^m contient une phase solide Ω_s^m, une phase liquide Ω_l^m, une phase gazeuse Ω_g^m et une interface liquide–gaz Γ_{lg}^m.

Pour établir le modèle à grande échelle de l'écoulement en milieu poreux, il est fondamental de partir des équations régissant la petite échelle. À cet effet, le système local (2.66) décrit l'écoulement diphasique de deux fluides newtoniens, visqueux, incompressibles et immiscibles au sein d'un milieu poreux rigide [13]. Le comportement de chaque phase est régi par les équations de Stokes. En imposant une condition de non-glissement aux parois solides et en considérant une interface fluide-fluide animée d'un mouvement lent [13, 15], les équations gouvernantes s'écrivent dans ce système tel que :

$$\begin{cases} -\mu_i \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{\nabla} p_i = \boldsymbol{0}, & \text{dans } \Omega_i^m, \\ \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v}_i = 0, & \text{dans } \Omega_i^m, \\ \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{0}, & \text{sur } \Omega_s^m, \end{cases} \tag{2.66}$$

où l'indice i désigne la phase fluide considérée, Ω_i^m représente le domaine occupé par cette phase et, pour rappel, Ω_s^m correspond à la paroi de l'obstacle.

Le champ scalaire ψ est alors développé en série de puissances de ς sous la forme :

$$\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \approx \psi_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \varsigma\, \psi_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \varsigma^2 \psi_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) + \cdots \tag{2.67}$$

où les fonctions ψ_k sont périodiques par rapport à $\boldsymbol{y}$ sur le VER.

2.4.3.2 Hypothèse des effets capillaires

Concernant la physique des interfaces, les effets capillaires sont pleinement pris en compte à l'interface fluide-fluide (Γ_{lg}^m). Cette contribution est introduite via un nombre

de Weber mis à l'échelle de l'ordre de l'unité, soit $We = O(1)$, ce qui assure un équilibre entre les forces hydrodynamiques et les forces de tension de surface à la grande échelle [13, 15].

En adoptant la convention des pressions positives en traction, la pression capillaire p_c à l'échelle locale est régie par la loi de Laplace :

$$p_c = -\frac{\sigma_s}{\varsigma}\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right), \tag{2.68}$$

où σ_s désigne la tension de surface et ςR_1, ςR_2 représentent les rayons de courbure principaux de l'interface fluide-fluide. Les rayons adimensionnels R_1 et R_2 étant définis par rapport à la variable d'espace locale $\boldsymbol{y}$, ils sont de l'ordre de la taille caractéristique de grande échelle, soit $O(L)$. Par conséquent, l'analyse des ordres de grandeur implique la mise à l'échelle suivante pour la tension de surface :

$$\sigma_s = O(\varsigma p_c L). \tag{2.69}$$

La relation de mise à l'échelle (2.69) est fondamentale pour garantir la cohérence des termes capillaires lors de la cascade d'homogénéisation asymptotique [15].

Pour mener à bien cette procédure d'homogénéisation, il convient de définir deux types de moyennes spatiales opérant sur la cellule de périodicité : la moyenne intrinsèque et la moyenne volumique [60, 117, 124].

Par définition, la moyenne intrinsèque d'un champ $\psi(\boldsymbol{y}, t)$ associé à la phase fluide s'exprime sous la forme :

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{|\Omega_f^m|}\int_{\Omega_f^m} \psi(\boldsymbol{y}, t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \frac{1}{\Phi_f(\boldsymbol{x})}\int_{\Omega_f^m} \psi(\boldsymbol{y}, t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{2.70}$$

où Ω_f^m désigne la phase fluide considéré (avec $f \in \{l, g\}$) et Φ_f le taux de porosité associé au sein du milieu.

Quant à la moyenne volumique du même champ, rapportée à la structure totale en un point de la grande échelle, elle s'écrit :

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega_f^m} \psi(\boldsymbol{y}, t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{2.71}$$

En injectant le développement en série de puissances (2.67) dans le système d'équations locales (2.66), et en s'appuyant sur les définitions des moyennes (2.70) et (2.71), la résolution des différents ordres du problème conduit à la loi de Darcy diphasique à la grande échelle, exprimée sous la forme :

$$\langle \boldsymbol{v}_i^{(0)} \rangle = -\frac{\mathbf{K}_i^{\mathrm{eff}}}{\mu_i} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{x}} p_i^{(0)}\right). \tag{2.72}$$

Ici, $\mathbf{K}_i^{\mathrm{eff}} = \langle \mathbf{K}_i(\boldsymbol{y}) \rangle$ désigne le tenseur de perméabilité effective de la phase i. Ce tenseur de grande échelle dépend intrinsèquement de la géométrie de l'espace poreux, des perméabilités relatives k_{ri} ainsi que de la saturation de la phase considérée. Les détails complets de cette procédure de changement d'échelle sont détaillés dans [13, 15, 26].

Pour lever le verrou lié au suivi explicite des interfaces mobiles que des approches alternatives basées sur la méthode du champ de phase (*phase-field*) ont été introduites, à l'image des travaux de Daly & Roose [39]. Cette formulation diffuse permet de décrire implicitement les transitions de phase et de s'affranchir des singularités géométriques au niveau des pores.

Cependant, la résolution des problèmes de fermeture issus de ces méthodes d'homogénéisation reste un défi majeur, particulièrement lorsque des non-linéarités ou des couplages forts apparaissent. Pour pallier ces limitations théoriques et s'affranchir des contraintes strictes de périodicité, des avancées récentes ont cherché à formuler des modèles de grande échelle plus rigoureux. C'est le cas des travaux de Lasseux & Valdés-Parada [84], qui ont développé un formalisme d'écoulement diphasique fondé sur une méthode de l'adjoint couplée à la formule de Green. Ce cadre, complété par Lasseux & Valdés-Parada [85] et étendu par Sánchez-Vargas et al. [133], offre une alternative mathématique puissante pour exprimer les termes de transport à grande échelle sans imposer les restrictions géométriques des fermetures classiques. Notons que, même au sein de ces approches avancées, le suivi explicite des interfaces demeure un défi majeur en modélisation multi-échelle de l'écoulement diphasique en milieux poreux.

2.4.4 Choix de la méthode d'homogénéisation retenue

Nous avons présenté, dans les sous-sections précédentes, les méthodes d'homogénéisation fondées sur le principe des puissances virtuelles multi-échelle ainsi que celles basées sur l'homogénéisation asymptotique. Chacune de ces approches présente l'avantage de séparer la petite échelle de la grande échelle et d'introduire un volume élémentaire représentatif. Les deux méthodes permettent de dériver un modèle à la grande échelle décrivant les propriétés effectives du milieu hétérogène, soit par développement asymptotique, soit par une approche variationnelle.

La méthode des puissances virtuelles multi-échelle, associée à une implémentation en éléments finis au carré (FE^2), assure quant à elle un couplage cohérent entre la petite et la grande échelle, tout en garantissant la cohérence cinématique [22, 46] et la transition du comportement physique de la petite échelle vers la grande échelle [52].

Bien que la méthode d'homogénéisation asymptotique repose sur la séparation des échelles et l'introduction du VER, elle s'avère limitée pour le suivi explicite ou implicite de la morphologie de l'interface entre les phases fluides. Cela restreint sa capacité à décrire la dynamique complexe en milieu poreux ainsi que les changements morphologiques des interfaces à la petite échelle. En revanche, la méthode des puissances virtuelles multi-échelle se distingue par sa démarche originale pour formuler les équations à résoudre [46, 129].

Conclusion

Ce chapitre s'est concentré sur la modélisation du procédé d'imprégnation. La modélisation directe de l'écoulement à l'échelle des fibres avec équations de Stokes et à l'échelle du moule par Darcy est couteux en temps de calcul et les modèles existants pour prédire la migration de bulles, restent empiriques, rendant nécessaire une modélisation par approche multi-échelle, capable de séparer l'échelle du moule de celle des fibres et

de réduire le coût numérique. A cet effet, deux approches d'homogénéisation ont été présentées permettant de séparer la petite échelle de celle de la grande échelle au sein du milieu poreux. Compte tenu des avantages qu'offre la méthode de puissance virtuelle multi-échelle, ainsi que l'existance des travaux antérieurs au sein du CERI MP, IMT Nord Europe, cette méthode est retenue dans la présente étude pour l'établissement du modèle multi-échelle diphasique.

Les méthodes numériques de suivi d'interface entre phases immiscibles, en particulier les méthodes VOF et *Level-Set*, ont également été présentées. La méthode VOF présente l'avantage de garantir la conservation de la masse lors du transport de l'interface. Cependant, la reconstruction de celle-ci devient coûteuse pour des géométries complexes discrétisées à l'aide de maillages non structurés. De plus, cette méthode présente des limitations en termes de précision du calcul de la courbure [20]. À l'inverse, la méthode Level-Set offre une représentation géométrique de l'interface plus précise et un calcul de la courbure plus robuste. Son principal inconvénient réside toutefois dans la non-conservation de la masse au cours du temps [20, 153]. L'analyse comparative de leurs avantages et de leurs limites a conduit au choix de la méthode *Level-Set*, en raison de sa capacité à représenter avec précision la géométrie de l'interface et à permettre sa réinitialisation géométrique au cours du transport.

Les principales méthodes numériques de discrétisations à savoir les méthodes des différences finies, des volumes finis et des éléments finis ont été présentées et comparées. Cette analyse a permis de mettre en évidence leurs avantages respectifs ainsi que leurs limites, notamment face à la complexité géométrique des milieux fibreux rencontrés dans les procédés RTM. Pour ces raisons, la méthode des éléments finis a été retenue pour la suite de cette étude.

Le code *FEMS* a ensuite été introduit, en soulignant ses capacités de calcul parallèle et son adaptabilité aux différents types de simulations de mécanique des fluides et des solides.

L'homogénéisation d'ordre supérieur présente un intérêt particulier pour la modélisation de milieux hétérogènes [156], notamment dans des configurations mettant en jeu des interfaces déformables, comme celles rencontrées dans les écoulements diphasiques. Jusqu'à présent, les approches d'homogénéisation d'ordre deux ont été principalement développées et appliquées en mécanique des solides. À notre connaissance, aucune étude n'a encore traité de l'homogénéisation des écoulements diphasiques en milieux poreux, ni exploité une telle approche d'ordre deux pour le suivi d'interface au cours de ces processus.

Nous proposons donc d'utiliser le principe de puissance virtuelle multi-échelle, avec une implémentation d'un algorithme élément finis au carré (FE^2) afin d'établir un modèle multi-échelle capable de répondre à cette problématique. Cette approche permettra d'adapter l'homogénéisation d'ordre deux au suivi d'interface dans les écoulements diphasiques, dans le but d'évaluer sa capacité à mieux représenter les effets de courbure multi-échelles des interfaces et de prédire la migration de bulle en milieu poreux.

Chapitre 3

Homogénéisation de l'équation d'advection par le principe de puissance virtuelle multi-échelle

Contents

Introduction . . . 70
3.1 Homogénéisation d'ordre un sans fluctuations . . . 71
3.1.1 Hypothèses de modélisation . . . 71
3.1.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 71
3.1.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 72
3.1.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 73
3.1.5 Identification des grandeurs duales à la grande échelle . . . 73
3.1.6 Conclusion . . . 74
3.2 Homogénéisation d'ordre un avec fluctuations . . . 75
3.2.1 Hypothèses de modélisation . . . 75
3.2.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 75
3.2.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 76
3.2.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 77
3.2.5 Transport et contrainte normale effectifs de l'interface grossière 80
3.2.6 Conclusion . . . 80
3.3 Homogénéisation d'ordre deux . . . 81
3.3.1 Hypothèses de modélisation . . . 81
3.3.2 Modèle multi-échelle pour l'interface . . . 82
3.3.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion . . . 82
3.3.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle . . . 83
3.3.5 Transport, diffusion et dispersion effectifs de l'interface grossière 84
3.3.6 Réduction du modèle d'ordre 2 et méthode level-set . . . 89
3.3.7 Conclusion . . . 90
3.4 Analyse comparative des modèles et choix du modèle retenu . . . 90
Conclusion . . . 91

Introduction

L'homogénéisation fondée sur le principe des puissances virtuelles multi-échelle constitue une approche développée par Blanco *et al.* [23] dans le cadre de l'étude du couplage entre les échelles.

Selon l'ordre d'homogénéisation considéré, plusieurs travaux ont été menés : ceux basés sur l'homogénéisation d'ordre 1 [21, 23, 142, 143], appliquée aussi bien à la mécanique des solides qu'à celle des écoulements en milieu poreux, et ceux consacrés à l'homogénéisation d'ordre 2 [94, 156], principalement développée dans le domaine de la mécanique des solides.

Dans la littérature, les études portant sur l'écoulement diphasique de fluides incompressibles avec transport d'interface [103, 137, 141, 157, 176] présentent des modèles représentatifs de ce phénomène pour la simulation numérique directe. Comme présenté dans la section dédiée à la modélisation de l'écoulement de fluide du chapitre bibliographique, ces modèles prennent la forme suivante :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{v}, p) + \boldsymbol{f}_s = \boldsymbol{0}, & \text{dans } \Omega, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}, & \text{dans } \Omega, \\ \dfrac{\partial \phi}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \phi = 0, & \text{dans } \Omega. \end{cases} \tag{3.1}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ désigne le tenseur de Cauchy, $\boldsymbol{v}$ le vecteur vitesse, p le champ de pression de l'écoulement, $\boldsymbol{f}_s$ la force de tension de surface et ϕ la fonction distance signée. Dans le système d'équations (3.1), la dernière équation décrit le problème de transport de l'interface.

En revanche, pour les problèmes de transport au cours d'un écoulement diphasique, aucun travail n'a encore été mené, à notre connaissance, utilisant l'approche des puissances virtuelles multi-échelle pour développer un modèle capable de coupler explicitement la petite et la grande échelle, et de prédire l'évolution de l'interface entre deux phases. Dans ce chapitre, nous proposons de construire un tel modèle multi-échelle d'interface en nous appuyant sur l'approche de Blanco *et al.* [23].

L'idée générale consiste à lier la position de l'interface entre deux phases de grande échelle, ainsi que ses variations spatiales à la grande échelle, afin de reconstruire la cinématique de l'interface à la petite échelle. Cette reconstruction peut s'appuyer, d'une part, sur une décomposition en une composante moyenne et un terme de fluctuation, et, d'autre part, sur l'introduction de gradients d'ordre supérieur permettant de prendre en compte les effets de non-linéarité spatiale.

La représentation ainsi obtenue est ensuite injectée dans l'équation de transport de l'interface issue du système (3.1), en vue de procéder à l'homogénéisation et d'aboutir à un modèle multi-échelle décrivant l'évolution de l'interface. Cette modélisation multi-échelle s'appuie sur l'introduction d'un domaine local $\Omega^m = \Omega^m(\boldsymbol{y})$ en chaque point $\boldsymbol{x}$ du domaine de la grande échelle, au sein duquel les hétérogénéités sont représentées explicitement. Le bord des fibres dans le domaine local est noté $\Gamma_O^m = \Gamma_O^m(\boldsymbol{y})$.

Ce chapitre présente trois modèles de l'interface, à savoir : un modèle d'ordre 1 sans terme de fluctuation, un modèle d'ordre 1 intégrant un terme de fluctuation, et un modèle

d'ordre 2 sans fluctuation. Plus précisément, ce chapitre est organisé comme suit : la section 1 est consacrée à la présentation détaillée du modèle d'ordre 1 sans fluctuation, dans lequel la fonction ϕ est supposée décrire la position de l'interface. La section 2 décrit le modèle d'ordre 1 avec fluctuation, pour lequel la fonction ϕ représente également la position de l'interface, mais est supposée périodique à l'échelle du VER, la fonction distance signée ne satisfaisant pas cette propriété de périodicité. Enfin, la section 3 expose le modèle d'ordre 2, dans lequel la fonction ϕ est assimilée à une fonction distance signée, conformément à la définition adoptée dans la méthode *Level-Set*. Une de ces différentes formulations est ensuite menée afin de motiver le choix du modèle retenu pour la suite de cette étude.

3.1 Homogénéisation d'ordre un sans fluctuations

Dans cette section, l'homogénéisation d'ordre 1 de l'équation d'advection, sans terme de fluctuation entre les échelles, consiste à exprimer la position de l'interface à la petite échelle par une approximation affine (d'ordre 1), puis à en déduire le modèle à la grande échelle.

3.1.1 Hypothèses de modélisation

Les hypothèses retenues pour l'homogénéisation d'ordre 1 sans fluctuation sont les suivantes :

- La taille caractéristique du VER doit être très inférieure à celle de la structure à la grande échelle.
- L'origine du VER est fixée en son centre, ce qui conduit à la condition de nullité du moment géométrique d'ordre 1 :

$$\int_{\Omega^m} \boldsymbol{y}\, d\boldsymbol{y} = \mathbf{0}. \tag{3.2}$$

- La courbure est négligeable à l'échelle de la fibre ; autrement dit, l'interface est considérée comme plane.

3.1.2 Modèle multi-échelle pour l'interface

La position du front d'interface étant observable à la grande échelle, nous supposons qu'il est possible d'imposer cette position ϕ^M, ainsi que son gradient $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M$, depuis cette échelle.

À partir de ces quantités à la grande échelle imposées, la résolution du problème à la petite échelle permet, après homogénéisation, de déterminer les grandeurs de sortie g^M et $\boldsymbol{\tau}^M$ associées à l'évolution de l'interface. Le scalaire g^M représente le terme de transport de l'interface à la grande échelle, correspondant à la vitesse normale effective du front, tandis que le tenseur $\boldsymbol{\tau}^M$ désigne le terme de diffusion de l'interface à cette même échelle, traduisant les effets diffusifs induits par les hétérogénéités de la petite échelle.

Quant à la position de l'interface à l'échelle de la fibre, elle est décomposée en deux contributions : une composante de grande échelle ϕ^M et un terme lié au gradient $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M$. Le couplage entre ces deux échelles est illustré à la figure 3.1.

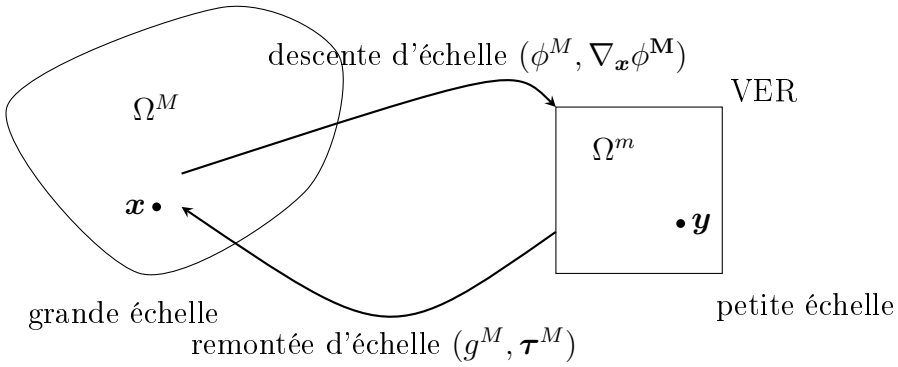


FIGURE 3.1 – Schéma du couplage entre les petites et grandes échelles. La descente d'échelle transmet les grandeurs cinématiques : la position ϕ^M et son gradient $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M$. La remontée d'échelle fournit les grandeurs effectives : le scalaire g^M et le tenseur (ou vecteur) $\boldsymbol{\tau}^M$.

À partir des grandeurs duales obtenues en sortie du problème local (illustré à la figure 3.1), le problème à la grande échelle se formule de manière variationnelle comme suit :

$$\int_{\Omega^M} \Big(g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta\phi^M(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\delta\phi^M(\boldsymbol{x})\Big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0, \qquad \forall\,\delta\phi^M \in L^2(\Omega^M). \tag{3.3}$$

La solution est recherchée dans les espaces fonctionnels classiques :

$$H^1(\Omega^M) = \big\{ w \in L^2(\Omega^M) \;\big|\; \nabla_{\boldsymbol{x}} w \in \big(L^2(\Omega^M)\big)^d \big\},$$
$$L^2(\Omega^M) = \Big\{ w : \Omega^M \to \mathbb{R} \;\Big|\; \int_{\Omega^M} w(\boldsymbol{x})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} < +\infty \Big\},$$

où $L^2(\Omega^M)$ représente l'ensemble des fonctions de carré sommable sur le domaine Ω^M et d désigne la dimension de l'espace.

La nouvelle approche multi-échelle d'interface que nous proposons est construite de telle sorte que les grandeurs $g^M(\boldsymbol{x},t)$ et $\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)$ dépendent de $\phi^M(\boldsymbol{x},t)$ et de $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)$. L'approche retenue est de nature cinématique : elle impose des contraintes de correspondance entre les champs de grande échelle et de petite échelle, tandis que les expressions des grandeurs effectives scalaire (g^M) et tensorielle ($\boldsymbol{\tau}^M$) du modèle sont déduites du principe des puissances virtuelles multi-échelle [21].

3.1.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion

La position de l'interface à la grande échelle et son gradient sont définis comme les moyennes volumiques correspondantes à la petite échelle :

$$\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.4}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.5}$$

Ces contraintes (3.4) et (3.5) peuvent être satisfaites en posant :

$$\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}. \tag{3.6}$$

En effet, on peut alors démontrer que l'expression (3.6) conduit à :

$$\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \tag{3.7}$$

La vérification de la première contrainte (3.4) est obtenue en exploitant l'équation (3.2), tandis que la deuxième contrainte (3.5) est démontrée en utilisant la définition de la moyenne volumique sur le VER.

3.1.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle

Le principe des puissances virtuelles stipule que la puissance virtuelle à la grande échelle est équivalente à la puissance virtuelle moyenne définie sur le VER :

$$P^M(\delta r,\delta\boldsymbol{s}) = P^m(\delta r,\delta\boldsymbol{s},\delta\phi^m). \tag{3.8}$$

Dans cette relation, $\delta r\in\mathbb{R}$ représente la translation virtuelle uniforme et $\delta\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^d$ désigne la variation virtuelle du gradient de position.

La puissance virtuelle à la grande échelle s'écrit sous la forme suivante :

$$P^M(\delta r,\delta\boldsymbol{s}) = g^M\,\delta r + \boldsymbol{\tau}^M\cdot\delta\boldsymbol{s}. \tag{3.9}$$

Pour exprimer la puissance virtuelle à la petite échelle, on introduit une fonction test cinématique choisie sous forme affine :

$$\delta\phi^m(\boldsymbol{y}) = \delta r + \delta\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{y}. \tag{3.10}$$

La puissance virtuelle moyenne sur le VER est alors définie par :

$$P^m(\delta r,\delta\boldsymbol{s},\delta\phi^m) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left(\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\right)\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.11}$$

En injectant (3.9) et (3.11) dans l'égalité fondamentale (3.8), on obtient la relation de couplage multi-échelle suivante :

$$g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta r + \boldsymbol{\tau}^M\cdot\delta\boldsymbol{s} = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left(\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\right)\left(\delta r + \delta\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{y}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.12}$$

qui doit être vérifiée pour tout couple $(\delta r,\delta\boldsymbol{s})\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^d$. La fonction test fluctuante $\delta\phi^m$ appartient à l'espace fonctionnel classique :

$$L^2(\Omega^m) = \left\{\, w:\Omega^m\to\mathbb{R} \;\middle|\; \int_{\Omega^m} w(\boldsymbol{y})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} < +\infty \,\right\}.$$

3.1.5 Identification des grandeurs duales à la grande échelle

L'identification des grandeurs duales repose sur le choix approprié des fonctions tests dans la relation de puissance virtuelle (3.12). En procédant ainsi, on distingue deux étapes complémentaires.

3.1.5.1 Identification de g^M

On choisit une fonction test homogène en espace, c'est-à-dire $\delta r \neq 0$ et $\delta s = 0$. La fonction test locale s'écrit alors $\delta\phi^m = \delta r$. En injectant cette expression dans (3.12), et en utilisant la relation d'insertion (3.6), on obtient :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \tag{3.13}$$

Cette procédure montre que g^M correspond à un terme de transport effectif, analogue à une équation d'advection pour la position de l'interface.

3.1.5.2 Identification de $\boldsymbol{\tau}^M$

On choisit ensuite une fonction test affine en espace, c'est-à-dire $\delta r = 0$ et $\delta s \neq 0$. La fonction test locale devient alors $\delta\phi^m = \delta s \cdot \boldsymbol{y}$.

En substituant cette expression dans (3.12) et en appliquant la condition de barycentre nul ((3.2)), on obtient :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\\ + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t).\end{aligned} \tag{3.14}$$

Le premier terme correspond à l'effet de l'évolution temporelle du gradient à la grande échelle de l'interface, pondéré par le moment d'inertie géométrique du VER, tandis que le second terme traduit le couplage entre la cinématique locale et l'orientation de l'interface à la grande échelle.

Ainsi, l'identification des variables duales g^M et $\boldsymbol{\tau}^M$ découle directement du choix des fonctions tests dans le principe des puissances virtuelles multi-échelle. Cette démarche met en évidence les contributions du transport effectif (à l'ordre zéro) et de l'orientation (à l'ordre 1) de l'interface.

On retient que le modèle d'ordre 1 sans fluctuation d'interface développé se caractérise par deux grandeurs effectives telles que :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\\ + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\end{aligned} \tag{3.16}$$

3.1.6 Conclusion

Cette analyse a permis d'identifier les propriétés effectives issues de l'homogénéisation d'ordre 1 sans fluctuation. Comme présenté dans le chapitre 1, la courbure de l'interface

dépend du second gradient $\nabla^2\phi$. Ici, la position de l'interface à la petite échelle étant décrite par une fonction affine, elle ne permet pas de capturer les effets liés à la courbure locale ni à la tension de surface.

Pour intégrer ces phénomènes, il est nécessaire d'introduire des fluctuations à l'échelle fine. Cette extension permettra de prendre en compte la courbure de l'interface à la petite échelle et de représenter les effets de tension de surface, qui seront abordés dans la section suivante.

3.2 Homogénéisation d'ordre un avec fluctuations

La modélisation diphasique en milieu poreux fait intervenir une propriété fondamentale à l'échelle des fibres, plus précisément à l'interface entre l'air et le liquide imprégnant : la capillarité. Cet effet est caractérisé par la force de tension de surface [118, 119], qui dépend directement de la courbure de l'interface [115, 141]. L'objectif de cette section est d'étendre le modèle à la grande afin d'intégrer cette courbure locale à l'échelle des fibres.

3.2.1 Hypothèses de modélisation

Les hypothèses retenues pour l'homogénéisation d'ordre un avec fluctuations sont les suivantes :

- La taille caractéristique du VER doit être significativement inférieure à celle de la structure à grande échelle.
- L'origine du VER est fixée en son centre, ce qui conduit à la condition de nullité du moment géométrique d'ordre 1 :

$$\int_{\Omega^m} \boldsymbol{y}\, d\boldsymbol{y} = \mathbf{0}. \tag{3.17}$$

- La courbure moyenne est négligeable à l'échelle de la fibre ; autrement dit, l'interface est considérée comme plane, augmentée d'un terme supplémentaire représentant les fluctuations.
- Des conditions aux limites périodiques sont imposées sur le terme de fluctuation aux bords du VER.

3.2.2 Modèle multi-échelle pour l'interface

Le problème à grande échelle s'écrit sous la même forme variationnelle que dans la section 3.1.2 :

$$\int_{\Omega^M} \Big(g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta\phi^M(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\delta\phi^M(\boldsymbol{x}) \Big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 0, \qquad \forall\,\delta\phi^M \in H^1(\Omega^M). \tag{3.18}$$

La solution est recherchée dans les espaces fonctionnels classiques :

$$H^1(\Omega^M) = \big\{\, w \in L^2(\Omega^M) \;\big|\; \nabla_{\boldsymbol{x}} w \in \big(L^2(\Omega^M)\big)^d \,\big\},$$

$$L^2(\Omega^M) = \Big\{\, w : \Omega^M \to \mathbb{R} \;\Big|\; \int_{\Omega^M} |w(\boldsymbol{x})|^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} < +\infty \,\Big\}.$$

La différence entre l'homogénéisation d'ordre un avec et sans fluctuations réside dans la définition des grandeurs duales g^M et $\boldsymbol{\tau}^M$, ainsi que dans la condition d'insertion.

3.2.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion

La position de l'interface à grande échelle et son gradient sont définis comme les moyennes correspondantes à petite échelle :

$$\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.19}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.20}$$

En prenant en compte le terme de fluctuation, ces deux contraintes de moyenne se traduisent par la relation d'insertion suivante :

$$\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y} + \tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t), \tag{3.21}$$

où $\tilde{\phi}$ représente la fluctuation locale.

Les conditions aux limites périodiques consistent à imposer que cette fluctuation soit identique sur deux faces opposées du VER [21, 94] :

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+,t) = \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-,t), \qquad \forall(\boldsymbol{y}^+,\boldsymbol{y}^-)\in\partial\Omega^{m,+}\times\partial\Omega^{m,-} \text{ tels que } \boldsymbol{y}^- = \mathcal{P}(\boldsymbol{y}^+). \tag{3.22}$$

Dans le cas d'un maillage conforme, Lopes et Pires [93] montrent que cela revient à associer directement les nœuds de la face positive à ceux de la face négative opposée. Pour écrire formellement cette contrainte, on introduit l'application de périodicité [83] :

$$\begin{aligned} \mathcal{P} : \partial\Omega^{m,+} &\to \partial\Omega^{m,-} \\ \boldsymbol{y}^+ &\mapsto \boldsymbol{y}^- = \mathcal{P}(\boldsymbol{y}^+). \end{aligned} \tag{3.23}$$

La condition de périodicité sur la fluctuation s'écrit alors :

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+) = \tilde{\phi}\big(\mathcal{P}(\boldsymbol{y}^+)\big), \qquad \forall\,\boldsymbol{y}^+\in\partial\Omega^{m,+}. \tag{3.24}$$

D'après la relation (3.21) et la condition du moment géométrique nul, la fluctuation doit être de moyenne nulle sur le domaine du VER :

$$\int_{\Omega^m} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = 0. \tag{3.25}$$

Ces conditions conduisent naturellement à une condition d'admissibilité sur le gradient de la fluctuation :

$$\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}. \tag{3.26}$$

Or, d'après le théorème de la divergence, cette intégrale de volume se transforme en une intégrale de surface :

$$\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \int_{\partial\Omega^m} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\,\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}s, \tag{3.27}$$

où $\boldsymbol{n}$ désigne le vecteur normal unitaire extérieur au bord du VER $\partial\Omega^m$, et $\mathrm{d}s$ l'élément de surface associé.

On peut démontrer que le terme de droite de la relation (3.27) s'annule à partir des géométries définies sur le carré unité de la figure 3.2. Pour alléger les notations, les partitions des frontières opposées du VER sont définies par :

$$\partial\Omega^{m,-} = \Gamma_{\mathrm{G}}\cup\Gamma_{\mathrm{B}} \qquad \text{et} \qquad \partial\Omega^{m,+} = \Gamma_{\mathrm{D}}\cup\Gamma_{\mathrm{H}}. \tag{3.28}$$

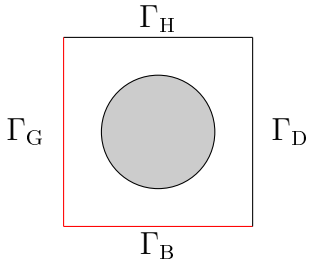


FIGURE 3.2 – VER hétérogène : représentation réelle et image miroir.

Dans ce cas, l'intégrale sur le contour s'écrit comme la somme des intégrales sur chaque frontière en tenant compte de la partition des bords :

$$\int_{\partial\Omega^m} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}s = \int_{\partial\Omega^{m,-}} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-,t)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y}^-)\,\mathrm{d}s + \int_{\partial\Omega^{m,+}} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+,t)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y}^+)\,\mathrm{d}s. \tag{3.29}$$

Compte tenu de l'orientation opposée des normales extérieures sur les frontières vis-à-vis, on a :

$$\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y}^+) = -\,\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y}^-), \qquad \forall\, \boldsymbol{y}^+ \in \partial\Omega^{m,+}. \tag{3.30}$$

En exploitant la périodicité de la fluctuation ($\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+) = \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-)$) et cette relation géométrique sur les normales, on obtient finalement :

$$\int_{\partial\Omega^m} \tilde{\phi}(\boldsymbol{y},t)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}s = \boldsymbol{0}. \tag{3.31}$$

On en déduit alors que la relation (3.26) est vérifiée.

Comme dans la section 3.1, le respect de la première contrainte sur la moyenne volumique de la position de l'interface est démontré en exploitant les équations (3.2) et (3.25), tandis que la deuxième contrainte sur le gradient de ce champ est validée par la relation (3.26) . La relation (3.21) est alors indispensable à l'identification des grandeurs duales.

3.2.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle

Le principe des puissances virtuelles stipule que la puissance évaluée à grande échelle est équivalente à la puissance moyenne définie sur le VER :

$$P^M(\delta r, \delta s) = P^m(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta\phi^m, \delta\xi, \delta\lambda). \tag{3.32}$$

La contrainte cinématique sur le champ de position à l'échelle fine, ainsi que les conditions aux limites périodiques sur l'interface, sont imposées au moyen de multiplicateurs de Lagrange (ξ, λ) tels que :

$$\forall(\xi,\lambda) \in \mathbb{R} \times H^{-1/2}(\partial\Omega^m).$$

Les puissances virtuelles à la grande échelle s'écrit :

$$P^M(\delta r, \delta s) = g^M\,\delta r + \boldsymbol{\tau}^M \cdot \delta s, \tag{3.33}$$

tandis qu'à la petite échelle :

$$\begin{aligned} P^m(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta\phi^m, \delta\xi, \delta\lambda) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left[\frac{\partial \phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\phi^m(\boldsymbol{y},t))\right]\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\ - \delta\xi\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \phi^M(\boldsymbol{x},t)\right) \\ - \xi\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta r\right) \\ - \int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right)\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-} \\ - \int_{\partial\Omega^{m,-}}\lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right)\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-}, \end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\forall(\delta r, \delta\boldsymbol{s}) \in \mathbb{R}\times\mathbb{R}^d,$$
$$\forall(\delta\phi^m, \delta\xi, \delta\lambda) \in L^2(\Omega^m)\times\mathbb{R}\times H^{-1/2}(\partial\Omega^m).$$

La notation $\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-)$ désigne la fluctuation locale définie sur le bord négative $\partial\Omega^{m,-}$, tandis que $\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)$ correspond à la fluctuation définie sur la frontière positive $\partial\Omega^{m,+}$, ces deux entités étant liées par les conditions aux limites périodiques.

En identifiant les équations (3.32) et (3.34), on obtient la relation de couplage avec fluctuations :

$$\begin{aligned} g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta r + \boldsymbol{\tau}^M\cdot\delta s = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left[\frac{\partial \phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot(\boldsymbol{v}^m\phi^m)\right]\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\ - \delta\xi\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \phi^M(\boldsymbol{x},t)\right) \\ - \xi\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta r\right) \\ - \int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right)\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-} \\ - \int_{\partial\Omega^{m,-}}\lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right)\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-}. \end{aligned} \tag{3.35}$$

En s'appuyant sur les conditions aux limites périodiques imposées aux bords du VER, les termes de fluctuation $\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-)$ et $\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)$ peuvent être substitués par leur relation d'équivalence définie par :

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) = \phi^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \phi^M(\boldsymbol{x},t) - \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}^-, \tag{3.36}$$

et :

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+) = \phi^m(\boldsymbol{y}^+,t) - \phi^M(\boldsymbol{x},t) - \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}^+. \tag{3.37}$$

Par soustraction, on en déduit l'expression de la différence des fluctuations locales entre les bords opposées :

$$\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+) = \phi^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \phi^m(\boldsymbol{y}^+,t) - \left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \tag{3.38}$$

De manière analogue, la variation du terme de fluctuation entre les bords négative et positive à petite échelle est donnée par :

$$\delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+) = \delta\phi^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta\phi^m(\boldsymbol{y}^+, t) - \left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right) \cdot \delta\boldsymbol{s}. \tag{3.39}$$

L'espace des champs virtuels étant de dimension infinie, il est possible de poser $\delta r = 0$ et $\delta\boldsymbol{s} = \boldsymbol{0}$ dans la relation (3.35). Cela conduit au problème local à petite échelle, qui consiste à déterminer $(\phi^m,\, \xi,\, \lambda) \in L^2(\Omega^m) \times \mathbb{R} \times H^{-1/2}(\partial\Omega^m)$, pour un champ à la grande échelle donné $\phi^M \in L^2(\Omega^M)$:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \left[\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y}, t) + \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \left(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}, t)\, \phi^m(\boldsymbol{y}, t)\right)\right] \delta\phi^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
-\delta\xi \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y}, t)\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} - \phi^M(\boldsymbol{x}, t)\right) \\
-\xi \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \delta\phi^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta r\right) \\
- \int_{\partial\Omega^{m,-}} \delta\lambda(\boldsymbol{y}^-) \left(\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right) \mathrm{d}\partial\Omega^{m,-} \\
- \int_{\partial\Omega^{m,-}} \lambda(\boldsymbol{y}^-) \left(\delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\phi}(\boldsymbol{y}^+)\right) \mathrm{d}\partial\Omega^{m,-} = 0, \qquad \forall\, (\delta\xi, \delta\lambda) \in \mathbb{R} \times H^{-1/2}(\partial\Omega^m).
\end{aligned} \tag{3.40}$$

En substituant les relations (3.38) et (3.39) dans l'équation (3.40), on obtient :

$$0 = \begin{cases}
\dfrac{1}{|\Omega^m|} \displaystyle\int_{\Omega^m} \left[\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y}, t) + \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot (\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}, t)\phi^m(\boldsymbol{y}, t))\right] \delta\phi^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
- \delta\xi \left(\dfrac{1}{|\Omega^m|} \displaystyle\int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y}, t)\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} - \phi^M(\boldsymbol{x}, t)\right) \\
- \xi \left(\dfrac{1}{|\Omega^m|} \displaystyle\int_{\Omega^m} \delta\phi^m(\boldsymbol{y}, t)\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}\right) \\
- \displaystyle\int_{\partial\Omega^{m,-}} \delta\lambda(\boldsymbol{y}^-) \left(\phi^m(\boldsymbol{y}^-, t) - \phi^m(\boldsymbol{y}^+, t) - \left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x}, t)\right) \mathrm{d}\partial\Omega^{m,-} \\
- \displaystyle\int_{\partial\Omega^{m,-}} \lambda(\boldsymbol{y}^-) \left(\delta\phi^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta\phi^m(\boldsymbol{y}^+)\right) \mathrm{d}\partial\Omega^{m,-}.
\end{cases} \tag{3.41}$$

En appliquant une intégration par parties aux termes appropriés de la forme faible (3.41) (voir Blanco *et al.* [23]), on obtient la forme forte suivante :

$$\begin{cases}
\dfrac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y}, t) + \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \left(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}, t)\phi^m(\boldsymbol{y}, t)\right) - \xi = 0, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \\
\dfrac{1}{|\Omega^m|} \displaystyle\int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y}, t)\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} = \phi^M(\boldsymbol{x}, t), & \\
\phi^m(\boldsymbol{y}^-, t) = \phi^m(\boldsymbol{y}^+, t) + (\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x}, t), & \forall\, \boldsymbol{y}^- \in \partial\Omega^{m,-}.
\end{cases} \tag{3.42}$$

On peut observer que le multiplicateur de Lagrange ξ s'interprète comme le terme source assurant le respect de la contrainte à la grande échelle au sein de l'équation d'advection locale de l'interface.

3.2.5 Transport et contrainte normale effectifs de l'interface grossière

Dans cette section, les grandeurs duales g^M et τ^M sont identifiées selon la procédure utilisée précédemment (voir sous-section 3.1.5).

3.2.5.1 Identification de g^M

Pour identifier le terme g^M lié à l'interface à la grande échelle, on part du système (3.41). En annulant toutes les variations sauf δr, on obtient :

$$g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta r = \xi\,\delta r, \quad \forall\,\delta r \in \mathbb{R} \quad \Longleftrightarrow \quad g^M(\boldsymbol{x},t) = \xi. \tag{3.43}$$

3.2.5.2 Identification de $\boldsymbol{\tau}^M$

Par analogie, le tenseur à la grande échelle $\boldsymbol{\tau}^M$ est identifié en annulant toutes les variations, à l'exception de $\delta\boldsymbol{s}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\delta\boldsymbol{s} &= \int_{\partial\Omega^{m,-}} \lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right)\cdot\delta\boldsymbol{s}\,\mathrm{d}s, \quad \forall\,\delta\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^d \\ \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{\tau}^M &= \int_{\partial\Omega^{m,-}} \lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right)\,\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-}. \end{aligned} \tag{3.44}$$

Dans ce cas, le scalaire g^M représente la contribution effective du transport de l'interface à grande échelle, tandis que le vecteur $\boldsymbol{\tau}^M$ caractérise le moment de grande échelle induit par l'imposition des conditions aux limites périodiques sur le VER.

On retient que le modèle d'ordre 1 avec fluctuation d'interface développé se caractérise par deux grandeurs effectives telles que :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) \tag{3.45}$$

$$\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = \int_{\partial\Omega^{m,-}} \lambda(\boldsymbol{y}^-)\left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right)\,\mathrm{d}\partial\Omega^{m,-}. \tag{3.46}$$

3.2.6 Conclusion

Dans cette section, nous avons développé un modèle multi-échelle de l'interface d'ordre un, fondé sur le principe des puissances virtuelles multi-échelle. Ce modèle a été établi en imposant des conditions aux limites périodiques sur les frontières opposées du VER. Le formalisme ainsi obtenu permet de prédire les phénomènes de transport et de diffusion de l'interface à grande échelle.

En revanche, il ne permet pas de transmettre la courbure de l'interface depuis la grande échelle vers l'échelle locale, car la relation d'insertion et les contraintes cinématiques associées ne dépendent pas des dérivées secondes. Par ailleurs, une difficulté sous-jacente réside dans la définition de ϕ^m, qui ne peut pas simultanément conserver sa propriété de fonction distance signée et satisfaire la condition de périodicité. Cette limitation altère la précision du calcul de la tension superficielle à petite échelle et motive pleinement l'extension de ce modèle vers une approche d'homogénéisation d'ordre 2. Une telle extension s'avère indispensable pour s'affranchir de ces verrous, assurer la transmission rigoureuse de la courbure et enrichir la description multi-échelle du comportement de l'interface.

3.3 Homogénéisation d'ordre deux

Dans le cadre de l'homogénéisation d'ordre 2, contrairement à celle d'ordre 1, nous prenons en compte le gradient second du champ de position de l'interface.

Dans une logique de couplage multi-échelle et de transmission des phénomènes entre les échelles, la figure 3.3 illustre ce couplage d'ordre supérieur.

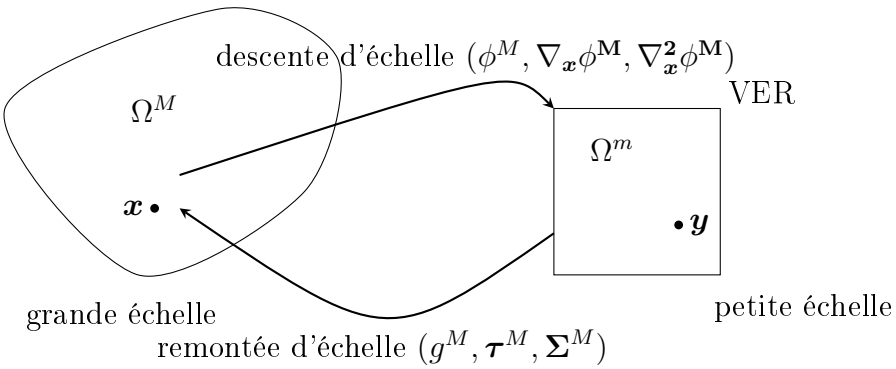


FIGURE 3.3 – Schéma du couplage entre les petites et grandes échelles. La descente d'échelle transmet les grandeurs cinématiques : la position ϕ^M, le gradient de position $\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^{\mathbf{M}}$ et le gradient de gradient de position $\nabla^{\mathbf{2}}_{\boldsymbol{x}}\phi^{\mathbf{M}}$. La remontée d'échelle fournit les grandeurs effectives : scalaire (g^M), vectorielle ($\boldsymbol{\tau}^M$) et tensorielle d'ordre 2 ($\boldsymbol{\Sigma}^M$).

En se référant à la figure 3.3, il apparaît clairement qu'une détermination supplémentaire des grandeurs duales est nécessaire, notamment celle de $\boldsymbol{\Sigma}^M$. Néanmoins, les expressions de $\mathbf{g}^M$ et de $\boldsymbol{\tau}^M$ se trouvent également modifiées, compte tenu de la nouvelle définition de la position de l'interface qui inclut désormais le gradient second. Les détails relatifs à chacune de ces grandeurs seront présentés dans la suite de ce manuscrit.

3.3.1 Hypothèses de modélisation

Les hypothèses fondamentales admises pour la construction du modèle d'ordre 2 de l'interface sont les suivantes :

- La taille caractéristique du VER (petite échelle) doit être petite devant celle du domaine macroscopique (grande échelle) ;

- L'origine du VER est choisie en son centre, ce qui conduit à la condition de centre de masse (ou de barycentre) nul :

$$\int_{\Omega^m} \boldsymbol{y}\, d\boldsymbol{y} = 0. \tag{3.47}$$

- Le moment géométrique d'ordre 2 est également centré, au sens où :

$$\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \mathbf{0}. \tag{3.48}$$

- La courbure est prise en compte à l'échelle de la fibre, ce qui implique l'introduction de dérivées d'ordre supérieur.

3.3.2 Modèle multi-échelle pour l'interface

Le problème à grande échelle s'écrit sous la forme variationnelle suivante : trouver ϕ^M tel que :

$$\int_{\Omega^M}\left(g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta\phi^M(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\delta\phi^M(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t) : \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\delta\phi^M(\boldsymbol{x})\right)d\boldsymbol{x} = 0, \tag{3.49}$$

$$\forall\delta\phi^M \in H^2(\Omega^M),$$

où l'espace fonctionnel $H^2(\Omega^M)$ est défini par :

$$H^2(\Omega^M) = \left\{ w^M \in L^2(\Omega^M) \;\middle|\; \nabla_{\boldsymbol{x}} w^M \in \left(L^2(\Omega^M)\right)^d,\ \nabla^2_{\boldsymbol{x}} w^M \in \left(L^2(\Omega^M)\right)^{d\times d} \right\},$$

$$\text{avec } L^2(\Omega^M) = \left\{ w^M : \Omega^M \to \mathbb{R} \;\middle|\; \int_{\Omega^M}\left(w^M(\boldsymbol{x})\right)^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} < +\infty \right\}.$$

Au-delà des grandeurs duales g^M et $\boldsymbol{\tau}^M$, déjà identifiées dans les sous-section 3.1.5 et sous-section 3.2.5, vient s'adjoindre une troisième grandeur d'ordre supérieur, notée $\boldsymbol{\Sigma}^M$. De plus, une condition d'insertion supplémentaire, détaillée dans la section suivante, devient nécessaire pour clore le problème.

3.3.3 Contraintes cinématiques et conditions d'insertion

La contrainte cinématique est définie, comme dans le cas de l'homogénéisation d'ordre 1, afin de garantir la validité de la description du phénomène physique entre les petites et grandes échelles. Les relations fondamentales associées à cette contrainte sur les champs s'écrivent ainsi :

$$\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.50a}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.50b}$$

$$\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\nabla^2_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.50c}$$

Ces contraintes (3.50) peuvent être satisfaites par :

$$\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) : (\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \mathbf{C})\,. \tag{3.51}$$

Où $\mathbf{C}$ est un tenseur symétrique du second ordre, constant et défini tel que :

$$\mathbf{C} = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.52}$$

À l'instar des sections 1 et 2, les trois contraintes associées aux relations (3.50) sont vérifiées en s'appuyant sur l'équation (3.2) et sur la propriété de centrage du moment géométrique d'ordre 2 donnée par la relation (3.48).

On peut montrer que la relation de localisation de ϕ^M, donnée par l'équation (3.51), conduit à l'expression suivante du gradient à petite échelle :

$$\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}. \tag{3.53}$$

En prenant ensuite la dérivée seconde par rapport à la variable de petite échelle $\boldsymbol{y}$ de l'équation (3.53), on obtient :

$$\nabla^2_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t) = \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \tag{3.54}$$

Cette relation (3.53) met en évidence une transmission directe de la dérivée seconde depuis la grande échelle vers la petite échelle. Elle permet ainsi d'évaluer la courbure locale de l'interface à petite échelle et, par conséquent, de calculer la tension de surface à cette même échelle à l'aide du modèle *Continuum Surface Force* (CSF) présenté au chapitre 1.

La condition d'admissibilité des champs de position de l'interface aux petites et grandes échelles est la suivante :

$$\phi^M \in H^2(\Omega^M) \quad \text{et} \quad \phi^m \in H^2(\Omega^m). \tag{3.55}$$

Les espaces fonctionnels de recherche de ces solutions sont définis par :

$$H^2(\Omega^M) = \left\{ w^M \in L^2(\Omega^M) \;\middle|\; \nabla_{\boldsymbol{x}} w^M \in \left(L^2(\Omega^M)\right)^d,\ \nabla^2_{\boldsymbol{x}} w^M \in \left(L^2(\Omega^M)\right)^{d\times d} \right\},$$

$$H^2(\Omega^m) = \left\{ w^m \in L^2(\Omega^m) \;\middle|\; \nabla_{\boldsymbol{y}} w^m \in \left(L^2(\Omega^m)\right)^d,\ \nabla^2_{\boldsymbol{y}} w^m \in \left(L^2(\Omega^m)\right)^{d\times d} \right\},$$

$$L^2(\Omega^m) = \left\{ w^m : \Omega^m \mapsto \mathbb{R} \;\middle|\; \int_{\Omega^m} w^m(\boldsymbol{y})^2\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} < +\infty \right\}.$$

3.3.4 Principe de puissance virtuelle multi-échelle

Le principe des puissances virtuelles multi-échelle garantit la conservation de l'énergie lors de la transition d'échelle. Afin de formuler ce principe, il est nécessaire de définir la puissance à chaque échelle. Ainsi, la puissance virtuelle en tout point de la grande échelle s'écrit sous la forme suivante :

$$P^M(\delta r, \delta\boldsymbol{s}, \delta\boldsymbol{q}) = g^M(\boldsymbol{x},t)\delta r + \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\delta\boldsymbol{s} + \boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t) : \delta\boldsymbol{q}, \tag{3.56}$$

où g^M est une grandeur scalaire, $\boldsymbol{\tau}^M$ une grandeur vectorielle et $\boldsymbol{\Sigma}^M$ une grandeur tensorielle d'ordre 2 supplémentaire.

La puissance virtuelle moyenne à petite échelle s'écrit :

$$P^m(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta \boldsymbol{q}) = \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \left(\frac{\partial \phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y}, t) + \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot (\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}, t)\, \phi^m(\boldsymbol{y}, t)) \right) \delta\phi^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}. \quad (3.57)$$

Dans cette expression, $\delta\phi^m$ désigne fonction test petite échelle, obtenu par la localisation des variations grande échelle :

$$\delta\phi^m(\boldsymbol{y}) = \delta r + \delta \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{y} + \frac{1}{2}\, \delta \boldsymbol{q} : (\boldsymbol{y} \otimes \boldsymbol{y} - \mathbf{C}), \quad (3.58)$$

pour tout triplet de variations virtuelles grande échelle $(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta \boldsymbol{q}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d\times d}$. L'espace $\mathbb{S}^{d\times d}$ désigne l'espace des tenseurs symétriques d'ordre deux, défini par :

$$\mathbb{S}^{d\times d} = \left\{ \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{d\times d} \;\middle|\; \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} \right\}. \quad (3.59)$$

En vertu du principe des puissances virtuelles multi-échelle, l'équivalence énergétique entre les deux échelles impose l'égalité des puissances virtuelles grande échelle et moyenne petite échelle pour tout champ virtuel admissible, soit :

$$P^M(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta \boldsymbol{q}) = P^m(\delta r, \delta \boldsymbol{s}, \delta \boldsymbol{q}). \quad (3.60)$$

Par conséquent, en substituant (3.58) dans (3.57) et en identifiant les termes associés à chaque variation indépendante δr, $\delta \boldsymbol{s}$ et $\delta \boldsymbol{q}$, on obtient les relations de fermeture suivantes :

$$\begin{aligned} &\mathbf{g}^M(\boldsymbol{x}, t)\, \delta r + \boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x}, t) \cdot \delta \boldsymbol{s} + \boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x}, t) : \delta \boldsymbol{q} \\ &\qquad = \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \left[\frac{\partial \phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y}, t) + \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \Big(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}, t)\, \phi^m(\boldsymbol{y}, t) \Big) \right] \delta\phi^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

À partir de la relation (3.60), les grandeurs duales g^M, $\boldsymbol{\tau}^M$ et $\boldsymbol{\Sigma}^M$ peuvent être identifiées par identification des coefficients associés à chaque variation virtuelle. Cela conduit naturellement à la détermination des termes de transport, de diffusion et de dispersion de l'interface.

3.3.5 Transport, diffusion et dispersion effectifs de l'interface grossière

Dans cette partie, nous procédons à l'identification des différents termes effectifs gouvernant l'évolution de l'interface, en nous servant de procédures analogues développées aux sous-section 3.1.5 et sous-section 3.2.5.

3.3.5.1 Transport effectif de l'interface à la grande échelle

Pour déterminer le terme décrivant le transport de l'interface, nous posons l'hypothèse que toutes les variations virtuelles grande échelle dans la relation (3.61) sont nulles, à

l'exception de δr (soit $\delta \boldsymbol{s} = \mathbf{0}$ et $\delta \boldsymbol{q} = \mathbf{0}$). La fonction test (3.58) se réduit alors à $\delta\phi^m(\boldsymbol{y}) = \delta r$. Par conséquent, l'équation de puissance virtuelle devient :

$$g^M(\boldsymbol{x},t)\delta r = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left(\frac{\partial \phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\left(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\phi^m(\boldsymbol{y},t)\right)\right)\delta r\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.62}$$

En injectant les expressions de la cinématique (3.51) et du gradient (3.53) dans l'équation précédente, puis en simplifiant par la variation arbitraire δr, on obtient :

$$\begin{aligned} g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \frac{1}{2}\frac{\partial \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) : \left[\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \mathbf{C})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right] \\ + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) \\ + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right) : \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \end{aligned} \tag{3.63}$$

Dans la relation (3.63), le terme $\frac{1}{2}\frac{\partial \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}$ représente le taux d'évolution de la courbure de l'interface. De plus, d'après l'analyse dimensionnelle, chacun des termes de cette relation s'apparente à un taux d'évolution de l'interface. Or, d'après la condition minimale d'admissibilité (définie par la relation (3.52)), l'intégrale du moment centré est identiquement nulle :

$$\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \mathbf{C})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = \mathbf{0}. \tag{3.64}$$

Cette propriété conduit directement à une première simplification de la relation (3.63) :

$$\begin{aligned} g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) \\ + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right) : \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \end{aligned} \tag{3.65}$$

Afin d'écrire cette équation sous une forme plus condensée, on introduit la vitesse grande échelle $\boldsymbol{v}^M$ ainsi que le tenseur des moments cinématiques d'ordre 2, noté $\mathsf{B}^{(2)}$, définis respectivement par :

$$\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.66}$$

$$\mathsf{B}^{(2)}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.67}$$

En substituant ces définitions dans (3.65), on en déduit la forme compacte suivante :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{B}^{(2)}(\boldsymbol{x},t) : \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \tag{3.68}$$

L'expression grande échelle de g^M fait ainsi apparaître la structure d'une équation d'advection classique de l'interface, analogue à la relation (2.12) établie au chapitre 1, enrichie d'un terme de moment d'ordre 2 couplé au gradient second de la position. Ce terme supplémentaire permet de prendre en compte les effets de localisation, les répartitions non uniformes de la vitesse à petite échelle ainsi que l'influence de la courbure locale de l'interface à grande échelle.

3.3.5.2 Diffusion effective de l'interface à la grande échelle

Pour déterminer les termes représentant la diffusion de l'interface, on suit une procédure analogue à celle utilisée pour le transport. À cet effet, nous posons l'hypothèse que toutes les variations virtuelles grande échelle dans la relation (3.60) sont nulles, à l'exception de $\delta\boldsymbol{s}$ (soit $\delta r = 0$ et $\delta\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}$). La fonction test (3.58) se réduit alors à $\delta\phi^m(\boldsymbol{y}) = \delta\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{y}$. On obtient ainsi :

$$\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\delta\boldsymbol{s} = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left[\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\Big(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\phi^m(\boldsymbol{y},t)\Big)\right]\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.69}$$

En injectant les expressions de la cinématique petite échelle (3.51) et du gradient (3.53) dans l'équation de puissance virtuelle associée à la diffusion, puis en simplifiant par la variation arbitraire $\delta\boldsymbol{s}$, on obtient :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = {}& \frac{\partial\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\\ &+\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ &+\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right):\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ &+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right):\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}.\end{aligned} \tag{3.70}$$

Dans la relation (3.70), le premier terme représente le produit contracté du tenseur géométrique d'ordre 2 avec le taux de variation temporelle du gradient de position de l'interface. Le deuxième terme correspond au produit contracté du tenseur des moments cinématiques d'ordre 2 avec ce même gradient. Le troisième terme exprime le produit doublement contracté du moment cinématique d'ordre 3 avec la dérivée seconde de la position de l'interface. Enfin, le dernier terme décrit le produit doublement contracté du moment géométrique d'ordre 3 avec le taux de variation temporelle de la courbure macroscopique.

D'après l'analyse dimensionnelle, $\boldsymbol{\tau}^M$ est une grandeur vectorielle résultant des interactions entre les moments (géométriques et cinématiques) à petite échelle et l'évolution temporelle de la morphologie de l'interface à grande échelle. Les moments d'ordre 3 intervenant dans l'expression de $\boldsymbol{\tau}^M$ sont définis par :

$$\mathsf{A}^{(3)} := \frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.71}$$

$$\mathsf{B}^{(3)} := \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\otimes\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.72}$$

où $\mathsf{A}^{(3)}$ désigne le moment géométrique d'ordre 3 et $\mathsf{B}^{(3)}$ représente un moment cinématique d'ordre 3, puisqu'il dépend explicitement du champ de vitesse à petite échelle. En substituant ces tenseurs ainsi que les définitions précédentes (3.52) et (3.67), l'expression

se réécrit sous la forme compacte suivante :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = &\frac{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot \boldsymbol{C}\\ &+ \mathsf{B}^{(2)}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ &+ \mathsf{B}^{(3)}:\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ &+ \frac{1}{2}\mathsf{A}^{(3)}:\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}.\end{aligned} \tag{3.73}$$

Cette formalisation grande-petite des moments assure une cohérence mathématique rigoureuse lors de l'implémentation numérique du modèle. À terme, l'ensemble de ces contributions permet de modéliser finement les phénomènes de diffusion de bulles au sein du procédé.

3.3.5.3 Dispersion effective de l'interface à la grande échelle

La détermination des termes décrivant la dispersion de l'interface repose sur une démarche similaire à celle développée pour le transport et la diffusion. Par analogie avec les étapes précédentes, nous supposons que les variations grande échelle δr et $\delta\boldsymbol{s}$ sont nulles. La fonction test définie par la relation (3.58) se réduit alors à :

$$\delta\phi^m(\boldsymbol{y}) = \frac{1}{2}\,\delta\boldsymbol{q} : (\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \mathbf{C})\,. \tag{3.74}$$

En exploitant l'expression de la puissance virtuelle multi-échelle introduite à la relation (3.60), on obtient l'égalité suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t):\delta\boldsymbol{q} = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\left[\frac{\partial\phi^m}{\partial t}(\boldsymbol{y},t) + \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\phi^m(\boldsymbol{y},t))\right]\delta\phi^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.75}$$

En suivant une démarche analogue aux étapes précédentes, on injecte les approximations cinématiques (3.51) et (3.53) dans (3.75). Après simplification par le tenseur de variation arbitraire $\delta\boldsymbol{q}$, l'expression du tenseur des contraintes grande échelle se déduit sous la forme :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t) = &\frac{\partial\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot\left(\frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\\ &+\left(\frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right):\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}\\ &+\left(\frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ &+\left(\frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\otimes\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right):\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t).\end{aligned} \tag{3.76}$$

D'après l'analyse dimensionnelle, la grandeur $\boldsymbol{\Sigma}^M$ est un tenseur d'ordre 2. Elle fait intervenir les moments géométriques et cinématiques d'ordres 3 et 4, qui sont tous symétriques et définis positifs. Afin d'introduire ces différents moments, nous adoptons les

notations suivantes :

$$\mathsf{D}^{(3)} := \frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes\boldsymbol{y}\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.77}$$

$$\mathsf{D}^{(4)} := \frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.78}$$

$$\mathsf{E}^{(3)}(\boldsymbol{x},t) := \frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}, \tag{3.79}$$

$$\mathsf{E}^{(4)}(\boldsymbol{x},t) := \frac{1}{2|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\otimes(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\otimes\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{3.80}$$

À partir de ces définitions, nous observons que $\mathsf{D}^{(3)}$ et $\mathsf{D}^{(4)}$ représentent respectivement les moments géométriques centrés d'ordres 3 et 4 du volume élémentaire représentatif. En revanche, $\mathsf{E}^{(3)}$ et $\mathsf{E}^{(4)}$ correspondent à des moments cinématiques d'ordres 3 et 4, puisqu'ils dépendent explicitement du champ de vitesse à petite échelle.

Sur le plan physique, les moments géométriques sont couplés aux variations temporelles du gradient et de la courbure grande échelle de l'interface, traduisant ainsi un effet d'accélération cinématique à grande échelle. De même, les moments cinématiques, pondérés par les gradients spatiaux premiers et seconds du champ de l'interface, décrivent le transport à petite échelle ainsi que le couplage intrinsèque à grande échelle sur la grandeur duale $\boldsymbol{\Sigma}^M$.

En substituant ces tenseurs de moments, l'expression de la grandeur duale grande échelle $\boldsymbol{\Sigma}^M$ se réécrit sous la forme compacte suivante :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t) = \mathsf{D}^{(3)}\cdot\frac{\partial\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{D}^{(4)}:\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\\ + \mathsf{E}^{(3)}(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{E}^{(4)}(\boldsymbol{x},t):\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t).\end{aligned} \tag{3.81}$$

On retient que le modèle d'ordre 2 sans fluctuation d'interface développé se caractérise par trois grandeurs effectives telles que :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{B}^{(2)}(\boldsymbol{x},t):\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t), \tag{3.82}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{C}\\ + \mathsf{B}^{(2)}\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ + \mathsf{B}^{(3)}:\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ + \frac{1}{2}\mathsf{A}^{(3)}:\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t),\end{aligned} \tag{3.83}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}^M(\boldsymbol{x},t) = \mathsf{D}^{(3)}\cdot\frac{\partial\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{D}^{(4)}:\frac{\partial\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t)\\ + \mathsf{E}^{(3)}(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) + \mathsf{E}^{(4)}(\boldsymbol{x},t):\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t).\end{aligned} \tag{3.84}$$

Compte tenu de la complexité du modèle d'ordre 2, comme on peut le constater dans les relations (3.82), (3.83) et (3.84), nous allons présenter dans la sous-section suivante la réduction du modèle d'ordre 2 et nous concentrer sur la grandeur duale g^M.

3.3.6 Réduction du modèle d'ordre 2 et méthode level-set

D'après la présentation faite au chapitre 1, la méthode des lignes de niveau (*Level-set*) est une technique numérique de suivi d'interface entre deux phases au cours d'un écoulement diphasique. Jusqu'à présent et à notre connaissance, cette méthode n'a été employée que dans un cadre mono-échelle. Dans cette sous-section, nous proposons de l'étendre à l'approche multi-échelle, en définissant la position de l'interface à grande échelle directement par une fonction distance signée telle que :

$$\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \begin{cases} +\mathrm{d}(\boldsymbol{x},\Gamma^M_{1,2}(t)), & \boldsymbol{x}\in\Omega^M_1(t),\\ -\mathrm{d}(\boldsymbol{x},\Gamma^M_{1,2}(t)), & \boldsymbol{x}\in\Omega^M_2(t),\\ 0, & \boldsymbol{x}\in\Gamma^M_{1,2}(t), \end{cases} \tag{3.85}$$

où +d et -d désignent les distances signées, permettant d'identifier la phase dense par un signe positif et la phase moins dense par un signe négatif. L'interface est ensuite représentée implicitement par l'isovaleur 0.

En tenant compte de cette hypothèse, nous procédons à la simplification du modèle développé à la section 3.3, plus précisément dans le sous-sous-section 3.3.5.1, en ne conservant que l'expression de g^M. Cela nous permettra de nous concentrer sur la prédiction des phénomènes de migration des bulles au sein de la structure composite, tant à petite échelle qu'à grande échelle. À cet effet, la formulation variationnelle multi-échelle du modèle (3.49) devient :

$$\int_{\Omega^M} g^M(\boldsymbol{x},t)\,\delta\phi^M(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} = 0, \tag{3.86}$$

$$\forall\delta\phi^M \in L^2(\Omega^M).$$

L'équation de transport déduite de la simplification du modèle multi-échelle d'ordre 2 s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^M = \frac{\partial\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\Omega^m\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\\ + \mathsf{B}^{(2)} : \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t). \end{aligned} \tag{3.87}$$

Dans cette expression, on reconnaît la présence du tenseur $\mathsf{B}^{(2)}$ au sein du troisième terme, qui correspond au moment cinématique d'ordre 2 du VER. Cependant, la présence du moment géométrique doublement contracté avec la courbure grande échelle du champ de l'interface dans l'équation (3.87) peut engendrer des instabilités numériques. Afin de contourner cette difficulté, le modèle est simplifié en ne conservant que la contribution convective, ce qui conduit à une équation d'advection classique pour l'interface, plus stable et analogue aux approches directes :

$$\mathbf{g}^M = \frac{\partial\phi^M}{\partial t} + \boldsymbol{v}^M\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M. \tag{3.88}$$

La relation (3.88) représente ainsi l'équation de transport de l'interface à grande échelle, dans laquelle intervient la vitesse grande échelle de l'écoulement issue de la résolution du problème de Stokes. Cette équation sera ensuite couplée au problème d'écoulement au sein de chacune des phases, afin de prédire l'écoulement diphasique multi-échelle en milieu poreux.

3.3.7 Conclusion

L'homogénéisation d'ordre 2 a été abordée dans cette sous-section. Dans une première partie, nous avons développé un modèle multi-échelle de l'interface entre les phases, intégrant les effets de transport, de diffusion et de dispersion. L'analyse de ces différentes contributions a permis de mettre en évidence les moments géométriques d'ordres 2, 3 et 4, ainsi que les moments cinématiques des mêmes ordres, ces derniers dépendant explicitement du champ de vitesse à petite échelle.

Dans une seconde partie, une simplification du modèle d'ordre 2 a été proposée. Elle consiste à ne retenir que la composante de transport afin de prédire les phénomènes gouvernés par la tension de surface et la migration des bulles au sein du milieu poreux.

Bien que l'élimination des termes d'ordre supérieur assure la stabilité numérique du modèle Level-set, elle supprime les effets de dispersion géométrique induits par la microstructure. Dans le cadre du procédé RTM, cette simplification revient à faire abstraction de l'effet de fortes courbures sur la cinématique du front, ce qui peut conduire à une sous-estimation du taux de piégeage des micro-porosités au sein des renforts fibreux.

3.4 Analyse comparative des modèles et choix du modèle retenu

Trois modèles multi-échelles de l'interface ont été développés dans ce travail : (i) le modèle d'homogénéisation d'ordre 1 sans fluctuation, (ii) le modèle d'homogénéisation d'ordre 1 avec fluctuation, et (iii) le modèle d'homogénéisation d'ordre 2 sans fluctuation. Le premier modèle développé correspond à un modèle d'ordre 1 établi à partir de l'homogénéisation de l'équation d'advection sans fluctuation, fondé sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle de Hill-Mandel [23]. Ce modèle permet de prédire le transport et la diffusion de l'interface pour des géométries d'interface planes, conformément à la définition de la position de l'interface à la petite échelle donnée par la relation (3.6). Cependant, il présente des limites pour les phénomènes complexes impliquant la courbure de l'interface. En effet, l'absence de fluctuation et de transfert des dérivées secondes entre les deux échelles empêche le calcul de l'effet capillaire à la petite échelle, rendant ce modèle inadapté à la prédiction d'écoulements diphasiques réels.

Le deuxième modèle développé est également un modèle d'ordre 1, mais cette fois établi à partir de l'homogénéisation avec fluctuation de l'équation d'advection, toujours fondé sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle de Hill-Mandel. Des conditions aux limites périodiques sont imposées sur le champ de fluctuation de la position de l'interface à l'échelle du VER. Ce modèle permet de prédire le transport et la diffusion de l'interface à la grande échelle, tout en intégrant un moment d'ordre deux de l'interface à la petite échelle, conformément à la relation de la grandeur duale $\boldsymbol{\tau}^M$. Il rend ainsi

possible le calcul de l'effet capillaire et la prédiction d'écoulements diphasiques dans les milieux poreux à la petite échelle, contrairement au modèle d'ordre 1 sans fluctuation. Néanmoins, il demeure limité pour les phénomènes présentant des courbures à la grande échelle, puisque les dérivées secondes ne sont pas transmises de la grande échelle vers la petite échelle.

Le troisième modèle développé est un modèle d'ordre 2 obtenu à partir de l'homogénéisation d'ordre 2 de l'équation d'advection. Ce modèle permet de décrire les phénomènes de transport, de diffusion et de dispersion à la grande échelle. Il transmet les dérivées secondes du champ de l'interface de la grande échelle vers la petite, selon les grandeurs duales (g^M, $\boldsymbol{\tau}^M$, $\boldsymbol{\Sigma}^M$) identifiées dans ce cadre. Il permet ainsi de déterminer la courbure de l'interface à la petite échelle, indispensable pour l'effet capillaire et de prédire de manière cohérente l'écoulement diphasique multi-échelle dans les milieux poreux où les bulles sont de grande tailles par rapport aux fibres. Néanmoins, ce modèle complet demeure complexe en raison du grand nombre de termes qu'il comporte, notamment les moments géométriques d'ordre élevé, rendant difficiles l'analyse et l'interprétation physique des phénomènes associés à la morphologie de l'interface.

Par ailleurs, une simplification de ce modèle a également été proposée, conduisant à une équation d'advection classique de l'interface à grande échelle, conformément à la relation (3.88). Cette version simplifiée devrait conserver la capacité de prédire les écoulements diphasiques, tout en assurant la transmission de la courbure de l'interface entre les deux échelles. En revanche, elle ne permettrait pas de représenter les effets de diffusion et de dispersion de l'interface.

Le modèle d'ordre 2 simplifié, conduisant à une équation d'advection classique de l'interface, présente quant à lui plusieurs avantages. Il facilite la comparaison des résultats avec ceux issus des simulations mono-échelles, permettant ainsi une validation plus aisée du modèle multi-échelle. De plus, la forme simplifiée de l'équation d'advection devrait rendre possible la stabilisation numérique du terme de transport à l'aide d'une méthode de stabilisation résiduelle, telle que la *Residual-Based Variational Multiscale* (RBVMS).

Compte tenu de ces avantages, le modèle d'ordre 2 simplifié a été retenu pour la suite de cette étude, afin d'être couplé avec les équations d'écoulement.

Conclusion

Ce chapitre a été consacré au développement de trois modèles multi-échelles de l'interface, fondés sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle. Ces modèles ont été établis à partir de l'homogénéisation de l'équation d'advection, aux ordres 1 et 2.

Afin d'éviter les problèmes de stabilisation liés aux termes contenant des dérivées d'ordre supérieur, le modèle multi-échelle a été simplifié en ne conservant que la composante de transport classique de l'interface. Au regard de ses avantages, le modèle d'ordre 2 simplifié a été retenu pour la suite de l'étude. Il sera ensuite couplé au modèle multi-échelle d'écoulement en milieu poreux développé par Shakoor et Park [142, 143], afin d'établir un cadre cohérent pour la modélisation multi-échelle des écoulements

diphasiques en milieux poreux.

Dans la suite du manuscrit, deux chapitres seront consacrés à l'utilisation de ce modèle multi-échelle pour la simulation des phénomènes d'écoulement diphasique en milieu poreux. Pour atteindre cet objectif, il sera tout d'abord nécessaire de discrétiser le modèle à l'aide de la méthode des éléments finis, ce qui constitue un préalable indispensable à sa mise en œuvre numérique.

Chapitre 4

Modélisation multi-échelle de l'effet capillaire

Contents

Introduction 94
4.1 Modèle multi-échelle diphasique 94
4.1.1 Cinématique multi-échelle 95
4.1.2 Principe de puissance virtuelle multi-échelle 97
4.1.3 Problème de petite échelle 100
4.1.4 Identification des grandeurs duales de la grande échelle 103
4.2 Méthodes numériques multi-échelles 105
4.2.1 Problème de petite échelle 105
4.2.2 Problème de grande échelle 107
4.2.3 Réinitialisation de la fonction Level-Set 110
4.3 Résultats et discussions 111
4.3.1 Problème de bulle statique dans un milieu fluide 111
4.3.2 Problème de bulle statique dans un milieu poreux 116
4.3.3 Transition d'une bulle carrée vers une bulle circulaire 120
4.3.4 Application aux composites à renforts en fibres de carbone . . 127
Conclusion 134

Introduction

La modélisation directe des fibres dans un milieu où deux fluides immiscibles et incompressibles s'écoulent simultanément, combinée à une discrétisation par éléments finis, constitue une problématique particulièrement coûteuse en temps de calcul. Par ailleurs, les modèles existants [2, 118, 119] permettant de prédire la migration de bulles dans les applications composites restent largement empiriques. L'ensemble de ces limitations rend nécessaire le recours à une approche multi-échelle, capable de séparer l'échelle du moule de celle des fibres tout en réduisant le coût numérique. En particulier, nous avons développé au chapitre 2 un modèle prédictif de suivi de l'interface entre la phase liquide et la phase air, de la petite échelle jusqu'à la grande échelle, à partir du principe de puissance virtuelle multi-échelle.

Dans la littérature, la méthode $EF \times EF$ constitue une approche de modélisation multi-échelle qui réalise un couplage concurrent entre des analyses par éléments finis à la grande échelle et à la petite échelle, permettant ainsi de simuler des matériaux hétérogènes tout en réduisant le coût de calcul [155]. Contrairement aux approches traditionnelles, l'analyse par éléments finis menée à la grande échelle ne nécessite pas de lois constitutives préalablement homogénéisées : celles-ci sont directement déterminées à partir des simulations effectuées sur le volume élémentaire représentatif (VER) de petite échelle. Cette propriété est particulièrement avantageuse pour la mécanique des composites, où les caractéristiques de petite échelle peuvent être transférées de manière cohérente vers la grande échelle et confrontées aux résultats expérimentaux [125].

La méthode $EF \times EF$ a été employée avec succès dans divers cadres, notamment pour le couplage de problèmes en mécanique des matériaux, ainsi que pour des phénomènes multiphysiques tels que l'échauffement Joule dans des matériaux multi-échelles [105]. Toutefois, à notre connaissance, cette stratégie n'a pas encore été étendue à la méthode Level-Set et au suivi multi-échelle des interfaces. En parallèle, les travaux de Shakoor et Park [142, 143] ont démontré l'efficacité de l'homogénéisation fondée sur le principe de puissance virtuelle multi-échelle, couplée à une stratégie $EF \times EF$, pour la modélisation d'écoulements monophasiques en milieux poreux. Cependant, aucune étude n'a encore appliqué ce cadre théorique afin de développer un modèle multi-échelle prédictif pour un écoulement diphasique en milieu poreux. Dans ce chapitre, nous nous baserons sur le modèle multi-échelle d'interface développé au Chapitre 2, que nous combinerons avec les travaux de Shakoor et Park mentionnés ci-dessus, afin de construire un modèle multi-échelle diphasique adapté aux milieux fibreux, tout en conservant la stratégie de couplage entre les échelles.

4.1 Modèle multi-échelle diphasique

En continuité avec les développements présentés au Chapitre 1 (sous-section 2.4.1), la forme forte du modèle multi-échelle diphasique à la grande échelle est établie en couplant

la relation (2.61) avec l'équation de transport de l'interface. On peut l'écrire ainsi :

$$\begin{cases} \boldsymbol{f}^M(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} p^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{v}_D^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_D^M, \\ \left(\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) - p^M(\boldsymbol{x})\mathbf{I}\right) \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{t}_N^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_N^M, \\ \dfrac{\partial \phi^M}{\partial t} + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi^M = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M. \end{cases} \tag{4.1}$$

où la dernière équation du système représente l'équation de transport de l'interface, déterminée au Chapitre 2.

Le modèle multi-échelle diphasique, écrit sous sa forme faible à la grande échelle, a pour but de déterminer les champs $\boldsymbol{v}^M(\cdot,t) \in V^M(t)$, $p^M(\cdot,t) \in L^2(\Omega^M)$ et $\phi^M \in H^1(\Omega^M)$:

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega^M} \left(\boldsymbol{f}^M(\boldsymbol{x},t) \cdot \delta\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x},t) : \nabla_{\boldsymbol{x}} \delta\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\right) d\boldsymbol{x} \\ \displaystyle\int_{\Omega^M} \left(-p^M(\boldsymbol{x}) \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \delta\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) - \delta p^M(\boldsymbol{x}) \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\right) d\boldsymbol{x} \\ = \displaystyle\int_{\Gamma_N^M} \boldsymbol{t}^M(\boldsymbol{x},t) \cdot \delta\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\ \displaystyle\int_{\Omega^M} \left(\frac{\partial \phi^M(\boldsymbol{x})}{\partial t} + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi^M(\boldsymbol{x})\right) \delta\phi^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = 0 \end{cases} \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned} &\forall \delta\boldsymbol{v}^M \in V^M, \\ &\forall \delta p^M \in L^2(\Omega^M), \\ &\forall \delta\phi^M \in L^2(\Omega^M). \end{aligned}$$

L'approche multi-échelle dédiée au transport de l'interface a été présentée en détail à la Section 2.3. Quant à l'approche multi-échelle pour l'écoulement, elle s'appuie sur les travaux de [142, 143], avec une modification apportée dans ce travail afin d'améliorer la convergence du solveur de Stokes multi-échelle appliqué aux écoulements diphasiques. Cette amélioration, particulièrement nécessaire dans les configurations présentant un fort contraste de viscosité entre les phases, consiste à imposer des conditions aux limites périodiques à la petite échelle.

4.1.1 Cinématique multi-échelle et conditions aux limites périodiques pour l'écoulement

Comme proposé dans le Chapitre 2, nous supposons que l'origine du système de coordonnées du VER, correspondant à un point $\boldsymbol{x}$ de la grande échelle, est située au centre géométrique du domaine de la petite échelle Ω^m, c'est-à-dire :

$$\int_{\Omega^m} \boldsymbol{y}\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} = 0. \tag{4.3}$$

4.1.1.1 Champ de vitesse

La moyenne volumique du vecteur vitesse d'écoulement sur le domaine de la petite échelle est imposée égale à la vitesse au point correspondant de la grande échelle :

$$\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{4.4}$$

Par extension, cette condition cinématique s'applique également au gradient de vitesse :

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}. \tag{4.5}$$

Ces deux exigences sont satisfaites en adoptant la décomposition suivante pour le champ de vitesse local :

$$\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y} + \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y},t), \tag{4.6}$$

où $\tilde{\boldsymbol{v}}$ désigne la fluctuation de vitesse à la petite échelle.

Introduisons explicitement le terme de fluctuation du champ de vitesse, noté $\tilde{\boldsymbol{v}}$, reliant la solution de la petite échelle à celle de la grande échelle. Ce terme est ensuite utilisé pour formuler et imposer une condition aux limites périodique sur les bords du VER, garantissant ainsi la cohérence de l'homogénéisation et une meilleure transmission des informations entre les deux échelles. Mathématiquement, cette condition de périodicité s'écrit :

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+) = \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-), \qquad \forall\, \boldsymbol{y}^+ \in \Gamma^{m,+},\ \boldsymbol{y}^- \in \Gamma^{m,-}, \tag{4.7}$$

où $\Gamma^{m,+} = \Gamma_{\mathrm{D}} \cup \Gamma_{\mathrm{H}}$ et $\Gamma^{m,-} = \Gamma_{\mathrm{G}} \cup \Gamma_{\mathrm{B}}$ désignent les bords opposés du VER (respectivement en bleu et en noir), tels qu'illustrés sur la figure 4.1.

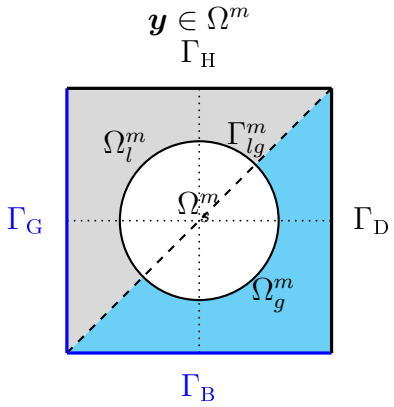


FIGURE 4.1 – Représentation du VER triphasique avec interface liquide-gaz courbe (Γ_{lg}^m) et frontières périodiques associées ($\Gamma_{\mathrm{B}} \equiv \Gamma_{\mathrm{H}}$ et $\Gamma_{\mathrm{G}} \equiv \Gamma_{\mathrm{D}}$).

Nous utilisons la méthode des multiplicateurs de Lagrange pour imposer cette contrainte de bord, tout en garantissant un calcul fiable des grandeurs effectives, telles que $\boldsymbol{f}^M$ et $\boldsymbol{\sigma}^{M,dev}$.
D'après la relation (4.6), la fluctuation doit satisfaire une condition de moyenne nulle dans le VER :

$$\int_{\Omega^m} \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = 0, \tag{4.8}$$

ce qui est essentiel pour assurer la cohérence du procédé d'homogénéisation. Comme démontré pour l'interface dans la Section 3.2, cette condition est satisfaite avec des conditions aux limites périodiques.

4.1.1.2 Champ de distance signée

Une démarche analogue est requise pour le traitement multi-échelle du champ de distance signée (Level-Set). Ce cas ayant été largement détaillé au Chapitre 2, le lecteur est invité à se référer aux équations (3.50), (3.51) et (3.53) pour la définition précise des contraintes cinématiques qui lui sont associées. Cela permet d'éviter toute redondance et de se concentrer ici sur le couplage de l'écoulement.

4.1.2 Principe de puissance virtuelle multi-échelle

Dans le cadre de la modélisation multi-échelle d'un écoulement diphasique, le principe des puissances virtuelles s'applique tant à la résolution des champs de vitesse et de pression qu'à l'évolution de l'interface au sein du domaine d'étude. Toutefois, la présente section se concentre sur la résolution des champs de vitesse et de pression, afin de mettre en lumière les modifications apportées au modèle initial de Shakoor et Park [142, 143]. Le traitement de l'interface, quant à lui, est détaillé au Chapitre 2, consacré au développement du modèle multi-échelle d'interface.

Afin de faciliter la comparaison, nous conservons le formalisme et les notations du modèle de référence. Ainsi, la puissance virtuelle en un point de la grande échelle s'écrit :

$$\begin{aligned} P^M(\delta\boldsymbol{V}^M, \delta\boldsymbol{G}^M, \delta p^M) = \boldsymbol{f}^M \cdot \delta\boldsymbol{V}^M + \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} : \delta\boldsymbol{G}^M - p^M \,\mathrm{tr}(\delta\boldsymbol{G}^M) \\ - \delta p^M \,\nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M, \\ \forall\, (\delta\boldsymbol{V}^M, \delta\boldsymbol{G}^M, \delta p^M) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}. \end{aligned}$$

La puissance virtuelle moyenne à la petite échelle, pour un écoulement de Stokes de deux fluides immiscibles, incompressibles et newtoniens, incluant les forces de tension de

surface ($\boldsymbol{f}_s^m$), s'écrit :

$$
\begin{aligned}
P^m(\delta\boldsymbol{V}^M, \delta\boldsymbol{G}^M, \delta\boldsymbol{v}^m, \delta p^m, \delta\boldsymbol{\alpha}, \delta\boldsymbol{\beta}) = \\
&\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\Big[2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\,\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) : \nabla_{\boldsymbol{y}}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) \\
&- p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) - \delta p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\Big]\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&- \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{f}_s^m(\boldsymbol{y})\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&- \delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\right) \\
&- \int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\big(\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+)\big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^- \\
&- \boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta\boldsymbol{V}^M\right) \\
&- \int_{\partial\Omega^{m,-}}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\big(\delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+)\big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-. \qquad (4.9)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\forall\,(\delta\boldsymbol{V}^M, \delta\boldsymbol{G}^M) \in \mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d, \\
\forall\,(\delta\boldsymbol{v}^m, \delta p^m) \in \mathcal{V}^m\times L^2(\Omega^m), \\
\forall\,(\delta\boldsymbol{\alpha}, \delta\boldsymbol{\beta}) \in \mathbb{R}^d\times\left(H^{-1/2}(\partial\Omega^m)\right)^d.
\end{aligned}
$$

Dans la relation (4.9), le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\alpha}$ est associé à la contrainte de moyenne sur le champ de vitesse grande échelle, tandis que $\boldsymbol{\beta}$ est introduit pour imposer les conditions aux limites périodiques. La contribution majeure de ce travail par rapport au modèle initial de Shakoor et Park [142] réside précisément dans la nature de cette dernière contrainte. En effet, dans leur formulation monophasique, $\boldsymbol{\beta}$ correspondait à un multiplicateur associé à une contrainte sur le gradient moyen du champ de vitesse, et non à une condition de périodicité. Les autres multiplicateurs (p^m, p^M et $\boldsymbol{\alpha}$) conservent quant à eux le même sens physique que dans le modèle de référence.

Ainsi, en appliquant le principe des puissances virtuelles selon la démarche présentée

au Chapitre 2, nous obtenons l'égalité suivante entre les petites et grandes échelles :

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{f}^M \cdot \delta\boldsymbol{V}^M + \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} : \delta\boldsymbol{G}^M - p^M \operatorname{tr}(\delta\boldsymbol{G}^M) \\
&\qquad = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \Big[2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) : \nabla_{\boldsymbol{y}}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) \\
&\qquad\quad - p^m(\boldsymbol{y})\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) - \delta p^m(\boldsymbol{y})\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\Big]\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&\qquad - \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}^m(\boldsymbol{y})\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&\qquad - \delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\right) \\
&\qquad - \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\partial\Omega^{m,-}} \delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\big(\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) - \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+)\big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^- \\
&\qquad - \boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta\boldsymbol{V}^M\right) \\
&\qquad - \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\big(\delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+)\big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Afin de traiter la condition de périodicité ainsi introduite sur la frontière du VER, nous adoptons une approche par « image-miroir » (voir par exemple [83, 154]) pour le VER hétérogène représenté sur la figure 4.1. Cette construction, qui s'appuie sur la décomposition (4.6), permet de définir le champ de vitesse sur les bords $\partial\Omega^{m,-}$ et $\partial\Omega^{m,-}$. Ainsi, sur la frontière négative $\partial\Omega^{m,-}$, le champ de fluctuation locale de la vitesse s'exprime par :

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-,t) = \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) - \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}^-, \tag{4.11}$$

tandis que sur le bord positif opposé $\partial\Omega^{m,+}$, il s'écrit :

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+,t) = \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+,t) - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) - \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}^+. \tag{4.12}$$

Par soustraction, on en déduit la différence des fluctuations aux bords périodiques :

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-,t) - \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+,t) = \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+,t) - \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+). \tag{4.13}$$

De manière analogue, la variation virtuelle de ce champ de fluctuation est donnée par :

$$\delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) - \delta\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+) = \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+) - \delta\boldsymbol{G}^M\cdot(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+). \tag{4.14}$$

En injectant les relations (4.13) et (4.14) dans l'expression du principe des puissances

virtuelles grande échelle (4.10), on obtient la forme équivalente suivante :

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{f}^M \cdot \delta\boldsymbol{V}^M + \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} : \delta\boldsymbol{G}^M - p^M \operatorname{tr}(\delta\boldsymbol{G}^M) \\
&\qquad = \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \Big[2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\, \nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) : \nabla_{\boldsymbol{y}} \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) \\
&\qquad\qquad - p^m(\boldsymbol{y})\, \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) - \delta p^m(\boldsymbol{y})\, \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) \Big] \mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&\qquad\quad - \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}^m(\boldsymbol{y}) \cdot \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&\qquad\quad - \delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) \right) \\
&\qquad\quad - \int_{\partial\Omega^{m,-}} \delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \cdot \Big(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+,t) - \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) \cdot (\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+) \Big) \mathrm{d}\boldsymbol{y}^- \\
&\qquad\quad - \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\, \mathrm{d}\boldsymbol{y} - \delta\boldsymbol{V}^M \right) \\
&\qquad\quad - \int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \cdot \Big(\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+) - \delta\boldsymbol{G}^M \cdot (\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+) \Big) \mathrm{d}\boldsymbol{y}^- . \qquad (4.15)
\end{aligned}
$$

Puisque cette égalité doit être vérifiée pour tous champs de variations virtuelles ($\delta\boldsymbol{v}^m$, δp^m, $\delta\boldsymbol{V}^M$, $\delta\boldsymbol{G}^M$, $\delta\boldsymbol{\alpha}$ et $\delta\boldsymbol{\beta}$) admissibles et indépendants, l'annulation de chaque contribution permet d'une part de localiser le problème aux limites diphasique à résoudre à la petite-échelle, et d'autre part d'identifier les définitions des grandeurs duales grande échelle intervenant dans l'équation de quantité de mouvement globale (4.2).

4.1.3 Problème de petite échelle

Pour résoudre le problème d'écoulement diphasique au sein du VER, nous considérons dans un premier temps que les variations virtuelles macroscopiques ($\delta\boldsymbol{V}^M$, δp^M et $\delta\boldsymbol{G}^M$) sont nulles, afin d'isoler les contributions à la petite échelle. Le problème local consiste alors à déterminer les champs petite échelle et les multiplicateurs de Lagrange associés, soit $(\boldsymbol{v}^m(\cdot,t),\, p^m,\, \boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{\beta}(\cdot)) \in \mathcal{V}^m \times L^2(\Omega^m) \times \mathbb{R}^d \times \left(H^{-1/2}(\partial\Omega^{m,-})\right)^d$, pour des grandeurs

à la grande échelle données $\left(\boldsymbol{v}^M(\cdot,t),\, p^M\right) \in \mathcal{V}^M \times L^2(\Omega^M)$, tels que :

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\Big[2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\,\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) : \nabla_{\boldsymbol{y}}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) \\
&\qquad - p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}) - \delta p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\Big]\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\
&- \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{f_s}^m(\boldsymbol{y})\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} = 0 \\
&- \delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\right) \\
&- \int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\Big(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-,t) - \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+,t) - (\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\Big)\,d\boldsymbol{y}^- \\
&- \boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right) \\
&- \int_{\partial\Omega^{m,-}}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\Big(\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+)\Big)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-.
\end{aligned}
\right. \tag{4.16}
$$

En appliquant une intégration par parties à la relation (4.16), on obtient la forme forte du système d'équations sans multiplicateur de Lagrange pour les conditions aux limites périodiques. Ce système, résolu dans chaque VER pour le problème d'écoulement dans chacune des phases à l'aide de la méthode des éléments finis, s'écrit sous la forme suivante :

$$
\left\{
\begin{aligned}
-\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\big(2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\big) + \nabla_{\boldsymbol{y}}p^m(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{f}_s^m(\boldsymbol{y}) &= 0, \qquad \forall\,\boldsymbol{y}\in\Omega^m, \\
\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) &= 0, \qquad \forall\,\boldsymbol{y}\in\Gamma_O^m, \\
\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) &= \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+), \qquad \forall\,\boldsymbol{y}^-\in\partial\Omega^{m,-}, \\
\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) &= 0, \qquad \forall\,\boldsymbol{y}\in\Omega^m, \\
\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,d\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t), \\
\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\nabla_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,d\boldsymbol{y} &= \nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t).
\end{aligned}
\right. \tag{4.17}
$$

À ce stade, il est important d'analyser les grandeurs duales introduites dans le système (4.17). En effet, le terme $\boldsymbol{\alpha}$ représente la force volumique de grande échelle, tandis que $\boldsymbol{\beta}$ correspond au champ associé à la condition aux limites périodique. Un traitement spécifique est donc nécessaire afin d'obtenir l'équivalent du tenseur déviatorique, suivant l'approche proposée par Shakoor et Park [142].

En outre, la force de tension de surface $\mathbf{f}_s^m$ incluse dans le bilan de quantité de mouvement est définie, suite aux formulations introduites dans les paragraphe 2.1.4.2.1 et paragraphe 2.1.4.2.1 du Chapitre 1, par :

$$
\mathbf{f}_s^m(\boldsymbol{y}) = \sigma_s\,\kappa_s(\phi^m)\,\nabla H_\varepsilon(\phi^m). \tag{4.18}
$$

Étant donné que cette force $\mathbf{f}_s^m$ dépend elle-même de la courbure de l'interface κ_s, il est indispensable de préciser la manière dont la fonction *level-set* est initialisée ainsi que la façon dont la courbure en est déduite d'après paragraphe 2.1.4.2.1. Ces deux éléments sont évalués à partir de la définition locale de l'interface à la petite échelle.

En effet, au Chapitre 2, il a été démontré que le problème d'interface à la petite échelle, au second ordre, est défini par le système suivant :

$$\begin{cases} \phi^M(\boldsymbol{x},t) = \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m} \phi^m(\boldsymbol{y},t)\,d\boldsymbol{y}, \\ \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m} \nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,d\boldsymbol{y}, \\ \nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) = \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m} \nabla^2_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,d\boldsymbol{y}, \\ \phi^m(\boldsymbol{y},t) = \phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y} + \dfrac{1}{2}\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t) : (\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y} - \mathbf{C}), \end{cases} \tag{4.19}$$

où $\mathbf{C}$ est le moment géométrique d'ordre 2 du VER, défini par :

$$\mathbf{C} = \frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m} \boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}\,d\boldsymbol{y}. \tag{4.20}$$

Ainsi, cette définition d'ordre 2 de l'interface à la petite échelle permet, d'une part, de calculer explicitement la courbure κ_s et, d'autre part, d'en déduire la force de tension de surface. De plus, la forme locale de $\phi^m(\boldsymbol{y},t)$ assure une transmission cohérente des variations de courbure de la grande échelle vers la petite échelle.

Or, d'après la relation (2.13) du Chapitre 1, la courbure locale de l'interface est déterminée par :

$$\kappa_s = -\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{n}_s^m = \frac{\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m\cdot(\nabla_{\boldsymbol{y}}\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m)\cdot\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m - |\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m|^2\,\mathrm{tr}(\nabla_{\boldsymbol{y}}\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m)}{|\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m|^3}. \tag{4.21}$$

On peut alors représenter l'écoulement diphasique à la petite échelle par le modèle

suivant :

$$\begin{cases} -\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\left(2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\right)+\nabla_{\boldsymbol{y}}p^m(\boldsymbol{y})-\boldsymbol{\alpha}-\mathbf{f}_s^m(\boldsymbol{y})=0, & \forall\,\boldsymbol{y}\in\Omega^m,\\ \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)=0, & \forall\,\boldsymbol{y}\in\Gamma_O^m,\\ \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-)=\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+), & \forall\,\boldsymbol{y}^-\in\partial\Omega^{m,-},\\ \nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)=0, & \forall\,\boldsymbol{y}\in\Omega^m,\\ \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t),\\ \dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m}\nabla_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}=\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t),\\ \phi^M(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ \nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m}\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ \nabla_{\boldsymbol{x}}^2\phi^M(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{1}{|\Omega^m|}\displaystyle\int_{\Omega^m}\nabla_{\boldsymbol{y}}^2\phi^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ \phi^m(\boldsymbol{y},t)=\phi^M(\boldsymbol{x},t)+\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}+\dfrac{1}{2}\nabla_{\boldsymbol{x}}^2\phi^M(\boldsymbol{x},t):(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\,. \end{cases} \tag{4.22}$$

Les viscosités des fluides intervenant dans la relation (4.22) peuvent être définies en fonction de la position de l'interface à la petite échelle par :

$$\mu^m(\boldsymbol{y},t)=H\left(\phi^m(\boldsymbol{y},t)\right)\mu_1+\left(1-H\left(\phi^m(\boldsymbol{y},t)\right)\right)\mu_2, \tag{4.23}$$

où μ_1 et μ_2 désignent les viscosités respectives des deux phases. La fonction de Heaviside $H(\phi^m)$ utilisée dans cette définition est donnée par :

$$H(\phi^m)=\begin{cases}1, & \phi^m>0,\\ \dfrac{1}{2}, & \phi^m=0,\\ 0, & \phi^m<0.\end{cases} \tag{4.24}$$

4.1.4 Identification des grandeurs duales de la grande échelle

L'identification de $\boldsymbol{f}^M$ se fait en posant égales à zéro toutes les variations sauf $\delta\boldsymbol{V}^M$ dans la relation (4.15) :

$$\boldsymbol{f}^M\cdot\delta\boldsymbol{V}^M=-\boldsymbol{\alpha}\cdot(-\delta\boldsymbol{V}^M)=\boldsymbol{\alpha}\cdot\delta\boldsymbol{V}^M,\qquad\forall\,\delta\boldsymbol{V}^M\in\mathbb{R}^d\iff\boldsymbol{f}^M=\boldsymbol{\alpha}. \tag{4.25}$$

Par analogie, on suppose également que seule la variation $\delta\boldsymbol{G}^M$ est non nulle, ce qui

conduit à :

$$\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} : \delta\boldsymbol{G}^M - p^M \operatorname{tr}(\delta\boldsymbol{G}^M) = -\int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \otimes \left(-(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+)\right) : \delta\boldsymbol{G}^M \,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-,$$
$$\forall\, \delta\boldsymbol{G}^M \in \mathbb{R}^{d\times d},$$

$$\iff \qquad \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} = \int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \otimes \left(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+\right) \,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^- + p^M \mathbf{I}. \tag{4.26}$$

On peut remarquer que la grandeur $\boldsymbol{f}^M$ conserve son sens physique, c'est-à-dire celui d'une force volumique. En revanche, lorsque la condition aux limites périodique est imposée sur le bord du VER, $\boldsymbol{\beta}$ ne peut pas être directement interprété comme un tenseur déviatorique. Il s'agit plutôt d'un vecteur de contrainte dépendant des coordonnées $\boldsymbol{y}$ du VER. Son produit tensoriel avec le vecteur $(\boldsymbol{y}^- - \boldsymbol{y}^+)$ permet alors de reconstruire le tenseur déviatorique, de sorte que la définition de $\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}$ reste cohérente avec les travaux de Shakoor et Park [142].

D'après le Chapitre 2, il a été identifié que :

$$g^M(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial\phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t),$$

est l'équation de transport de l'interface en écoulement diphasique.

En résumé,

- Le problème de grande échelle décrit dans la relation (4.2) correspond à un écoulement diphasique de deux fluides newtoniens, incompressibles et immiscibles, régi par le modèle multi-échelle diphasique établi. L'ensemble du modèle est formulé en termes de forces volumiques, de contraintes déviatoriques associées à la condition aux limites périodique, et de transport de l'interface.
- Les domaines de petite échelle (VER hétérogènes) ne sont pas directement intégrés dans le domaine de grande échelle. Ils sont plutôt associés en chaque point de grande échelle, afin de représenter l'hétérogénéité locale de cette petite échelle.
- Pour chaque domaine de petite échelle, le problème (4.22) est résolu en imposant une condition aux limites périodique sur le terme de fluctuation du champ de vitesse au bord du VER, tout en actualisant la position de l'interface à chaque pas de temps pour le calcul de la force de tension de surface.
- La force volumique, le tenseur déviatorique associé à la condition périodique sur le VER, ainsi que le taux de variation de la direction de l'interface sont ensuite calculés à partir de la solution du problème de petite échelle.

Compte tenu du fait que le problème d'écoulement diphasique à la petite échelle (4.22) est linéaire, il devient possible de calculer les propriétés effectives selon l'approche proposée par Shakoor et Park [143], auxquelles s'ajoutent les contributions liées à l'interface. Ces grandeurs effectives peuvent ensuite être utilisées pour réaliser les simulations à la grande échelle.

4.2 Méthodes numériques multi-échelles

Nous avons adopté un schéma de Taylor–Hood P2/P1 pour chaque échelle. Cela signifie qu'une interpolation quadratique P2 est utilisée pour le champ de vitesse, tandis qu'une interpolation linéaire P1 est employée pour le champ de pression. De plus, une interpolation quadratique P2 est retenue pour le champ représentant l'interface.

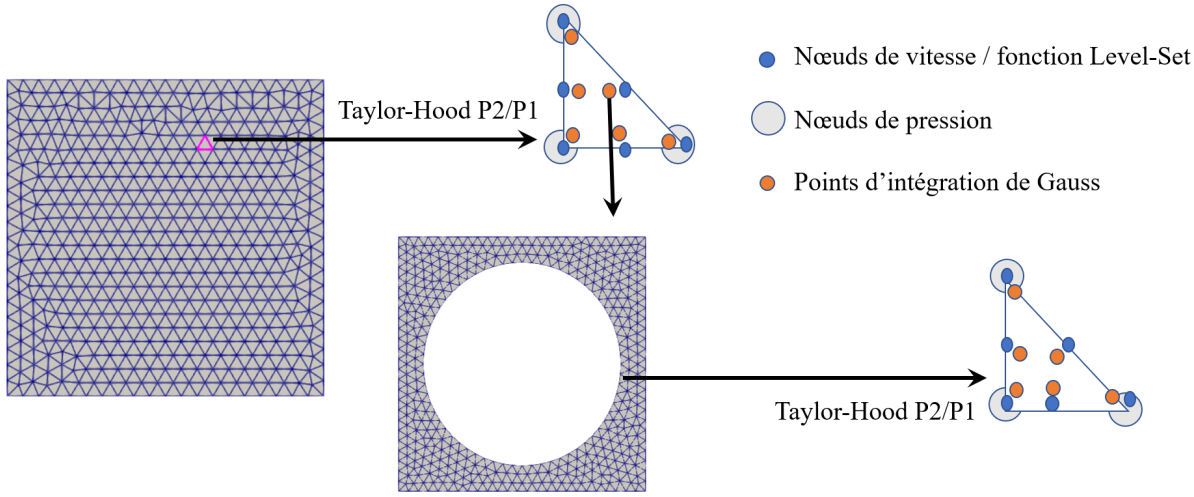


FIGURE 4.2 – Illustration de la stratégie de discrétisation FE^2, comprenant un maillage de grande échelle de type P2/P1/P2, un élément de grande échelle représentatif, ainsi que le maillage et l'élément représentatif du domaine de petite échelle associé.

Pour la configuration illustrée à la figure 4.2, le maillage de macro-échelle est constitué de 948 éléments finis. En considérant six points d'intégration par élément, cela correspond à un total de $948 \times 6 = 5\,688$ points d'intégration à la grande échelle.

Chaque point d'intégration étant associé à un problème de petite échelle discrétisé par 754 éléments, le nombre total d'éléments à la micro-échelle s'élève ainsi à $5\,688 \times 754 = 4\,288\,752$.

Dans ce cadre, nous utilisons une approche par éléments finis pour déterminer la solution du problème de micro-échelle. Le calcul des forces et des contraintes nécessaires à la grande échelle dans l'écoulement diphasique est présenté en sous-section 4.1.4. En revanche, la discrétisation de l'équation d'advection gouvernant l'évolution de l'interface, ainsi que celle du problème de petite échelle, sont détaillées dans la suite de cette section.

4.2.1 Problème de petite échelle

Compte tenu de la linéarité du problème à la petite échelle, tel que décrit par le système (4.22), il est possible d'écrire le problème sous la forme suivante :

$$a(\delta \boldsymbol{v}, \omega) = l(\omega), \tag{4.27}$$

tel que :

$$\begin{cases} a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m}(\delta\boldsymbol{v}^m,\boldsymbol{v}^m)+a_{\boldsymbol{v}^m p^m}(\delta\boldsymbol{v}^m,p^m)+a_{\boldsymbol{v}^m\alpha}(\delta\boldsymbol{v}^m,\alpha)+a_{\boldsymbol{v}^m\beta}(\delta\boldsymbol{v}^m,\beta)=l_{f_s^m}(\delta\boldsymbol{v}^m),\\ a_{p^m\boldsymbol{v}^m}(\delta p^m,\boldsymbol{v}^m)=0,\\ a_{\alpha\boldsymbol{v}^m}(\delta\alpha,\boldsymbol{v}^m)=l_\alpha(\delta\alpha),\\ a_{\beta\boldsymbol{v}^m}(\delta\beta,\boldsymbol{v}^m)=l_\beta(\delta\beta). \end{cases} \tag{4.28}$$

La forme bilinéaire s'écrit :

$$\begin{aligned} a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m}(\delta\boldsymbol{v}^m,\boldsymbol{v}^m)&=\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\,\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t):\nabla_{\boldsymbol{y}}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ a_{\boldsymbol{v}^m p^m}(\delta\boldsymbol{v}^m,p^m)&=-\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ a_{p^m\boldsymbol{v}^m}(\delta p^m,\boldsymbol{v}^m)&=-\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta p^m(\boldsymbol{y})\,\nabla_{\boldsymbol{y}}\cdot\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ a_{\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{v}^m}(\delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{v}^m)&=-\delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}\right),\\ a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\alpha}}(\delta\boldsymbol{v}^m,\boldsymbol{\alpha})&=-\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,d\boldsymbol{y}\right),\\ a_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{v}^m}(\delta\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{v}^m)&=-\int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\left(\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-,t)-\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+,t)\right)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-,\\ a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\beta}}(\delta\boldsymbol{v}^m,\boldsymbol{\beta})&=-\int_{\partial\Omega^{m,-}}\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\left(\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-)-\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+)\right)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-. \end{aligned} \tag{4.29}$$

La forme linéaire est :

$$\begin{aligned} l_{f_s^m}(\delta\boldsymbol{v}^m)&=\frac{1}{|\Omega^m|}\int_{\Omega^m}\boldsymbol{f_s}^m(\boldsymbol{y})\cdot\delta\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y})\,\mathrm{d}\boldsymbol{y},\\ l_\alpha(\delta\alpha)&=-\delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}),\\ l_\beta(\delta\boldsymbol{\beta})&=\int_{\partial\Omega^{m,-}}\delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-)\cdot\left((\boldsymbol{y}^--\boldsymbol{y}^+)\cdot\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{v}^M\right)\,\mathrm{d}\boldsymbol{y}^-. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Après discrétisation par éléments finis, le système linéaire devient :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m p^m} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\alpha} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\beta}\\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m p^m} & 0 & 0 & 0\\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\alpha}} & 0 & 0 & 0\\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\beta}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^m}\\ \mathbf{U}_{p^m}\\ \mathbf{U}_{\boldsymbol{\alpha}}\\ \mathbf{U}_{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \mathbf{l_{f_s^m}}\\ 0\\ \mathbf{l}_{\boldsymbol{\alpha}}\\ \mathbf{l}_{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix} \tag{4.31}$$

où la dimension du vecteur $\mathbf{U}_\beta$ est égale au nombre de nœuds P2 de $\partial\Omega^{m,-}$ multiplié par d, celle de $\mathbf{U}_\alpha$ est d, celle de $\mathbf{U}_{p^m}$ correspond au nombre de nœuds P1 du maillage, et celle de $\mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^m}$ correspond au nombre de nœuds P2 multiplié par d.

Pour prendre en compte la condition aux limites de Dirichlet imposée sur les parois des fibres, les lignes et colonnes du système (4.31) correspondant aux nœuds situés sur cette paroi de l'obstacle sont modifiées de manière à garantir que la vitesse est nulle sur ces nœuds. Quant au champ d'interface ϕ^m, il est initialisé à cette échelle par

$$\phi^m(\boldsymbol{y},t)=\phi^M(\boldsymbol{x},t)+\nabla_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{y}+\frac{1}{2}\nabla^2_{\boldsymbol{x}}\phi^M(\boldsymbol{x},t):(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{y}-\mathbf{C})\,. \tag{4.32}$$

4.2.2 Problème de grande échelle

L'équation de transport de g^M étant un problème d'advection pure, nous allons y introduire une stabilisation à l'aide de la méthode RBVMS (*Residual-Based Variational Multiscale*). Cette approche intègre une discrétisation par éléments finis, avant de détailler la mise en œuvre d'un couplage multi-échelle.

4.2.2.1 Stabilisation RBVMS

La méthode RBVMS permet d'assurer la stabilité numérique des solutions pour les problèmes dominés par l'advection, comme c'est le cas ici pour le transport de l'interface à la grande échelle.

En notant ϕ^M la fonction *Level-Set* à cette échelle, celle-ci est décomposée en une contribution résolue et une contribution de sous-maille (non résolue) :

$$\phi^M \approx \phi_h^M + \phi^{M'}, \tag{4.33}$$

où ϕ_h^M désigne la composante projetée sur l'espace discret des éléments finis, tandis que $\phi^{M'}$ représente la composante non résolue. En introduisant une fonction test ψ_h^M appartenant à l'espace discret π_h, la forme faible semi-discrète du problème d'advection à la grande échelle s'écrit :

$$\begin{aligned} g^M = &\int_{\Omega_h} \psi_h^M \left(\frac{\partial \phi_h^M}{\partial t} + \boldsymbol{v}_h^M \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi_h^M \right) \mathrm{d}\Omega^M \\ &- \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nabla \psi_h^M \cdot \boldsymbol{v}_h^M \, \phi^{M'}(\boldsymbol{v}_h^M, \phi_h^M) \, \mathrm{d}\Omega^M = 0, \quad \forall \, \psi_h^M \in \mathcal{H}^1(\Omega^M), \end{aligned} \tag{4.34}$$

où $\boldsymbol{v}_h^M$ désigne le champ de vitesse obtenu après résolution du modèle d'écoulement multi-échelle, et $\mathcal{T}_h$ représente le maillage éléments finis. Dans le cadre de la méthode RBVMS, la composante non résolue $\phi^{M'}$ est approchée comme étant proportionnelle au résidu de la forme forte de l'équation à grande échelle, soit :

$$\phi^{M'}(\boldsymbol{v}_h^M, \phi_h^M) = -\, \tau_{\phi^M}(\boldsymbol{v}_h^M) \left(\frac{\partial \phi_h^M}{\partial t} + \boldsymbol{v}_h^M \cdot \nabla \phi_h^M \right). \tag{4.35}$$

Dans l'expression (4.35), τ_{ϕ^M} désigne le paramètre de stabilisation, défini par :

$$\tau_{\phi^M}(\boldsymbol{v}_h^M) = \left(\left(\frac{2}{\Delta t} \right)^2 + \boldsymbol{v}_h^M \cdot \mathbf{G} \, \boldsymbol{v}_h^M \right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{4.36}$$

où Δt désigne le pas de temps d'intégration et $\mathbf{G} = \mathbf{B}^T \mathbf{B}$ est le tenseur métrique associé à la transformation de l'élément de référence vers l'élément réel du maillage [18]. Dans ce contexte, le produit contracté $\boldsymbol{v}_h^M \cdot \mathbf{G} \, \boldsymbol{v}_h^M$ permet de définir une longueur caractéristique de l'élément dans la direction du champ de vitesse. Il est important de noter que ce paramètre de stabilisation τ_{ϕ^M} est évalué localement aux points de quadrature de chaque élément, contrairement à d'autres approches plus classiques où il est supposé constant par élément [29].

Par ailleurs, la présence du terme temporel dans l'équation d'advection de l'interface nécessite l'introduction d'un schéma de discrétisation en temps. À cette fin, nous adoptons le schéma d'Euler implicite, également configuré comme la formule de différenciation arrière d'ordre 1 (*Backward Differentiation Formula*). Sous ce formalisme, l'approximation de la dérivée temporelle au temps t_{n+1} par le schéma d'Euler implicite s'écrit [53] :

$$\left.\frac{\partial \phi^M}{\partial t}\right|_{t_{n+1}} = \frac{\phi^M_{n+1} - \phi^M_n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t), \tag{4.37}$$

où :

- ϕ^M_{n+1} et ϕ^M_n représentent les valeurs de la fonction *Level-Set* à la grande échelle aux instants discrets t_{n+1} et t_n respectivement,
- Δt désigne, pour rappel, le pas de temps d'intégration,
- $\mathcal{O}(\Delta t)$ modélise l'erreur de troncature locale, confirmant que le schéma est d'ordre 1 en temps.

Les termes issus de la stabilisation RBVMS peuvent être regroupés sous la forme de matrices de contribution définies par :

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{\phi^M\phi^M} = &\int_{\Omega_h} \psi^M_{h,i} \left(\frac{\phi^M_h}{\Delta t}(\boldsymbol{x}, t^{n+1}) + \boldsymbol{v}^M_h \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi^M_h(\boldsymbol{x}, t^{n+1} \right) \mathrm{d}\Omega^M \\ &- \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nabla_{\boldsymbol{x}} \psi^M_{h,i} \cdot \boldsymbol{v}^M_h \, \phi^{M'}(\boldsymbol{v}^M_h, \phi^M_h) \, \mathrm{d}\Omega, \\ &\forall \, \psi^M_{h,i} \in H^1(\Omega^M),\end{aligned} \tag{4.38}$$

avec le terme de masse source associé :

$$\mathbf{B}_{\phi^M} = \int_{\Omega^M} \phi^M_h \, \frac{\psi^M_h(\boldsymbol{x}, t^n)}{\Delta t} \, \mathrm{d}\Omega. \tag{4.39}$$

Pour résoudre le couplage entre l'équation d'écoulement et l'équation de transport, la stabilité numérique est contrôlée par la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), définie par :

$$\mathrm{CFL} = \sum_{i=1}^{d} \frac{|\boldsymbol{v}_i| \, \Delta t}{h^M} \leq 1, \tag{4.40}$$

où d est la dimension spatiale, $\boldsymbol{v}_i$ désigne la i-ème composante du champ de vitesse et h^M représente la taille caractéristique de la maille à la grande échelle. Lorsque cette condition n'est pas satisfaite, un algorithme d'adaptation automatique du pas de temps est activé. Plus précisément, le pas de temps courant Δt est divisé par deux de manière itérative jusqu'à ce que le critère CFL soit respectée.

Cette stratégie adaptative, appliquée à l'ensemble des simulations, garantit la robustesse du solveur et lui permet de converger en moins de dix itérations par pas de temps.

4.2.2.2 Algorithme du couplage multi-échelle

D'après le chapitre 1, le système d'équations (2.63) à résoudre pour l'écoulement à la grande échelle, écrit sous sa formulation faible, reste inchangé. On a :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega^M} \left(\frac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \boldsymbol{v}^M}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) + \frac{\partial \boldsymbol{f}^M}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M}(\boldsymbol{x}) : \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) \right) \cdot \delta \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\ \quad + \displaystyle\int_{\Omega^M} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \boldsymbol{v}^M}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) + \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}}{\partial \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M}(\boldsymbol{x}) : \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) \right) : \nabla_{\boldsymbol{x}} \delta \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \\ \quad - \displaystyle\int_{\Omega^M} p^M(\boldsymbol{x})\, \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \delta \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = \int_{\Gamma_N^M} \boldsymbol{t}_N^M(\boldsymbol{x}) \cdot \delta \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}, \\ \quad - \displaystyle\int_{\Omega^M} \delta p^M(\boldsymbol{x})\, \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = 0. \end{cases} \tag{4.41}$$

et son écriture sous la forme d'un système linéaire est :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^M \boldsymbol{v}^M} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^M p^M} \\ \mathbf{A}^T_{p^M \boldsymbol{v}^M} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^M} \\ \mathbf{U}_{p^M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{\boldsymbol{v}^M} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{4.42}$$

Cela signifie que l'on détermine d'abord le champ de vitesse à la grande échelle $\boldsymbol{v}^M$ ainsi que le champ de pression p^M.

En introduisant le champ scalaire à grande échelle ϕ^M, la formulation faible associée au transport de cette interface est celle présentée précédemment dans la sous-sous-section 4.2.2.1 consacrée à la stabilisation de l'équation d'advection. Après discrétisation par éléments finis, le système algébrique linéaire à résoudre s'écrit :

$$\mathbf{A}_{\phi^M \phi^M} \mathbf{U}_{\phi^M} = \mathbf{B}_{\phi^M}. \tag{4.43}$$

La résolution de ce système s'articule selon une séquence algorithmique précise. En premier lieu, l'évaluation du résidu à la grande échelle nécessite la résolution préalable du problème diphasique à la petite échelle. Pour ce faire, on impose la vitesse de grande échelle $\boldsymbol{v}_i^M(\boldsymbol{x})$ ainsi que la position de l'interface $\phi^m(\boldsymbol{y}, t^{n+1})$. À partir de cette solution fine, les grandeurs duales sont extraites et leurs dérivées sont calculées aux points de quadrature :

$$\boldsymbol{f}^M = \boldsymbol{\alpha}, \tag{4.44}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} = -\int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \cdot \left(\delta \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^-) - \delta \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y}^+) \right) d\boldsymbol{y}^-. \tag{4.45}$$

Dans un second temps, le problème d'écoulement global étant linéaire, le résidu à la grande échelle est déterminé en seulement deux itérations, ce qui garantit une convergence rapide du solveur. C'est à ce stade que la condition CFL est évaluée afin d'assurer la stabilité du couplage avec l'équation de transport. Si cette condition est satisfaite, le solveur valide la convergence globale du processus numérique pour le pas de temps courant.

En effet, dès lors que les résidus et leurs dérivées sont calculés, l'assemblage et la résolution du système linéaire s'effectuent sans difficulté.

4.2.3 Réinitialisation de la fonction Level-Set

D'après la sous-sous-section 2.1.4.4 du chapitre 1, la réinitialisation de la fonction ϕ_h^M est effectuée à l'aide de l'approche géométrique directe. Cette opération est réalisée à chaque pas de temps afin de préserver la propriété de fonction distance signée (*Level-Set*) associée à ce champ.

L'implémentation quadratique $P2$ du champ *Level-Set* constitue un véritable défi numérique [141], car l'intersection de chaque élément du maillage avec l'isovaleur de ϕ_h^M n'est pas nécessairement plane. Pour contourner cette difficulté, chaque élément fini $P2$ est subdivisé en plusieurs sous-éléments, puis un maillage de l'isovaleur est reconstruit avec une discrétisation de surface plus fine. Ce maillage d'interface est ensuite représenté sous forme $P1$, composée de segments linéaires en 2D.

La distance de tout nœud du maillage à l'interface $\Gamma_{1,2}$, d'après les figure 2.8 et figure 2.12, est approximée en recherchant la projection la plus proche parmi l'ensemble des éléments du maillage de surface. Ensuite, suivant la méthodologie proposée par Shakoor et Park [141], nous choisissons de tronquer automatiquement cette fonction *Level-Set* autour de l'interface, de manière à ce que ses valeurs soient comprises dans l'intervalle $\left[-2\epsilon^M,\, 2\epsilon^M\right]$, avec $\epsilon^M = 5 \times h^M$, h^M étant la taille de maille de grande échelle.

En résumé :

- Une interpolation $P2/P1/P2$ par la méthode des éléments finis est utilisée pour discrétiser le problème d'écoulement diphasique aux deux échelles.
- Le problème à la petite échelle étant linéaire, il est résolu sous la forme variationnelle $a(\delta\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\omega}) = l(\boldsymbol{\omega})$, en intégrant la force de tension surface dans le membre de droite.
- Le calcul des dérivées des grandeurs effectives à la grande échelle est effectué après que la simulation diphasique à la petite échelle a été conduite. L'assemblage et la résolution du système linéaire ne posent alors aucune difficulté, même en présence d'une condition aux limites de Dirichlet.
- Si le résidu calculé à la grande échelle est inférieur à la tolérance requise, le solveur d'écoulement est considéré comme ayant convergé. Dans le cas contraire, une nouvelle itération est réalisée.
- La condition CFL, régissant le couplage entre le problème d'écoulement et l'équation de transport de l'interface, est ensuite évaluée. Si elle est satisfaite, le résidu de l'équation de transport est calculé ; sinon, une procédure d'adaptation automatique du pas de temps est activée.
- La méthode RBVMS est employée pour stabiliser le terme d'advection dans l'équation de transport, évitant ainsi les oscillations numériques susceptibles d'altérer le calcul de la tension superficielle.
- Afin de préserver la propriété de fonction distance signée de la *Level-Set* au cours du transport, une réinitialisation géométrique directe est effectuée à chaque pas de temps.

Cette procédure de modélisation multi-échelle est implémentée dans le code de calcul par éléments finis *FEMS* [137]. Pour certaines configurations, le domaine à la petite échelle peut nécessiter un grand nombre d'éléments afin d'assurer une précision suffisante, ce qui accroît significativement le temps de calcul et la consommation de mémoire vive.

Pour pallier cette limitation, le maillage à la grande échelle est partitionné entre plusieurs processeurs à l'aide de la bibliothèque *Message Passing Interface* (MPI). Chaque élément du maillage à la grande échelle, ainsi que ses points d'intégration associés, appartiennent exclusivement à une seule partition. Par ailleurs, les communications entre les nœuds de cette échelle partagés par plusieurs partitions sont prises en charge automatiquement par *FEMS*.

Compte tenu de la linéarité des problèmes considérés, en particulier à la grande échelle, nous utilisons le solveur parallèle de la suite PETSc [16]. De plus, comme chaque point d'intégration à la grande échelle appartient à une unique partition, cette propriété s'étend naturellement aux domaines de la petite échelle. Par conséquent, ces domaines de petite échelle ne subissent aucun partitionnement. La résolution du problème diphasique local est effectuée de manière séquentielle en utilisant le solveur direct UMFPACK [41].

4.3 Résultats et discussions

Dans cette section, le modèle multi-échelle diphasique développé précédemment est utilisé pour simuler l'écoulement de fluides newtoniens, incompressibles et immiscibles. Bien que les cas étudiés soient simplifiés, ils constituent des configurations de référence documentées dans la littérature et permettent d'évaluer les performances du modèle développé. L'ensemble de la procédure numérique décrite dans la section 4.2 est appliqué à toutes les simulations présentées.

Afin de valider le modèle multi-échelle, les résultats des simulations 2D sont comparés à ceux d'un modèle mono-échelle (DNS, *Direct Numerical Simulation*), considéré ici comme la solution de référence. La validation s'articule autour de plusieurs aspects clés : (i) la prise en compte correcte de la tension de surface, analysée à travers le cas d'une bulle statique dans un fluide homogène puis dans un milieu contenant des fibres ; (ii) la conservation de la masse au cours du temps ; (iii) le coût de calcul associé à la résolution du problème ; et (iv) l'évolution de la circularité d'une bulle initialement carrée se transformant progressivement en une forme circulaire.

4.3.1 Problème de bulle statique dans un milieu fluide

Pour établir la solution de référence, une simulation mono-échelle est réalisée. Le domaine considéré est un carré de dimensions 160×160 μm^2, discrétisé par un maillage de référence de taille $h = 32$ μm. Le domaine est rempli de résine époxy de viscosité $0,2$ Pa $\cdot$ s, à l'intérieur duquel est placée une bulle d'air initialement centrée en zéro, de diamètre 80 μm et de viscosité $18,5 \times 10^{-6}$ Pa $\cdot$ s. La tension de surface est fixée à $31,7 \times 10^{-3}$ N $\cdot$ m^{-1}, et la simulation est effectuée avec un pas de temps $\Delta t = 4 \times 10^{-6}$ s jusqu'au temps final $t = 4 \times 10^{-5}$ s.

Des conditions aux limites libres sont imposées sur les quatre bords du domaine carré, tandis qu'une condition de pression nulle est appliquée en un point afin d'assurer l'unicité de la solution du problème $\nabla p = \mathbf{f}_s$, qui admet par ailleurs une solution analytique. Ce cas de référence est illustré en figure 4.3(a).

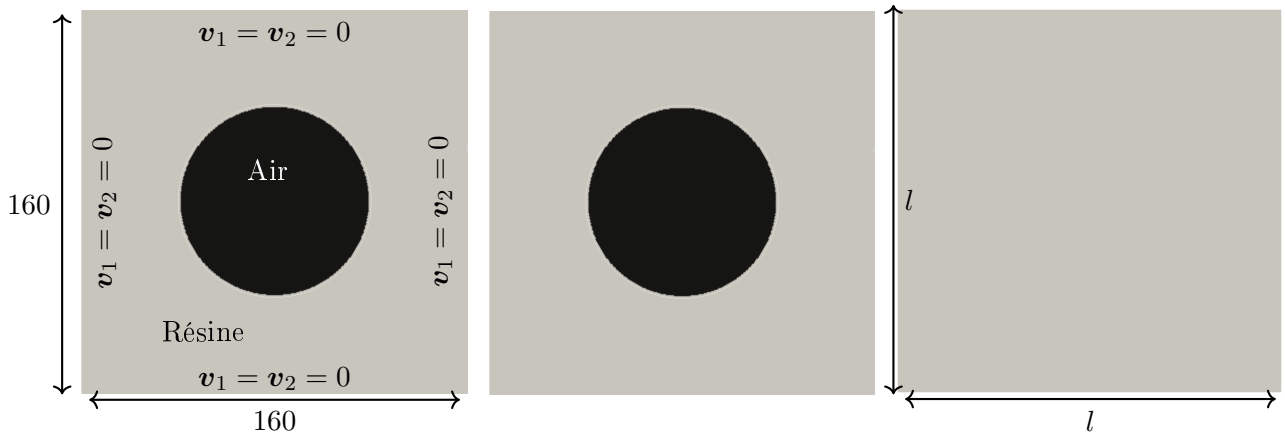


FIGURE 4.3 – Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de la bulle statique : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine homogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$.

En parallèle de l'étude mono-échelle, une simulation multi-échelle est réalisée sur un domaine de grande échelle de mêmes dimensions que celui du modèle mono-échelle, comme illustré en figure 4.3(b). Ce domaine est discrétisé par éléments finis avec une taille de maille $h^M = 32$ μm. À chaque point d'intégration de ce domaine, on associe un VER homogène de dimensions 10×10 μm^2, présenté en figure 4.3(c), et discrétisé par éléments finis avec une taille de maille $h^m = 0,4$ μm.

4.3.1.1 Validation par contrainte cinématique

Les simulations d'écoulement diphasique, menées avec l'approche mono-échelle et l'approche multi-échelle, ont été réalisées dans les mêmes conditions numériques, en utilisant une interpolation $P2/P1/P2$ et une méthode de stabilisation RBVMS, toutes deux implémentées dans le logiciel *FEMS*. Afin de vérifier que les résultats de l'approche multi-échelle coïncident avec ceux de l'approche mono-échelle, nous avons défini une procédure de validation dédiée.

La figure 4.4 illustre la procédure retenue pour la validation du modèle multi-échelle. Cette approche repose sur la contrainte cinématique de la sous-section 3.1.3 portant sur la moyenne des champs (Saturation, pression, etc.), définie précédemment au Chapitre 2, et qui doit être satisfaite. Plus précisément, la moyenne du champ de saturation dans un VER issu de la simulation directe (DNS) doit coïncider avec la valeur de la saturation au point correspondant de la grande échelle.

Précisons que la saturation γ^M est obtenue en appliquant la fonction de Heaviside au champ de Level-Set. Cette opération est réalisée aussi bien dans l'approche mono-échelle que dans l'approche multi-échelle. Formellement, on écrit :

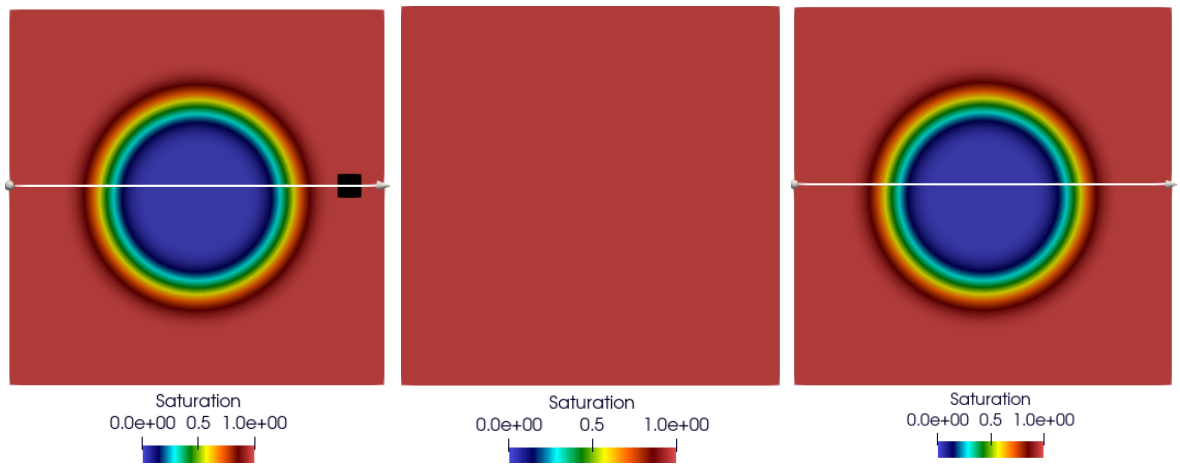
$$\gamma^M(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} H_\varepsilon(\phi^m(\boldsymbol{y}, t))\ d\boldsymbol{y}. \tag{4.46}$$

où H_ε représente la fonction Heaviside régularisée sur l'intervalle de lissage des propriétés.

Par analogie, on définit la moyenne volumique de la pression par :

$$p^M = \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} p^m(\boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{y}. \tag{4.47}$$

Il est important de noter qu'il s'agit ici d'une moyenne volumique, puisqu'aucune fibre n'est présente dans le domaine de simulation.



(a) (b) (c)

FIGURE 4.4 – Figures illustrant l'approche de validation du modèle multi-échelle pour le problème de bulle statique dans un milieu sans fibres, à l'instant considéré. $t = 4 \times 10^{-5}$ s : (a) saturation mono-échelle, (b) saturation dans le VER cible et (c) saturation multi-échelle.

Dans la figure 4.4 (a), le carré isolé correspond au VER représenté dans la figure 4.4 (b), sur lequel la moyenne volumique est calculée à partir du résultat de la simulation mono-échelle. Cette opération est répétée pour chaque VER situé le long de la ligne blanche traversant le domaine de gauche à droite. La figure 4.4 (c) montre la ligne de points de la grande échelle, dont les résultats sont comparés à ceux obtenus en mono-échelle.

4.3.1.2 Étude de l'influence de la taille d'élément

Une étude de convergence en maillage est menée afin d'évaluer la capacité prédictive du modèle multi-échelle. En l'absence de fibres dans le domaine, la solution obtenue par l'approche multi-échelle doit, en principe, coïncider avec celle fournie par l'approche directe. Pour vérifier cette propriété, le maillage de grande échelle initial est successivement raffiné d'un facteur 2 jusqu'à convergence vers la solution de référence, à savoir la solution analytique.

D'après la figure 4.5, qui présente la saturation, et la figure 4.6, illustrant le champ de pression, il apparaît clairement que le maillage influence la qualité des résultats obtenus par rapport à la solution analytique. Un raffinement suffisant est donc nécessaire pour approcher correctement la solution de référence, comme le montrent la figure 4.5 (d), où la saturation passe correctement de 0 dans la phase gazeuse à 1 dans la résine, et la

figure 4.6 (d), dans laquelle le plateau de pression dans le gaz est reproduit de manière satisfaisante.

On observe par ailleurs une différence d'allure entre les courbes issues de l'approche mono-échelle et celles de la solution analytique. Cela provient du fait que la tension de surface est calculée à partir du gradient numérique de la fonction de Heaviside régularisée, comme présenté dans la sous-section 4.1.3 consacrée au problème de petite échelle. Cette remarque s'applique également aux résultats obtenus avec l'approche multi-échelle.

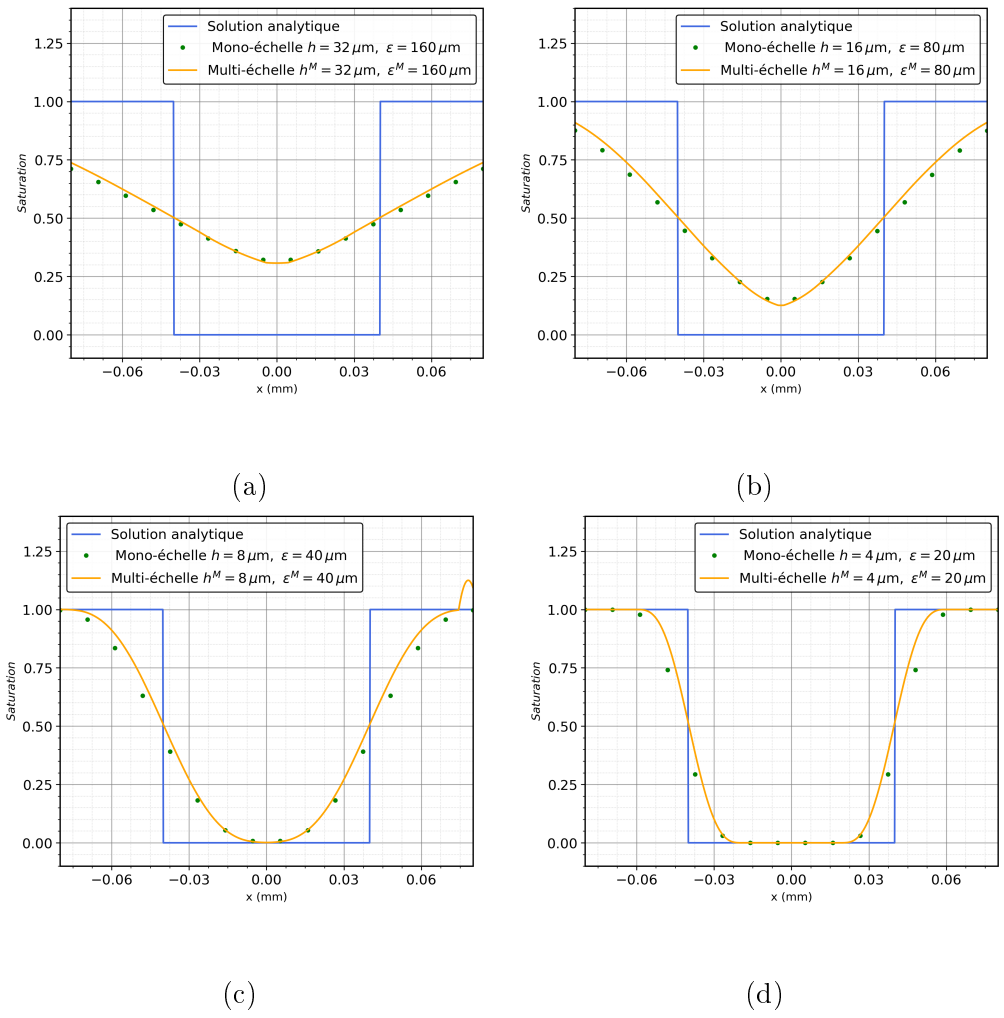


FIGURE 4.5 – Convergence de la courbe de saturation tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique dans un milieu sans les fibres, comparée aux solutions analytique et mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h = h^M = 32$ μm, (b) $h = h^M = 16$ μm, (c) $h = h^M = 8$ μm et (d) $h = h^M = 4$ μm.

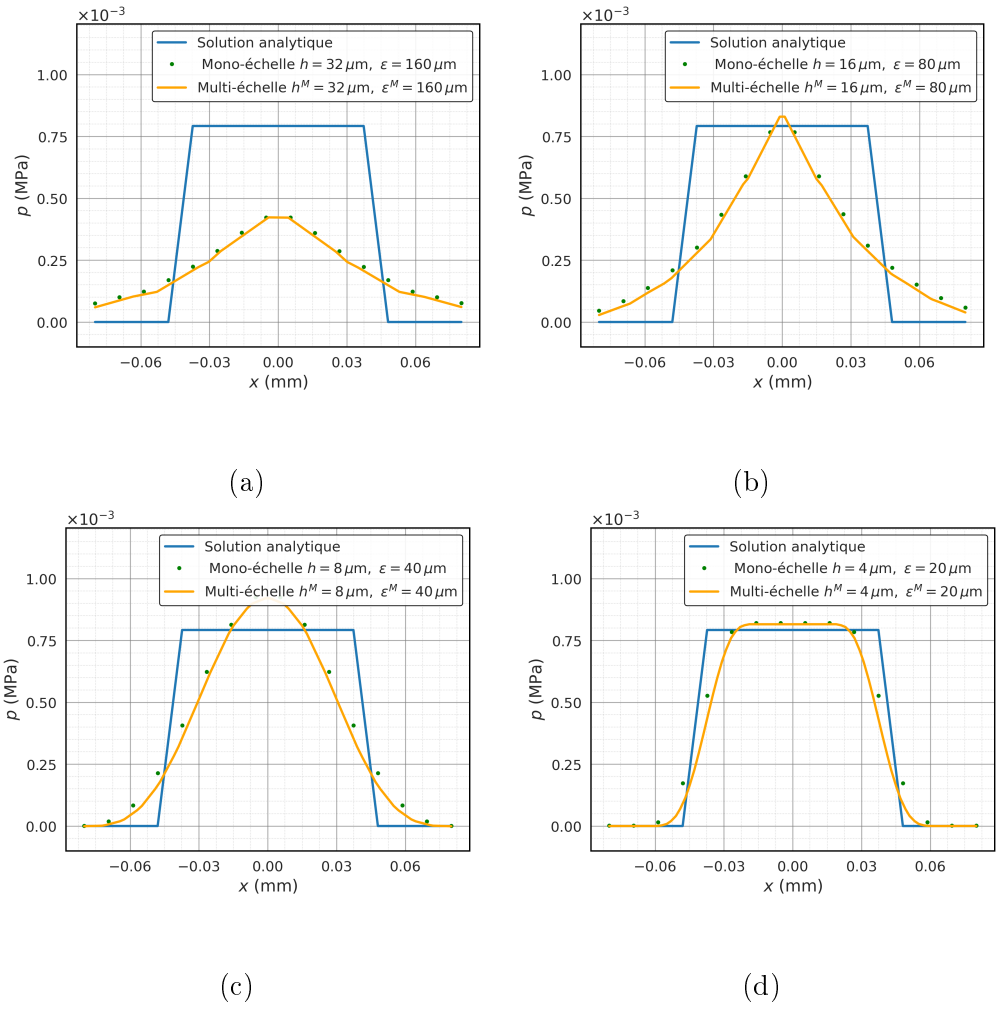


FIGURE 4.6 – Convergence de la courbe de pression tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique dans le milieu sans les fibres, comparée aux solutions analytique et mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h = h^M = 32$ μm, (b) $h = h^M = 16$ μm, (c) $h = h^M = 8$ μm et (d) $h = h^M = 4$ μm.

Pour quantifier l'écart entre l'approche mono-échelle et la solution analytique, l'erreur relative est évaluée à partir du champ de pression. Les valeurs obtenues sont reportées dans la tableau 4.1.

h^M	Erreur relative sur la pression
32	60.00%
16	34.30%
8	13.88%
4	7.77%

TABLE 4.1 – Erreur relative sur le champ de pression entre les solutions monoscale et analytique.

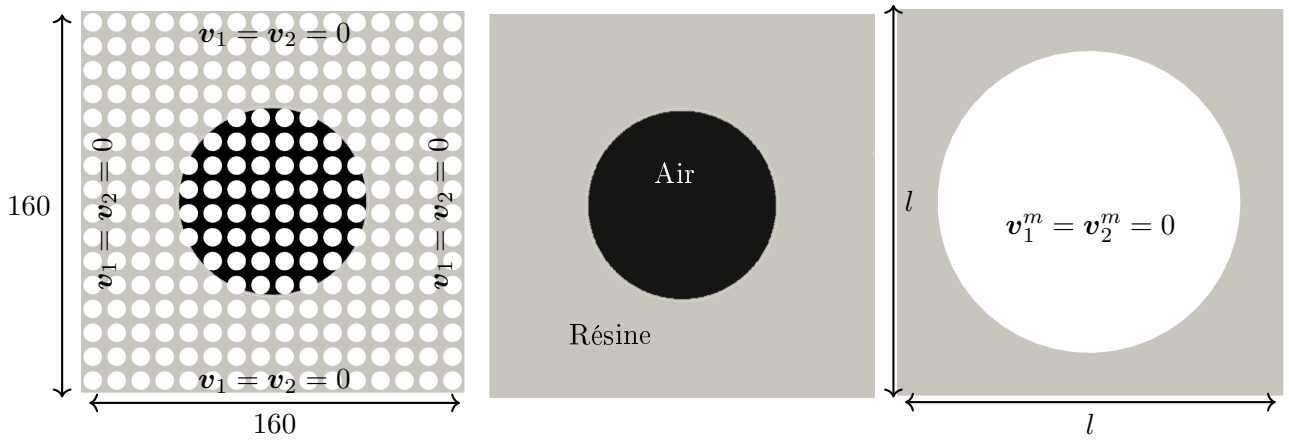
Ces données chiffrées mettent en évidence que l'erreur relative diminue avec le raffinement du maillage pour atteindre 7.77%, une valeur jugée acceptable. Ce résultat confirme la capacité prédictive du modèle mono-échelle pour la pression et sert de base à la validation de l'approche multi-échelle.

4.3.2 Problème de bulle statique dans un milieu poreux

Dans cette sous-section, nous étudions le cas d'un milieu poreux en intégrant directement des fibres de diamètre $D = 7.8$ μm dans le domaine, comme illustré dans la figure 4.7. Le VER associé, dans l'hypothèse de séparation des échelles présente une porosité de 52%. Les propriétés physiques des fluides restent identiques à celles considérées dans le cas homogène précédent.

La différence essentielle par rapport à la sous-section 4.3.1 réside dans le fait que les fibres sont directement modélisées et discrétisées dans la simulation mono-échelle, comme le montre la figure 4.7(a). La taille de maille adoptée pour cette simulation est $h = 0.4$ μm, et la même résolution est utilisée pour le domaine de petite échelle dans l'approche multi-échelle afin de garantir une comparaison cohérente.

Contrairement au cas homogène, il n'existe aucune solution analytique pour l'étude dans un milieu poreux. La comparaison des résultats s'effectue donc entre les simulations mono-échelle et multi-échelle. Pour la procédure de validation, nous conservons la méthodologie définie précédemment à la sous-sous-section 4.3.1.1, en appliquant cette fois une moyenne intrinsèque sur la seule phase fluide du VER, compte tenu de la présence de fibres.



(a) (b) (c)

FIGURE 4.7 – Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de bulle statique dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en $\mathrm{mm\,s^{-1}}$.

Les résultats de la simulation sont présentés dans la figure 4.8, où une comparaison entre l'approche mono-échelle et l'approche multi-échelle est proposée. On observe une bonne prédiction de la saturation dans le milieu poreux, en accord avec les valeurs conventionnelles rapportées dans la littérature [2, 119]. Par ailleurs, la simulation mono-échelle met en évidence des fluctuations de pression au voisinage des fibres en contact avec l'interface. Ces fluctuations ne sont pas visibles à la grande échelle dans le modèle multi-échelle, en raison de la séparation des échelles, mais elles apparaissent bien au niveau du problème de petite échelle.

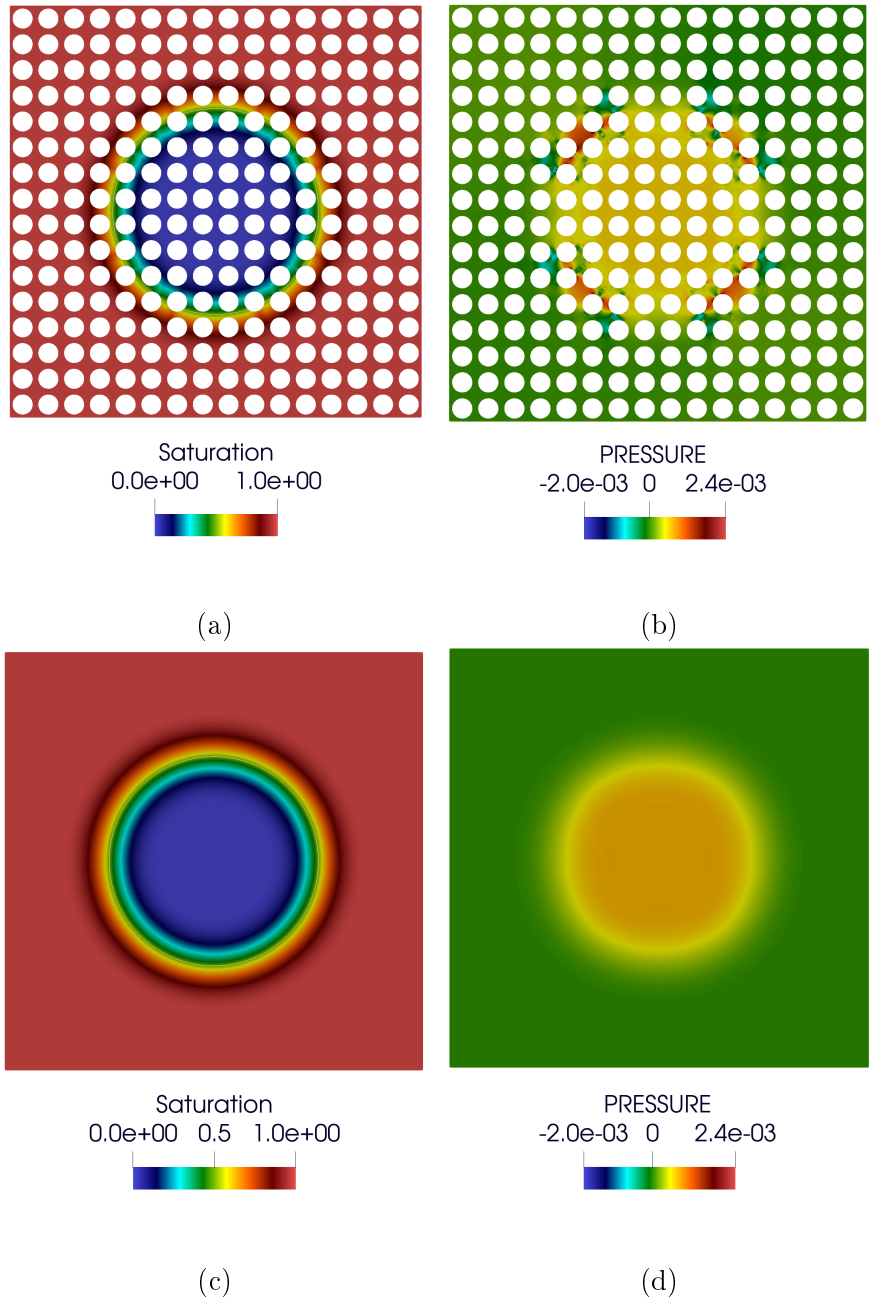


FIGURE 4.8 – Champ de saturation et de pression à la grande échelle à $t = 4 \times 10^{-5}$ s et $h^M = 4$ μm, comparé à la simulation mono-échelle pour le problème de bulle statique en milieu poreux (a) saturation mono-échelle, (b) pression mono-échelle, (c) saturation grande échelle et (d) pression grande échelle.

L'étude de convergence du maillage ainsi que la comparaison des résultats entre les simulations mono-échelle et multi-échelle sont présentées dans la figure 4.9. On observe des oscillations du champ de pression lorsque la taille de maille est relativement grande ; ces oscillations diminuent progressivement avec le raffinement du maillage.

Par ailleurs, en comparaison avec le résultat obtenu dans le milieu homogène présenté dans la figure 4.6, une diminution de la pression à l'intérieur de la bulle est observée. Ce comportement peut s'expliquer par la présence des fibres et par la condition de non-glissement imposée sur leurs parois. En effet, le milieu poreux introduit des contraintes géométriques et mécaniques supplémentaires ; ainsi, la modification locale de l'écoulement et de la répartition des contraintes influence la pression interne de la bulle par rapport au cas homogène.

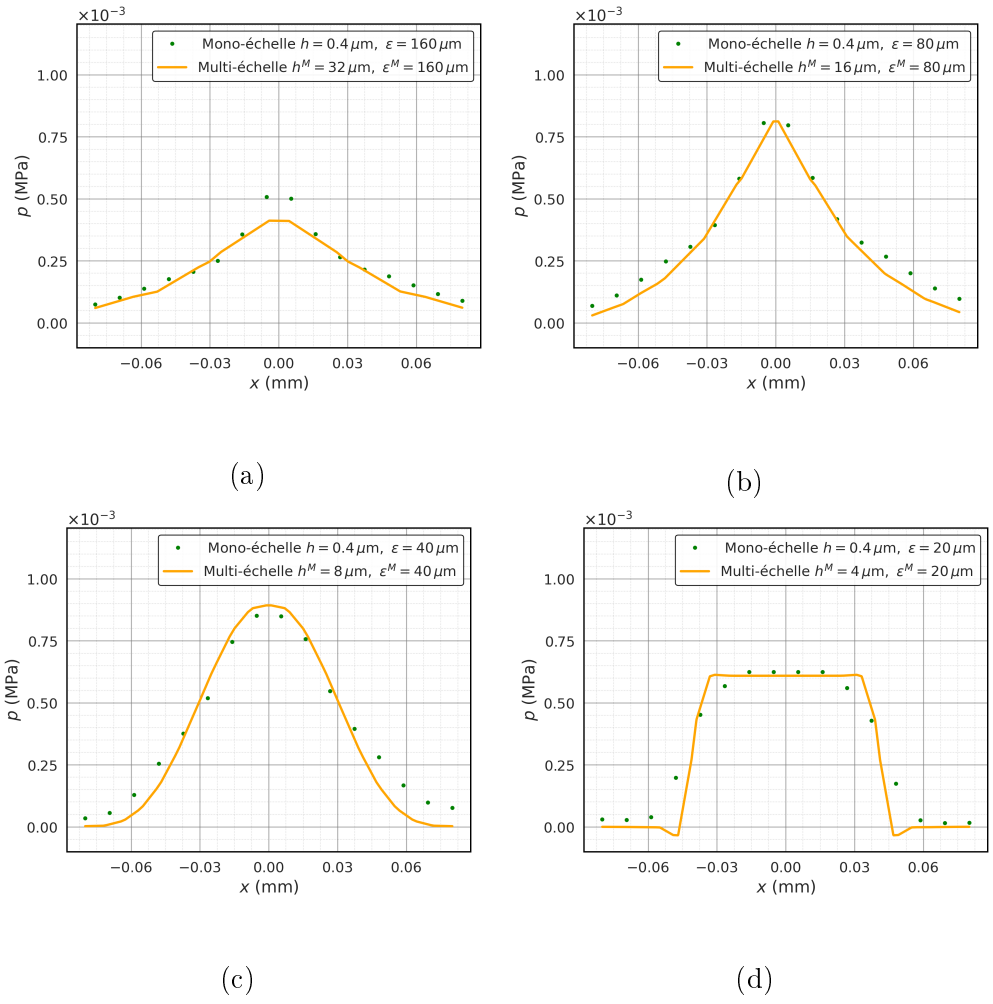


FIGURE 4.9 – Convergence des champs de pression tracée en $y = 5$ μm pour le cas de la bulle statique en milieu poreux, comparée à la simulation mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments : (a) $h^M = 32$ μm, (b) $h^M = 16$ μm, (c) $h^M = 8$ μm et (d) $h^M = 4$ μm.

En résumé, ce premier calcul effectué sur le problème de bulle statique met en évidence les points suivants :

- Le modèle multi-échelle présente une bonne capacité prédictive dans le cas d'une bulle statique au sein d'un milieu fluide homogène, et sa précision s'améliore avec le raffinement du maillage.
- Lors de l'introduction de fibres dans le domaine, leur influence sur la distribution de la pression du fluide est correctement capturée par le modèle, notamment à travers la diminution de la pression observée avec un maillage fin.
- Une bonne corrélation entre les simulations mono-échelle et multi-échelle est obtenue, ce qui confirme la cohérence du modèle grâce à la validation de la contrainte cinématique.

4.3.3 Transition d'une bulle carrée vers une bulle circulaire

Nous considérons à présent le cas d'une bulle statique initialement carrée, étudiée dans deux configurations : un milieu homogène dépourvu de fibres et un milieu hétérogène contenant des fibres. Immergée dans une matrice de résine, la bulle évolue sous l'effet de la tension de surface qui tend à minimiser l'énergie interfaciale. Ce mécanisme entraîne l'arrondissement progressif des coins et conduit, à terme, à une géométrie quasi circulaire. La simulation est effectuée avec un pas de temps de$\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ s jusqu'au temps final $t = 1 \times 10^{-2}$ s.

4.3.3.1 Milieu sans fibres : convergence et validation multi-échelle

Pour ce problème, nous considérons les mêmes propriétés physiques que pour le problème de la bulle circulaire. Le même maillage est également conservé. La seule différence réside dans la géométrie initiale de la bulle d'air, qui est un carré de dimensions 80×80 μm^2.

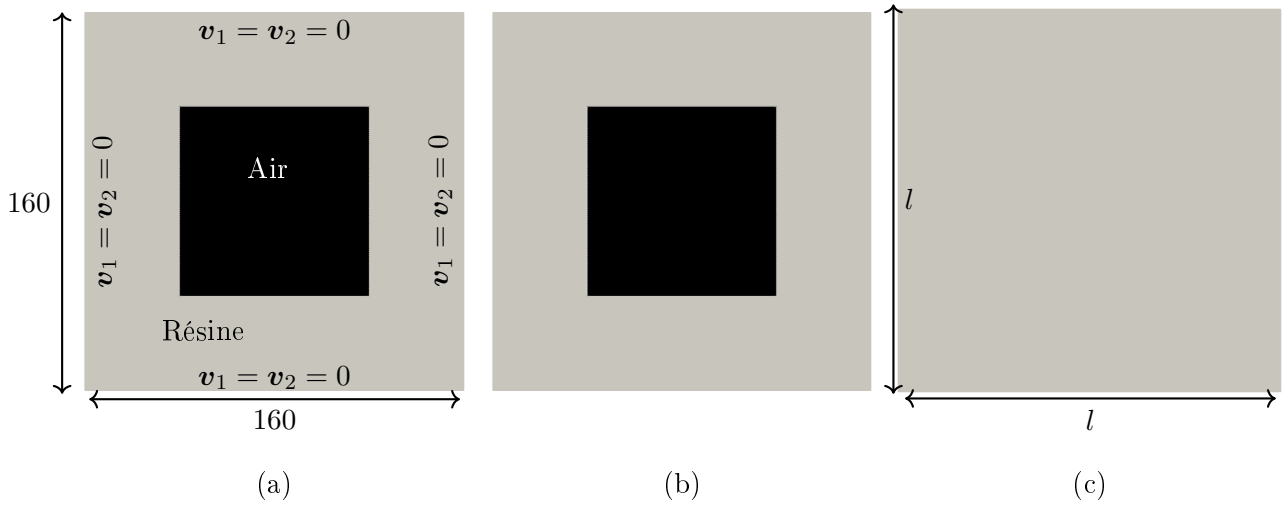


FIGURE 4.10 – Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème de transition d'une bulle carrée dans un milieu sans fibres : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en mm s^{-1}.

Dans chaque étude de convergence de maillage, nous évaluons la capacité du modèle à prédire correctement la forme de la bulle. Pour cela, nous déterminons sa circularité numérique et la comparons à la solution analytique ainsi qu'aux résultats de l'approche mono-échelle. Selon Kazantsev [75], la circularité numérique C_{num} est définie, pour chaque instant t, par :

$$C_{\text{num}}(t) = \frac{2\pi}{P(t)} \sqrt{\frac{S_b(t)}{\pi}}, \tag{4.48}$$

où $P(t)$ désigne le périmètre de la bulle et $S_b(t)$ son aire.

Dans le cadre de l'approche Level-Set, l'aire de la bulle et son périmètre sont évalués à partir de la fonction de Heaviside régularisée et de la fonction de Dirac régularisée appliquées au champ ϕ ou ϕ^M :

$$S_b(t) = \int_\Omega H(-\phi(\boldsymbol{x}, t))\ \mathrm{d}\Omega, \qquad P(t) = \int_\Omega \delta_\varepsilon(-\phi(\boldsymbol{x}, t))\ \mathrm{d}\Omega,$$

où δ_ε est la fonction de Dirac régularisée :

$$\delta_\varepsilon(-\phi) = \begin{cases} 0, & \text{si } |\phi| > \varepsilon, \\ \dfrac{1}{2\varepsilon}\left(1 + \cos\left(\dfrac{\pi\phi}{\varepsilon}\right)\right), & \text{si } |\phi| \leq \varepsilon. \end{cases} \tag{4.49}$$

Numériquement, les formules employées pour estimer le périmètre et l'aire conduisent à une sous-évaluation de la zone occupée par la bulle lorsque le maillage est trop grossier, en raison du fait qu'une partie de la zone de régularisation déborde du domaine de calcul. Cette approximation se traduit par une surestimation de la circularité par rapport aux valeurs de référence. Afin de réduire cet effet lié à la discrétisation, une méthode géométrique est adoptée pour le calcul du périmètre et de l'aire de la bulle.

Dans cette optique, pour chaque niveau de maillage, la géométrie initiale ainsi que la géométrie finale au dernier pas de temps sont présentées dans la figure 4.11.

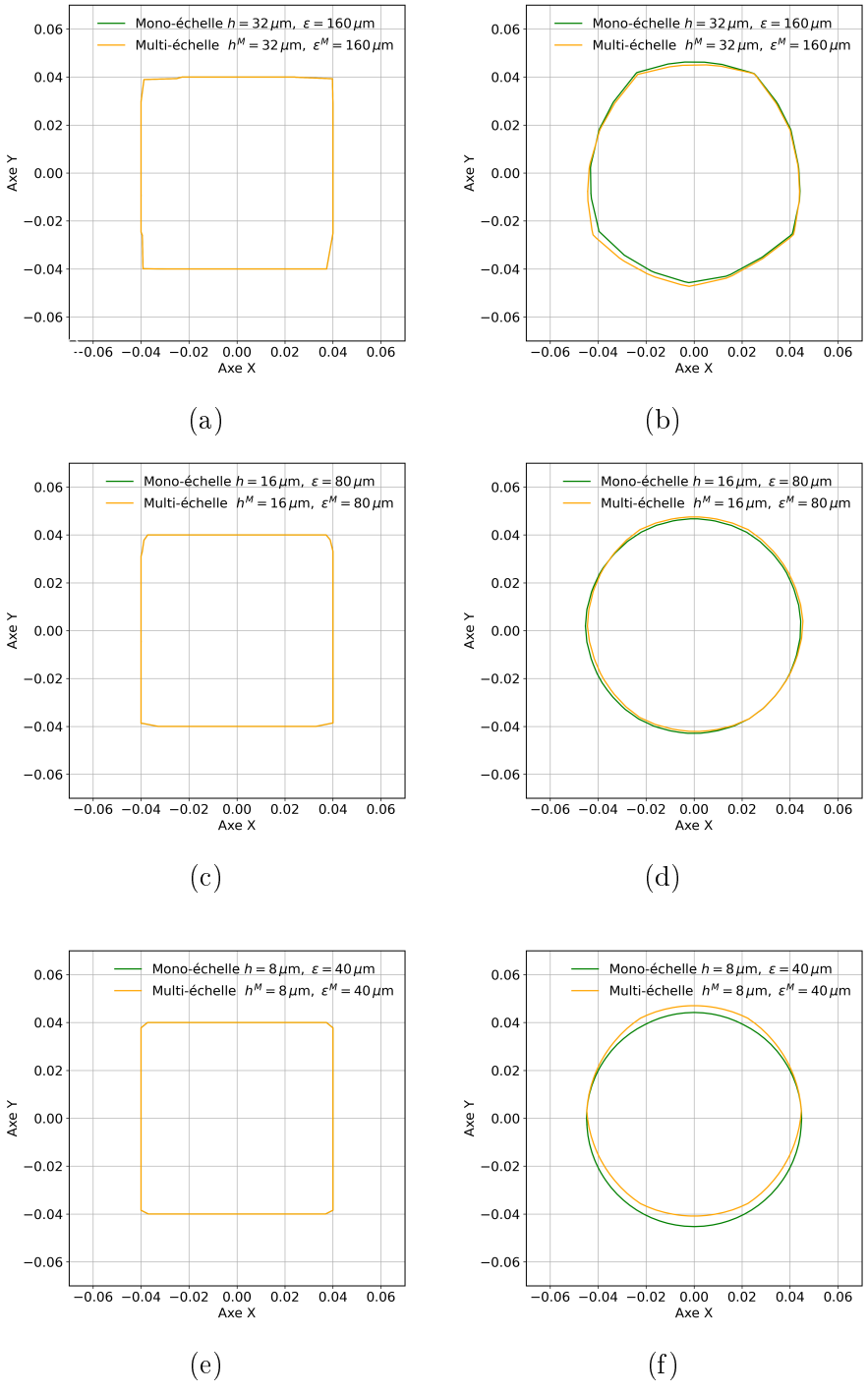


FIGURE 4.11 – Forme de l'interface résine–air pour un problème de transition d'une bulle carrée statique en milieu sans fibres, comparée entre l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures (a), (c) et (e) correspondent à $t = 0$ s, tandis que (b), (d) et (f) correspondent à $t = 0.01$ s.

Comme on peut le constater sur la figure 4.11, plus la taille des éléments est petite, plus la forme de la bulle est correctement prédite, aussi bien à l'état initial avec une bonne superposition qu'à l'état final. Néanmoins, on peut également remarquer un léger déphasage sur la sous-figure (f) de la figure 4.11. Celui-ci n'est pas dû au pas de temps, puisque les deux simulations ont été réalisées avec un pas de temps identique. Afin de valider plus précisément les formes prédites par le modèle multi-échelle, la circularité est illustrée sur la figure 4.12.

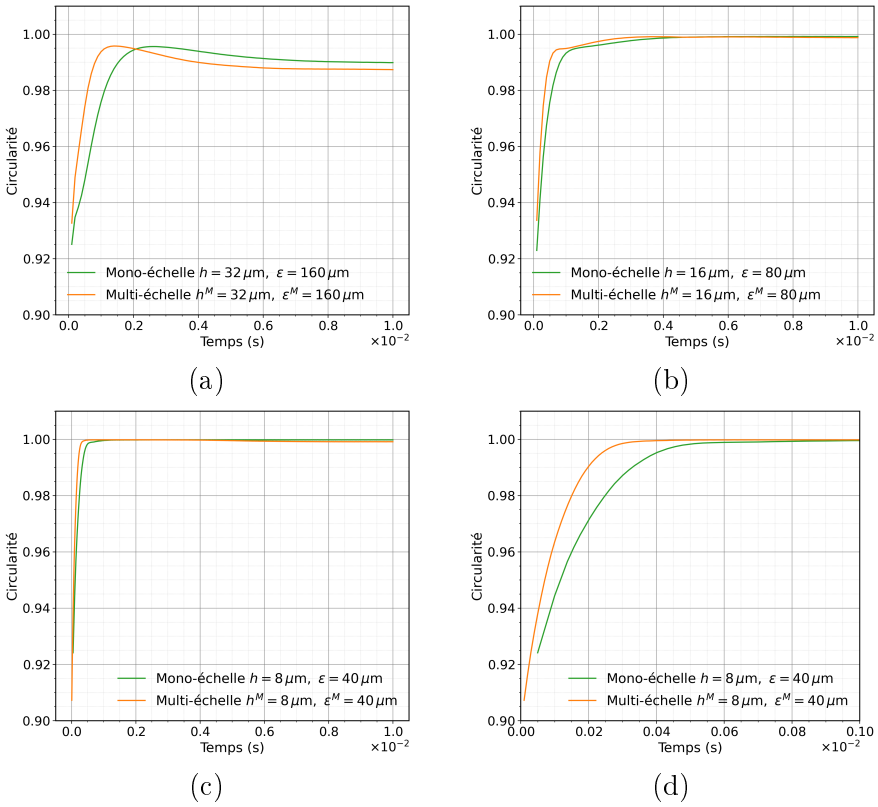


FIGURE 4.12 – Circularité pour le problème de transition d'une bulle carrée statique en milieu sans fibres, comparée entre l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle, pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures (a) correspondent à $h = 32$ μm, (b) à $h = 16$ μm, (c) à $h = 8$ μm, et (d) présente un zoom sur (c).

La figure 4.12 présente l'évolution de la circularité et confirme la précision du modèle multi-échelle lorsque le maillage est raffiné. En effet, la circularité analytique d'une bulle initialement carrée est d'environ 0,88 ; cette valeur doit ensuite tendre vers 1,0 lorsque la bulle adopte une forme circulaire à l'état final. On constate que, pour $h^M = 32$ μm, la cinétique de l'approche multi-échelle est plus rapide que celle de l'approche mono-échelle. De plus, la valeur de la circularité reste inférieure à 1. En revanche, pour $h^M = 16$ μm et $h^M = 8$ μm, on observe une bonne concordance cinétique entre les deux approches, avec une circularité qui atteint plus rapidement le plateau à 1. Dans le cas $h^M = 8$ μm, la circularité obtenue se rapproche très près de la solution mono-échelle, ce qui indique que le modèle prédit correctement le temps nécessaire à la bulle pour devenir circulaire, soit $t = 0{,}01$ s.

Pour conclure cette analyse du cas de la bulle carrée dans un milieu homogène, nous présentons la circularité en fonction de la taille de l'élément et du diamètre de la bulle, afin d'identifier le facteur exerçant l'influence la plus marquée sur la précision de la prédiction multi-échelle.

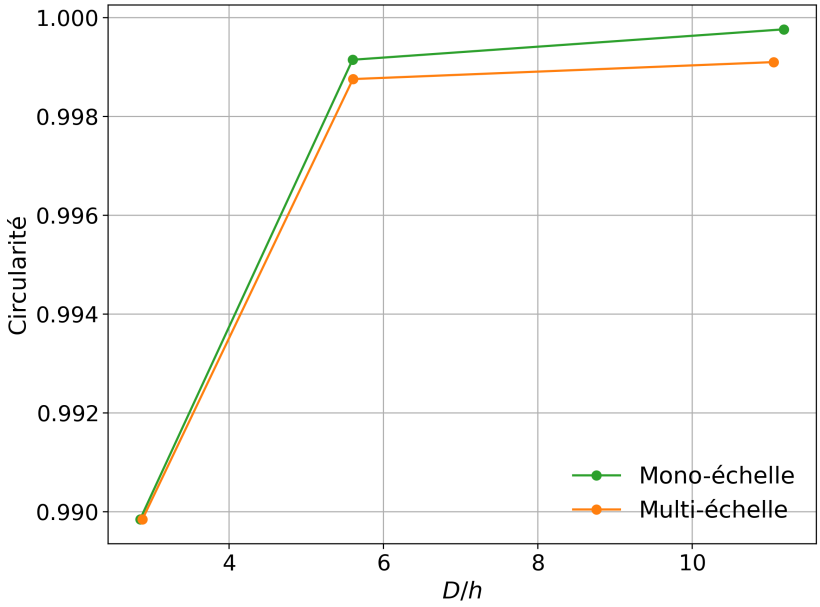


FIGURE 4.13 – Circularité en fonction de la taille d'élément et du diamètre de la bulle.

La figure 4.13 illustre l'évolution de la circularité en fonction du rapport entre le diamètre de la bulle et la taille des éléments, évaluée au dernier pas de temps pour les simulations mono-échelle et multi-échelle. Une bonne concordance est observée entre les deux approches.

On remarque que, lorsque la taille des éléments est trop grande, la circularité obtenue est inférieure à 1,0. Or, au dernier pas de temps, la bulle devrait être parfaitement circulaire, ce qui implique une circularité tendant vers 1,0. Cette condition n'est pas satisfaite pour les maillages grossiers, mais elle est progressivement atteinte lorsque le maillage est raffiné.

On en conclut que le modèle multi-échelle fournit des prédictions précises à condition d'utiliser un ratio D/h élevé, mettant ainsi en évidence l'influence du maillage sur la qualité des résultats.

4.3.3.2 Milieu poreux : convergence et validation multi-échelle

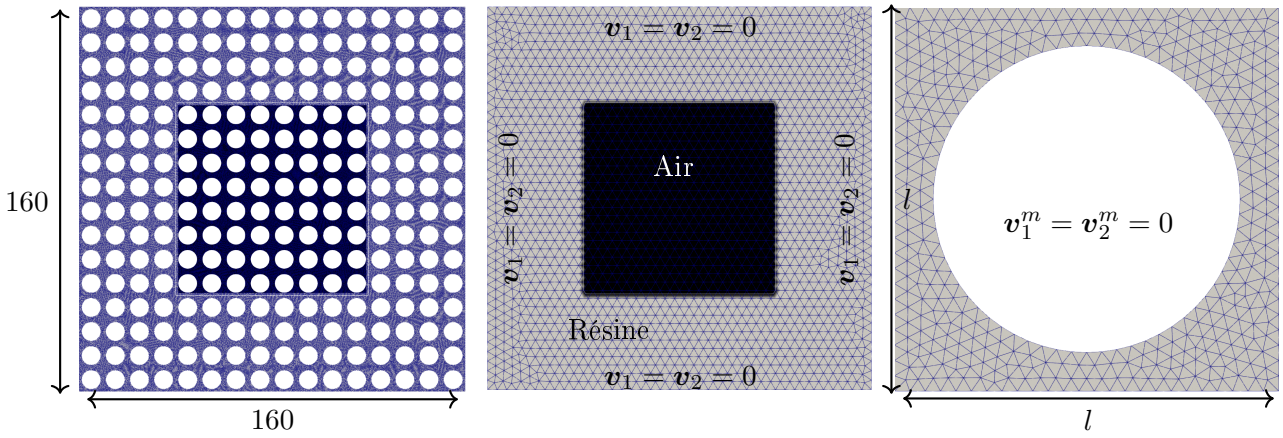
Dans cette étude de cas portant sur la transition d'une bulle carrée statique dans un milieu poreux, nous conservons les mêmes propriétés physiques pour la résine époxy et pour l'air, ainsi que les mêmes dimensions initiales de la bulle. La différence majeure réside dans le fait que, pour la simulation mono-échelle, les fibres sont directement modélisées et discrétisées dans le domaine de calcul. Celles-ci possèdent un diamètre $D = 7,8\ \mu$m, tandis que la taille de maille utilisée est $h = 0,4\ \mu$m, comme illustré dans la figure 4.14 (a).

En ce qui concerne la simulation multi-échelle, chaque point d'intégration du domaine à grande échelle est associé à un VER hétérogène avec un taux de porosité de 52 %,

comme on peut le voir sur les figure 4.14 (b) et (c).

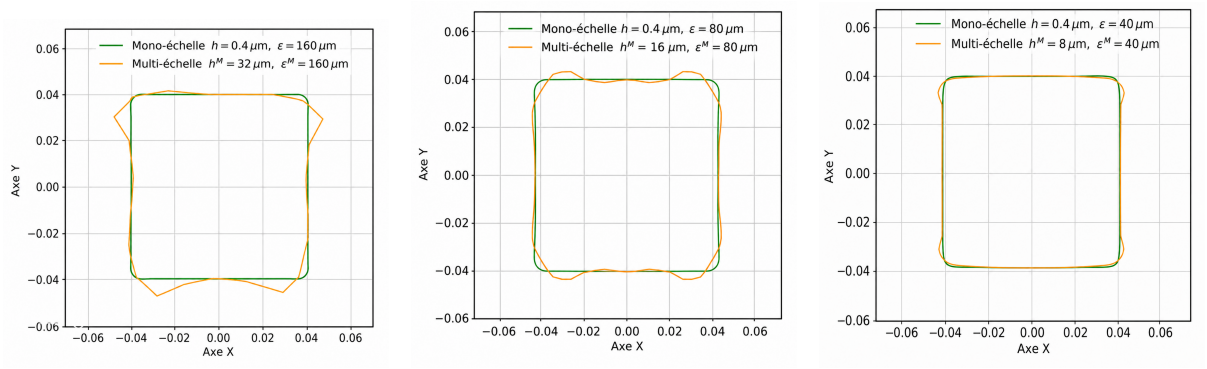
L'objectif de cette étude est non seulement d'analyser la transition de la bulle carrée vers une forme circulaire dans un milieu poreux, mais également d'évaluer le coût de calcul associé aux deux approches de modélisation. Pour ce faire, nous considérons trois tailles de maillage pour le modèle multi-échelle, à savoir $h^M = 32$ μm, $h^M = 16$ μm et $h^M = 8$ μm, chacune étant associée à une épaisseur de lissage des propriétés fixée à $\varepsilon^M = 5\,h^M$. En revanche, pour la simulation mono-échelle, la taille de maille est maintenue constante et égale à $h = 0,4$ μm, ce qui conduit à un total de 127 244 éléments finis.

Pour le modèle multi-échelle, le cas $h^M = 32$ μm conduit à un maillage comprenant 66 éléments à la grande échelle et 754 éléments à la petite échelle, soit un total de $66 \times 754 \times 6 = 298\,584$ éléments finis. Pour $h^M = 16$ μm, le maillage comporte 246 éléments à la grande échelle pour les mêmes 754 éléments à la petite échelle, ce qui représente $246 \times 754 \times 6 = 1\,112\,904$ éléments finis. Enfin, pour $h^M = 8$ μm, on obtient 948 éléments à la grande échelle et 754 éléments à la petite échelle, soit un total de $948 \times 754 \times 6 = 4\,288\,752$ éléments finis.



(a) (b) (c)

FIGURE 4.14 – Domaines, conditions aux limites et discrétisation par éléments finis utilisés pour le problème de transition d'une bulle carrée dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle avec $h = 0.4$ μm, (b) domaine de grande échelle avec $h^M = 8$ μm, (c) domaine hétérogène de petite échelle avec $h = 0.4$ μm. Les longueurs sont exprimées en μm et les vitesses en $\mathrm{mm\,s^{-1}}$.



(a) (b) (c)

FIGURE 4.15 – Évolution transitoire de la bulle carrée en milieu poreux, comparant l'approche multi-échelle et l'approche mono-échelle pour différentes tailles d'éléments. Les sous-figures présentent les résultats pour : (a) $h^M = 32$ μm, (b) $h^M = 16$ μm et (c) $h^M = 8$ μm.

Les formes de la bulle obtenues à $t = 0.01$ s avec les deux approches sont présentées sur la figure 4.15. On y observe que la transition vers une configuration circulaire est plus difficile dans la simulation mono-échelle, en raison de la modélisation directe des fibres qui perturbent localement l'évolution de l'interface. De manière similaire, dans la simulation multi-échelle, cette transformation reste lente malgré la séparation des échelles.

À ce même instant physique, alors que la bulle atteignait déjà une forme parfaitement circulaire dans un milieu sans fibres, il apparaît clairement que cet état n'est pas encore obtenu en milieu poreux. Cela montre que la présence des fibres limite l'action de la tension de surface, en particulier au niveau des coins de la bulle, empêchant ainsi une transition rapide. Pour y parvenir, il est donc nécessaire d'augmenter la durée de la simulation, ce qui s'avère très coûteux en temps de calcul pour l'approche mono-échelle.

Nous présentons ci-après un tableau synthétique récapitulant, pour chaque configuration de maillage, les performances temporelles obtenues ainsi que les ressources matérielles mobilisées lors des calculs parallèles.

Approche	T_f **(s)**	ε^M (μm)	**Temps (h)**	N_T	**CPUs**	**CPU.h**
Mono-échelle	0.01	160	26.27	100	2	52.54
Multi-échelle	0.01	160	0.86	100	12	10.32
Mono-échelle	0.01	80	2.18	154	18	39.24
Multi-échelle	0.01	80	2.73	100	12	32.76
Mono-échelle	0.01	40	34.54	1072	18	621.72
Multi-échelle	0.01	40	10.16	100	12	121.92

TABLE 4.2 – Temps de calcul post-traités pour les approches mono-échelle et multi-échelle.

Dans le tableau 4.2, la variable N_T représente le nombre total de pas de temps effectués au cours de la simulation ($T_f = 0.01$ s). À partir de cette donnée, on observe que l'approche multi-échelle respecte strictement les 100 pas initialement prévus, contrairement à la simulation mono-échelle. Cet écart s'explique par la réduction automatique du pas de temps dans le modèle mono-échelle lorsque la condition CFL n'est plus satisfaite. En effet, le logiciel `FEMS` intègre un algorithme d'adaptation temporelle visant à garantir la stabilité numérique, ce qui justifie l'augmentation significative du nombre de pas N_T observée lors du raffinement.

Pour mieux interpréter le coût numérique global, la colonne **CPU.h** quantifie le temps cumulé effectif dédié par les processeurs à la résolution du problème. On constate que le raffinement du maillage, qui s'accompagne d'une réduction de l'épaisseur de lissage ε^M liée à la taille des éléments, induit une hausse du temps d'exécution pour les deux méthodes.

Cependant, le coût de l'approche multi-échelle demeure systématiquement inférieur à celui de la configuration mono-échelle. La différence est particulièrement flagrante pour $\varepsilon^M = 40$ μm, où cette dernière s'avère environ cinq fois plus gourmande en ressources. Ces résultats confirment que le modèle multi-échelle constitue un excellent compromis entre précision et coût d'exploitation, offrant des temps de résolution raisonnables sans dégradation de la qualité des données physiques.

En résumé, ce second cas d'étude, portant sur la transition d'une bulle initialement carrée vers une configuration circulaire, met en évidence les points suivants :

- Le modèle multi-échelle présente une bonne capacité prédictive de l'évolution de la circularité sous l'effet de la tension de surface, pour une bulle initialement carrée évoluant dans un milieu fluide homogène. De plus, une diminution de la taille des éléments conduit à une meilleure précision numérique.
- L'introduction de fibres dans le domaine entraîne une augmentation du temps de calcul nécessaire pour atteindre une circularité quasi parfaite. Plus la taille de maille est réduite, plus le coût computationnel devient important.
- Une bonne corrélation est observée entre les simulations mono-échelle et multi-échelle, tant sur l'évolution géométrique de la bulle que sur les mesures de circularité obtenues.
- L'approche multi-échelle présente un intérêt majeur en termes de coût de calcul par rapport à l'approche mono-échelle, pour un niveau de précision comparable.

Après avoir validé la capacité prédictive du modèle multi-échelle sur ces configurations simples, nous allons aborder un cas d'application dédié aux matériaux composites, afin de prédire la migration de bulles au sein d'une mèche de fibres.

4.3.4 Application aux composites à renforts en fibres de carbone

Forts de ces résultats de validation obtenus sur des écoulements diphasiques en milieu poreux, nous consacrons cette sous-section à la simulation numérique de la dynamique d'une bulle d'air au sein d'un renfort fibreux. L'analyse porte en particulier sur l'évolution de sa vitesse de migration ainsi que sur l'évaluation du coût de calcul associé.

4.3.4.1 Migration de bulle d'air dans une mèche

Pour ce cas d'application, nous étudions la migration d'une bulle d'air au sein d'une mèche fibreuse. La configuration est établie conformément aux travaux de [118] (notamment leur Figure 15.48), qui analysent le phénomène de piégeage d'air ainsi que l'imprégnation de la résine au sein d'une mèche. À cet effet, nous considérons un domaine rectangulaire grande échelle de dimensions 1280×320 μm^2, centré en $\mathbf{0}$ et discrétisé au moyen d'un maillage de référence de taille $h^M = 25.6$ μm, comprenant au total $1492 \times 754 \times 6 = 6\,749\,808$ éléments finis. À chaque point de la de grande échelle, on associe un VER hétérogène présentant une porosité de 52 %, identique à celui utilisé dans les simulations précédentes, et soumis aux mêmes conditions aux limites à la petite échelle (voir la figure 4.14(c)).

La mèche est imprégnée d'une résine époxy de viscosité dynamique 0.2 Pa $\cdot$ s, dans laquelle est immergée une bulle d'air de diamètre 160 μm et de viscosité 18.5×10^{-6} Pa$\cdot$s, initialement positionnée en $(-0.40$ mm, 0 mm). La tension de surface résine/air est fixée à 31.7×10^{-3} N $\cdot$ m^{-1}. La simulation est effectuée avec un pas de temps $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ s, jusqu'au temps final $t = 6 \times 10^{-1}$ s. Les conditions aux limites appliquées sont illustrées sur la figure 4.16.

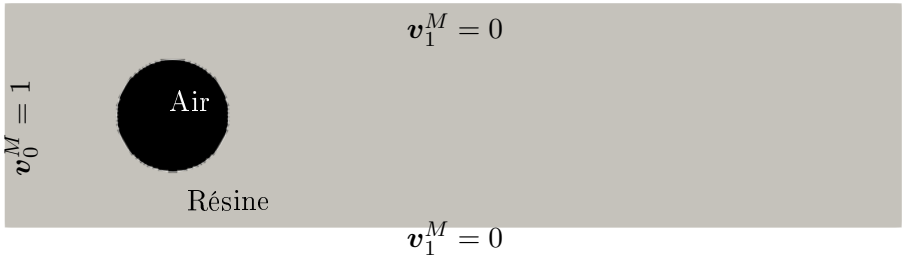


FIGURE 4.16 – Domaine de grande échelle et conditions aux limites pour la simulation de la migration d'une bulle au sein d'une mèche de composite. Les longueurs sont exprimées en micromètres (μm) et les vitesses en millimètres par seconde (mm $\cdot$ s^{-1}).

Afin d'évaluer le coût numérique de l'approche mono-échelle et de le comparer à celui de la méthode multi-échelle, les fibres ont été modélisées directement dans le domaine d'étude (voir figure 4.17). Cette configuration inclut un total de 4096 fibres de diamètre $D = 7.8$ μm. Le milieu est discrétisé avec une taille de maille $h = 0.04$ μm, soit un nombre total de 3 266 072 éléments finis. Les conditions aux limites appliquées sont identiques à celles spécifiées pour l'approche multi-échelle sur la figure 4.16.

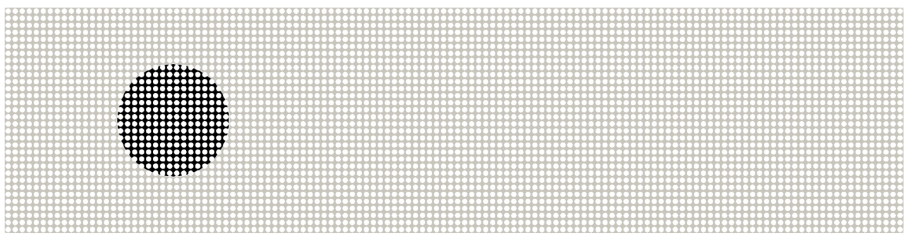
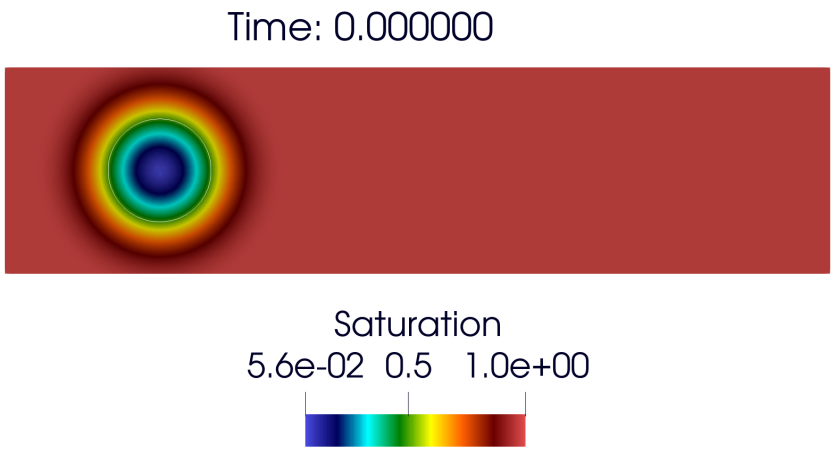
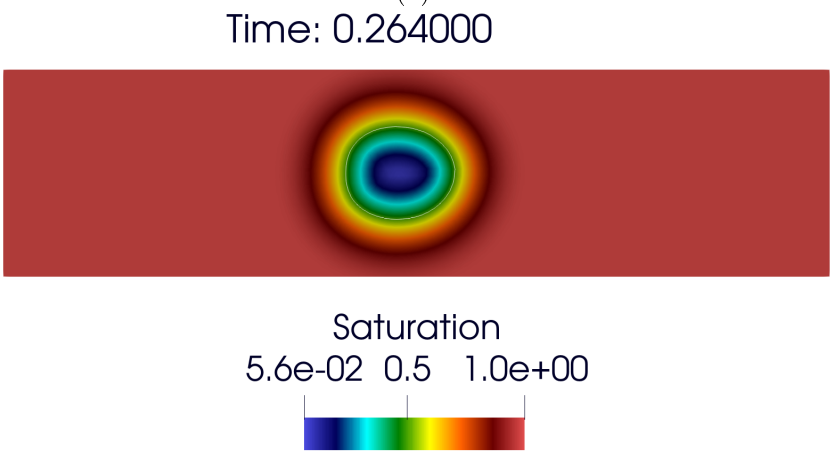


FIGURE 4.17 – Domaine mono-échelle pour la simulation de la migration de la bulle d'air au sein d'une mèche de composite.

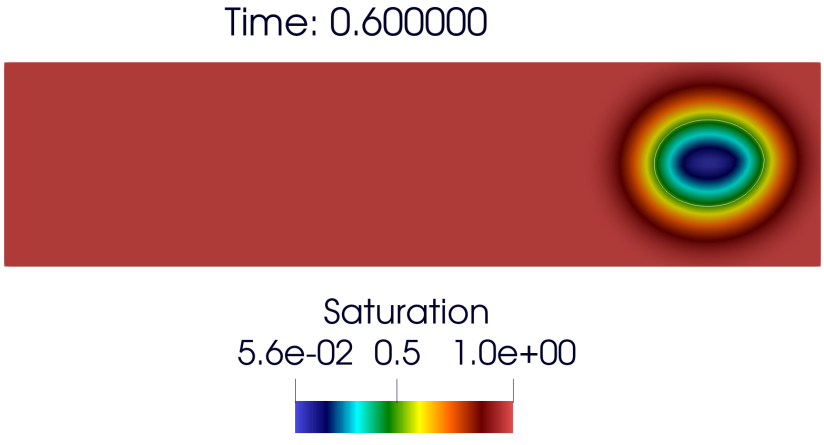
La figure 4.18 présente le champ de saturation à trois instants différents, prédit par le modèle multi-échelle. Cette figure illustre la progression de la bulle d'air ainsi que les modifications de sa morphologie sous l'effet de l'écoulement environnant au sein du domaine de la grande échelle. On observe que la saturation vaut idéalement 1 dans la phase liquide, alors qu'elle demeure inférieure à 0.5 au cœur de la phase gazeuse. Cette valeur non nulle s'explique par l'épaisseur de lissage requise pour la régularisation des propriétés — de l'ordre de 128 μm —, alors que le rayon initial de la bulle est de $R = 80$ μm. Ce choix de paramètre permet notamment de limiter le coût computationnel global.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 4.18 – Position et morphologie de la bulle d'air dans la mèche aux instants : (a) $t = 0.0$ s, (b) $t = 0.264$ s et (c) $t = 0.60$ s.

Pour mieux interpréter la saturation de la résine au sein du milieu, l'analyse du champ de pression s'avère particulièrement instructive.

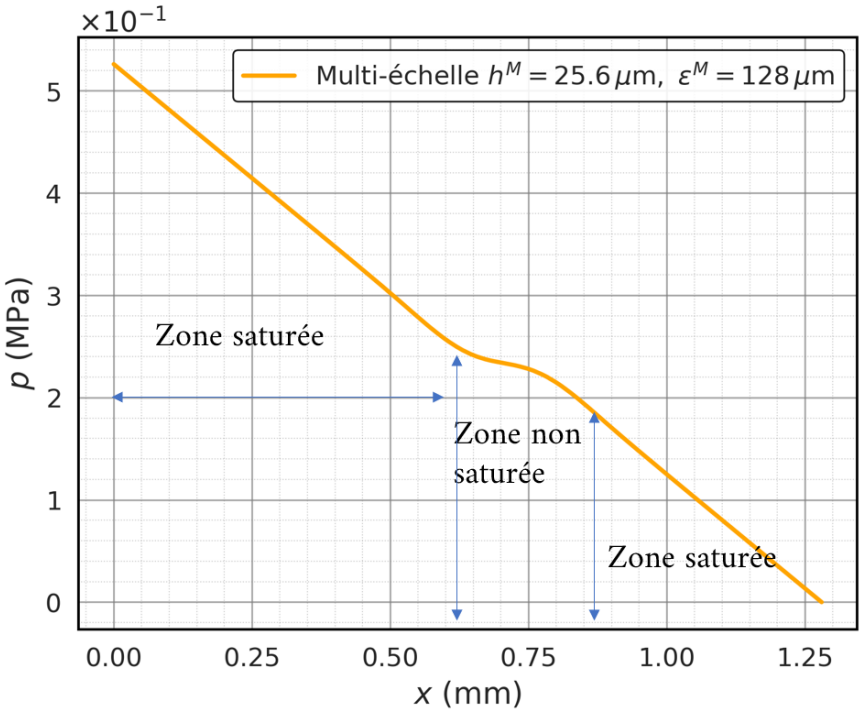


FIGURE 4.19 – Évolution de la pression le long de l'axe $\boldsymbol{x}$, évaluée pour $\boldsymbol{y} = 0.165\,\text{mm}$, pour le problème de migration de la bulle dans la mèche.

Le profil tracé sur la figure 4.19 permet de distinguer clairement la zone saturée de la région non saturée. La portion linéaire de la courbe correspond à la zone saturée, où le fluide présente un comportement homogène. En revanche, la rupture de linéarité caractérise la zone non saturée, associée ici à la bulle d'air. Cette non-linéarité résulte du saut de pression de part et d'autre de l'interface, lequel est directement équilibré par la tension de surface entre les deux phases.

4.3.4.2 Coût de calcul

Nous procédons dans cette partie à l'évaluation et à la comparaison du coût numérique associé à chaque approche.

Approche	T_f **(s)**	ε^M (μm)	**Temps (h)**	N_T	**CPU**	**CPU.h/s**
Mono-échelle	1.29×10^{-3}	128	96.04	213	4	297 798
Multi-échelle	0.6	128	119.08	727	128	25 403

TABLE 4.3 – Comparaison des coûts de calcul entre les approches mono-échelle et multi-échelle pour le problème de migration de la bulle d'air.

L'analyse du tableau 4.3, en particulier de la colonne **CPU.h/s**, montre clairement que la simulation mono-échelle d'une mèche contenant 4096 fibres s'avère prohibitive. En

effet, l'effort numérique requis dépasse largement des capacités de calcul raisonnables.

En revanche, le modèle multi-échelle diphasique développé permet de réduire ce coût d'un facteur d'environ $\frac{297\,798}{25\,403} \approx 11.7$, rendant ainsi la simulation tout à fait réalisable dans un délai acceptable. Par conséquent, compte tenu de la lourdeur excessive de l'approche directe, la suite de notre analyse se concentre exclusivement sur le modèle multi-échelle.

C'est dans ce cadre que nous étudions la vitesse moyenne de migration de la bulle. Celle-ci est calculée numériquement à l'aide de la relation suivante :

$$\boldsymbol{v}_b^M(t) = \frac{\displaystyle\int_{\Omega^M} H\big(-\phi^M(\boldsymbol{x},t)\big)\ \boldsymbol{v}^M(t)\,\mathrm{d}\Omega^M}{S_b(t)}\,\mathbf{e}_x, \tag{4.50}$$

où $\boldsymbol{v}^M(t)$ désigne le champ de vitesse grande échelle de la résine et $S_b(t)$ représente l'aire de la bulle en fonction du temps. Le terme $H\big(-\phi^M(\boldsymbol{x},t)\big)$, quant à lui, s'appuie sur la fonction Level-Set pour localiser précisément la phase gazeuse. Enfin, l'implémentation de ce post-traitement numérique permet d'aboutir aux résultats présentés sur la figure 4.20.

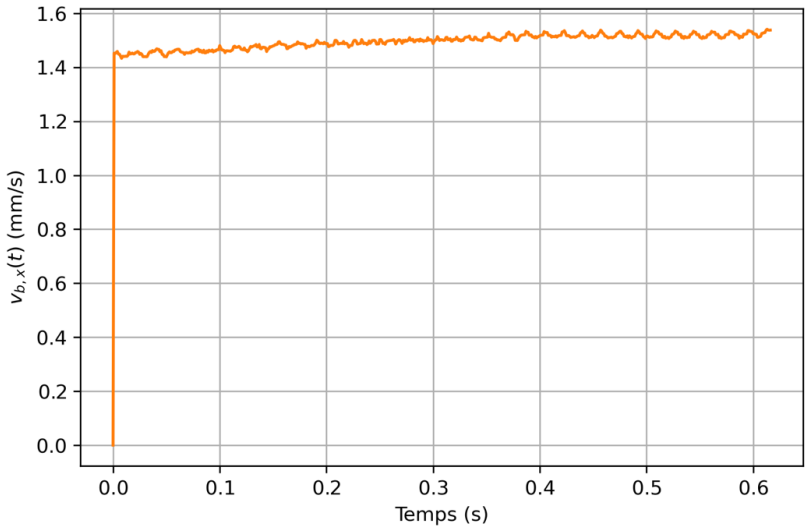


FIGURE 4.20 – Vitesse de migration de la bulle dans la mèche.

On observe que la vitesse moyenne de migration de la bulle atteint un plateau dont la valeur est supérieure à la vitesse d'injection imposée ($1\ \mathrm{mm}\cdot\mathrm{s}^{-1}$). Il convient toutefois de souligner que les oscillations temporelles observées sur cette courbe découlent directement de l'utilisation d'un schéma d'Euler implicite d'ordre 1 pour la discrétisation de l'équation de transport de l'interface. Ce comportement numérique pourrait vraisemblablement être atténué en recourant à un schéma d'ordre supérieur, offrant ainsi une meilleure précision temporelle.

Néanmoins, afin de vérifier la cohérence de cette prédiction numérique issue de la relation (4.50), nous procédons en parallèle à une estimation géométrique indépendante. Pour

ce faire, nous suivons la trajectoire d'un point matériel de l'interface, noté A, initialement positionné en $A_0 = (0.161,\ 0.16)$ mm à $t = 0$ s. Au terme de la simulation ($t = 0.60$ s), ce même point atteint la position $A_t = (1.107,\ 0.16)$ mm. La vitesse moyenne de migration est alors déduite de la relation cinématique élémentaire :

$$\boldsymbol{v}_b = \frac{d(A_0, A_t)}{t}\mathbf{e}_x, \tag{4.51}$$

ce qui conduit à la valeur suivante :

$$\boldsymbol{v}_b = 1.482 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Cette estimation analytique confirme de manière satisfaisante l'ordre de grandeur obtenu par le post-traitement intégral.

Dans le but d'élargir cette étude à d'autres régimes d'écoulement, plusieurs vitesses d'injection de la résine ont été testées : 0.1, 0.5, 1.0 et 2.0 mm $\cdot$ s^{-1}. La figure 4.21 illustre la synthèse des résultats obtenus pour ces différentes configurations.

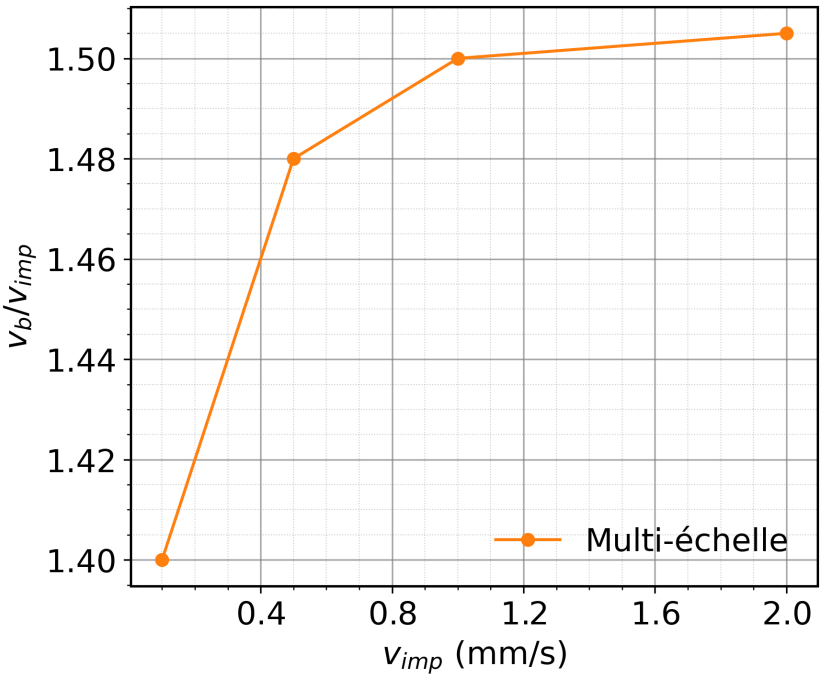


FIGURE 4.21 – Rapport adimensionnel entre la vitesse moyenne de la bulle d'air et la vitesse d'injection de la résine, en fonction de la vitesse imposée, pour le problème de migration au sein de la mèche.

Les points représentés sur la figure 4.21 correspondent à la vitesse moyenne de la bulle calculée sur le plateau stationnaire propre à chaque cas, puis normalisée par la vitesse de fluide imposée. On constate que, pour l'ensemble des vitesses explorées, la bulle d'air se déplace plus rapidement que la phase liquide porteuse.

À terme, des investigations supplémentaires seront requises afin de déterminer s'il existe une vitesse critique en deçà de laquelle la bulle migrerait plus lentement que la

résine, comme cela a pu être rapporté dans la littérature [86, 87]. À cet effet, il serait intéressant d'analyser l'influence de la compacité géométrique du milieu poreux, notamment en augmentant la fraction volumique locale de fibres ou en réduisant la porosité globale du réseau.

Conclusion

En conclusion, ce chapitre a été consacré au développement d'un modèle numérique multi-échelle dédié à l'écoulement diphasique en milieux poreux. Plus précisément, les équations d'écoulement de ce modèle ont été obtenues à partir des dérivées de forces et de contraintes calculées au niveau de la petite échelle. L'équation de transport de l'interface à la grande échelle résulte, quant à elle, de l'homogénéisation de l'équation d'advection.

Pour ce faire, le domaine de petite échelle a été modélisé sous la forme d'un VER contenant une fibre unique. Les équations gouvernant l'écoulement ainsi que l'initialisation de l'interface à cette échelle ont été détaillées, en intégrant rigoureusement les effets de la tension de surface. Par la suite, le système d'équations couplées a été discrétisé à l'aide de la méthode des éléments finis, avant d'être implémenté numériquement au sein du code de calcul `FEMS`.

Sur le plan opérationnel, le tenseur obtenu à partir des dérivées de forces et de contraintes est directement exploité pour réaliser la simulation à la grande échelle, au sein de laquelle l'interface est advectée par le champ de vitesse homogénéisé. En définitive, l'un des principaux avantages du modèle ainsi développé réside dans sa capacité à prendre rigoureusement en compte les effets de tension de surface à la petite échelle tout en permettant des simulations sur des domaines de grande taille. Cette approche s'avère pertinente à l'échelle d'une mèche de fibres, où le rayon des fibres reste largement inférieur aux dimensions globales du domaine d'étude.

Les simulations numériques réalisées à l'aide de ce modèle ont porté, dans un premier temps, sur le comportement d'une bulle statique, d'abord au sein d'un fluide homogène, puis dans un milieu poreux. Dans ce cadre, une attention particulière a été accordée à l'évolution des champs de saturation ainsi qu'aux profils de pression le long de l'axe horizontal. Les comparaisons menées avec l'approche mono-échelle ont alors démontré que le modèle multi-échelle offre une excellente précision, qui s'accroît logiquement avec le raffinement du maillage à la grande échelle. Dans un second temps, l'étude de la transition d'une bulle initialement carrée vers une configuration circulaire a permis de confirmer la capacité du modèle à reproduire fidèlement la dynamique géométrique de l'interface. L'examen croisé des formes finales et des indices de circularité obtenus avec les deux approches a ainsi permis de valider la robustesse du modèle développé.

Au-delà de ces aspects géométriques, la comparaison des temps de calcul en **CPU.h/s** a mis en évidence que, pour des simulations diphasiques en milieux poreux sur de grands domaines, l'approche multi-échelle constitue une alternative moins coûteuse que l'approche directe. Enfin, le modèle a été appliqué à un cas d'application représentatif des

procédés de fabrication des composites, à savoir la migration d'une bulle d'air au sein d'une mèche fibreuse. Conformément aux observations expérimentales de la littérature [86, 87, 119], le modèle a prédit une vitesse de migration de l'inclusion supérieure à celle de la résine. Or, tandis que l'approche mono-échelle s'avère prohibitive en termes de ressources numériques pour ce type de configuration hétérogène, l'approche multi-échelle permet de capturer ce phénomène physique complexe sans recourir à des lois empiriques, tout en maintenant un coût de calcul raisonnable.

En guise d'ouverture, le modèle multi-échelle ainsi développé offre de prometteuses perspectives de modélisation. Il est notamment envisagé d'intégrer un angle de contact dynamique au niveau de la petite échelle, afin de décrire finement les phénomènes de mouillabilité locale au sein des réseaux fibreux.

Chapitre 5

Modélisation multi-échelle de la mouillabilité

Contents

Introduction . . . 137
5.1 Modèle multi-échelle diphasique . . . 137
5.1.1 Problème de grande échelle . . . 138
5.1.2 Problème à la petite échelle . . . 138
5.2 Méthode numérique . . . 142
5.2.1 Discrétisation éléments finis . . . 142
5.2.2 Algorithme du couplage multi-échelle . . . 144
5.3 Résultats mono-échelle . . . 145
5.3.1 Simulation de l'étalement d'une goutte . . . 145
5.3.2 Simulation d'un écoulement diphasique à interface courbe . . . 151
5.4 Résultats multi-échelle . . . 154
5.4.1 Simulation d'une montée capillaire dans un milieu poreux . . . 154
5.4.2 Simulation d'injection de résine dans un milieu poreux . . . 158
5.4.3 Influence de la condition de Navier . . . 163
Conclusion . . . 167

Introduction

L'écoulement diphasique en milieu poreux, précisément à l'échelle des fibres, est gouverné par les effets capillaires ainsi que par les interactions entre les fluides et les parois solides. Parmi ces interactions, la mouillabilité, caractérisée par l'angle de contact à l'interface liquide-gaz-solide, joue un rôle prépondérant dans l'évolution des lignes de contact et influence directement la morphologie des interfaces.

Dans la littérature, le phénomène de mouillabilité est traditionnellement modélisé à l'aide des équations de Navier-Stokes incompressibles, associées à un traitement spécifique de l'interface liquide-gaz et de la ligne de contact selon une approche mono-échelle. Pour ce faire, le suivi d'interface repose généralement sur des méthodes numériques telles que le *Volume of Fluid*, le *Level-Set* ou le *Phase Field*. Cependant, ces modèles d'angle de contact et de glissement aux parois requièrent un raffinement local du maillage afin de limiter les artefacts numériques et les singularités de contraintes [5, 10] au niveau de la ligne de contact. Or, ce raffinement de maillage entraîne une augmentation significative du coût de calcul en simulation directe. Par ailleurs, même en présence d'un maillage fin, la capture rigoureuse de la mouillabilité reste délicate. En effet, les schémas numériques standards peinent à représenter de manière satisfaisante les comportements singuliers de la pression et du cisaillement au voisinage de la ligne de contact [151].

Pour pallier ces limites, nous proposons dans ce chapitre d'intégrer le phénomène de mouillabilité au sein du modèle numérique multi-échelle déjà développé, tout en conservant un coût de calcul raisonnable. L'approche retenue repose sur la méthode *Level-Set*, enrichie par l'introduction d'une condition de frottement de Navier sur les parois des fibres ainsi que par une prise en compte implicite de l'angle de contact. Cette modélisation vise à représenter de manière plus réaliste la dynamique de la ligne de contact au sein des écoulements diphasiques en milieux poreux.

La première partie de ce chapitre est consacrée à la présentation des équations de base nécessaires à la description du phénomène de mouillabilité à la petite échelle, ainsi qu'à la dérivation des équations à la grande échelle dans le cadre de l'approche multi-échelle. La deuxième section détaille les schémas numériques adoptés pour la résolution du problème à chaque échelle, ainsi que l'algorithme de couplage inter-échelles. La troisième section présente les résultats numériques mono-échelles obtenus sur des cas tests de référence, incluant un problème d'étalement de goutte et un écoulement à interface courbe, afin de les comparer aux données de la littérature. Enfin, la quatrième section est dédiée aux simulations multi-échelles appliquées à des cas de montée capillaire dans des tubes et d'injection de résine en milieu poreux. Les résultats obtenus sont confrontés à ceux de l'approche mono-échelle afin de valider la pertinence et la précision du modèle multi-échelle proposé.

5.1 Modèle multi-échelle diphasique

Nous présentons dans cette section les modèles d'écoulement diphasique aux grande et petite échelles, en nous appuyant sur le cadre établi au Chapitre 3. Le problème à la petite échelle fait ensuite l'objet d'une description approfondie.

5.1.1 Problème de grande échelle

Dans la continuité des développements du Chapitre 3, le modèle multi-échelle diphasique (4.1), qui repose sur un couplage entre le modèle d'écoulement et l'équation d'advection à la grande échelle, conserve sa forme forte suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{f}^M(\boldsymbol{x}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} p^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M, \\ \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{v}_D^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_D^M, \\ \left(\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}(\boldsymbol{x}) - p^M(\boldsymbol{x})\mathbf{I}\right)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{t}_N^M(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x} \in \Gamma_N^M, \\ \dfrac{\partial \phi^M}{\partial t}(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{v}^M(\boldsymbol{x},t) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi^M(\boldsymbol{x},t) = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega^M. \end{cases} \tag{5.1}$$

où $\mathbf{I}$ désigne la matrice identité, $\boldsymbol{n}$ la normale sortante au bord du domaine d'étude, $\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}}$ la partie déviatorique du tenseur des contraintes de Cauchy, $\boldsymbol{t}_N^M$ la condition de Neumann imposée sur Γ_N^M, et $\boldsymbol{v}_D^M$ la condition de Dirichlet définie sur Γ_D^M.

Il convient de noter que l'ensemble des conditions cinématiques multi-échelles, ainsi que les conditions aux limites périodiques détaillées dans la sous-section 4.1.1, restent valables dans ce chapitre. La seule différence réside dans le fait qu'à la petite échelle, nous tenons désormais compte de l'angle de contact défini à l'interface entre la phase solide et les deux phases fluides (le liquide et le gaz).

5.1.2 Problème à la petite échelle

Dans cette sous-section, nous reprenons le modèle à l'échelle locale de l'écoulement diphasique présenté au Chapitre 3 c'est-à-dire la relation (4.22), dans lequel une condition de non-glissement était imposée sur la paroi des fibres. Pour rappel, ce modèle, défini au sein du VER Ω^m, s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{cases} -\nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \left(2\mu^m(\boldsymbol{y},t)\nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\right) + \nabla_{\boldsymbol{y}} p^m(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{f}_s^m(\boldsymbol{y}) = 0, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \\ \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = 0, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Omega^m, \\ \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^-) = \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{y}^+), & \forall\, \boldsymbol{y}^- \in \partial\Omega^{m,-}, \\ \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = 0, & \forall\, \boldsymbol{y} \in \Gamma_O^m, \\ \phi^m(\boldsymbol{y},t) = \phi^M(\boldsymbol{x},t) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \phi^M(\boldsymbol{x},t) \cdot \boldsymbol{y} + \dfrac{1}{2} \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 \phi^M(\boldsymbol{x},t) : (\boldsymbol{y} \otimes \boldsymbol{y} - \mathbf{C}). \end{cases} \tag{5.2}$$

Nous proposons ensuite une extension de ce modèle afin d'introduire la notion d'angle de contact, définie à l'intersection entre la paroi solide de la fibre et l'interface liquide-gaz en mouvement au cours de l'écoulement. L'introduction de cet angle de contact permet de modéliser le phénomène de glissement au voisinage de la paroi solide ainsi que la dynamique de la ligne de contact.

Pour formaliser cette extension, nous nous appuyons sur le cadre théorique présenté au Chapitre 1, plus précisément au sein de la sous-sous-section 2.1.4.3, qui se révèle particulièrement adapté à la description de ce type de phénomène. La dynamique de la ligne de contact au cours de l'écoulement ainsi que les différentes grandeurs géométriques associées sont représentées schématiquement sur la figure 5.1.

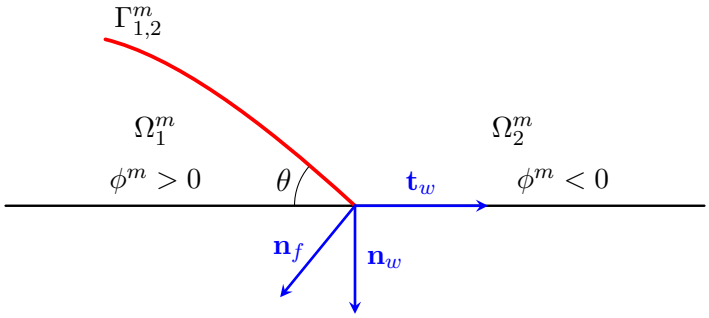


FIGURE 5.1 – Schéma de la dynamique de la ligne de contact et définition de l'angle de contact.

Comme l'illustre ce schéma, Ω^m_1 et Ω^m_2 désignent les domaines occupés par chacun des deux fluides, caractérisés par le signe de la fonction Level-Set ϕ^m, tandis que $\Gamma^m_{1,2}$ modélise leur interface macroscopique. L'angle de contact macroscopique θ est quant à lui mesuré entre la paroi solide et l'interface fluide-fluide. Enfin, la géométrie locale au niveau du point triple est complétée par les vecteurs unitaires : $\mathbf{n}_f$ désigne la normale à l'interface, tandis que $\mathbf{n}_w$ et $\mathbf{t}_w$ représentent respectivement les directions normale et tangentielle à la paroi solide.

Dès lors, afin de traduire mathématiquement les spécificités de cette zone de contact, nous modifions le modèle initial (5.2). Plus précisément, nous imposons sur la paroi des fibres une condition de glissement de Navier pour la vitesse tangentielle, tout en préservant la non-pénétration dans la direction normale. Cette transition cinématique se traduit formellement par la condition aux limites suivante :

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\cdot\boldsymbol{n}_w(\boldsymbol{y}) = 0, & \forall\, \boldsymbol{y}\in\Gamma^m_O, \\ -\eta\,\boldsymbol{v}^m_s(\boldsymbol{y},t) = \boldsymbol{t}_w(\boldsymbol{y})\cdot 2\mu(\boldsymbol{y},t)\nabla^S_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)\cdot\boldsymbol{n}_w(\boldsymbol{y}), & \forall\, \boldsymbol{y}\in\Gamma^m_O. \end{cases} \tag{5.3}$$

Dans ce système d'équations (5.3), le paramètre η désigne le coefficient de frottement interfacial, dont la valeur dépend de la phase en contact avec la paroi (fluide 1 ou fluide 2) ainsi que de la position de la ligne de contact. La vitesse de glissement, notée $\boldsymbol{v}^m_s$, est quant à elle définie par :

$$\boldsymbol{v}^m_s = (\boldsymbol{v}^m - \boldsymbol{v}^m_w)\cdot\boldsymbol{t}_w, \tag{5.4}$$

où $\boldsymbol{v}^m_w$ représente la vitesse de la paroi solide, supposée nulle dans le cadre de cette étude ($\boldsymbol{v}^m_w = \mathbf{0}$).

Il convient de noter que, selon la condition de Navier introduite dans le système d'équations (5.3), la vitesse de glissement est proportionnelle à la contrainte de cisaillement visqueux à la paroi. À l'échelle locale, le tenseur des taux de déformation symétrique

$\nabla^S_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t)$ s'exprime en fonction du gradient du champ de vitesse selon la relation :

$$\nabla^S_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) = \frac{1}{2}\left(\nabla_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t) + (\nabla_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{v}^m(\boldsymbol{y},t))^{\mathsf{T}}\right), \tag{5.5}$$

où $\mathbf{I}$ désigne le tenseur identité. Compte tenu de la condition d'incompressibilité du fluide ($\nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \boldsymbol{v}^m = 0$), la contribution déviatorique s'identifie simplement à la partie symétrique du gradient de vitesse.

La contrainte de cisaillement associée à la deuxième équation du système (5.3) fait alors intervenir la viscosité dynamique du milieu, notée $\mu(\boldsymbol{y},t)$. Conformément au formalisme retenu au Chapitre 3, cette viscosité n'est pas constante au sein du VER. En effet, elle dépend localement de la distribution des phases et est définie en fonction de la fonction Level-Set ϕ^m par la relation suivante :

$$\mu(\phi^m) = H_{\varepsilon^m}(\phi^m)\ \mu_1 + \left(1 - H_{\varepsilon^m}(\phi^m)\right)\mu_2, \tag{5.6}$$

où μ_1 et μ_2 désignent respectivement les viscosités des deux fluides.

Afin de modéliser le passage d'un fluide à l'autre, la fonction de Heaviside régularisée H_{ε^m} permet de décrire une transition lissée des propriétés physiques au voisinage de l'interface. Elle est définie par :

$$H_{\varepsilon^m}(\phi^m) = \begin{cases} 1, & \phi^m > \varepsilon^m, \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\phi^m}{\varepsilon^m} + \dfrac{1}{\pi}\sin\left(\dfrac{\pi\phi^m}{\varepsilon^m}\right)\right), & |\phi^m| \leq \varepsilon^m, \\ 0, & \phi^m < -\varepsilon^m, \end{cases} \tag{5.7}$$

où ε^m désigne l'épaisseur de lissage des propriétés à la petite échelle.

Par ailleurs, dans le cadre de ce modèle modifié, l'expression de la force de tension de surface demeure inchangée par rapport à celle introduite précédemment au Chapitre 3. Elle s'écrit ainsi :

$$\boldsymbol{f}^m_s = \sigma_s\, \kappa_s(\phi^m)\ \nabla H_\varepsilon(\phi^m)\,, \tag{5.8}$$

où κ_s désigne la courbure de l'interface, définie également par :

$$\kappa_s = \nabla_{\boldsymbol{y}} \cdot \left(\frac{\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m}{\|\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m\|}\right). \tag{5.9}$$

En présence de parois, et plus particulièrement lors du mouvement de la ligne de contact, l'angle de contact dynamique θ_D est extrait géométriquement à partir de la fonction d'interface par la relation :

$$\cos\theta_D = \boldsymbol{n}^m_\phi \cdot \boldsymbol{n}_w = \left(\frac{\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m}{\|\nabla_{\boldsymbol{y}}\phi^m\|}\right) \cdot \boldsymbol{n}_w, \tag{5.10}$$

où $\boldsymbol{n}^m_\phi$ désigne le vecteur normal unitaire à l'interface, et $\boldsymbol{n}_w$ la normale unitaire à la paroi solide.

D'un point de vue physique, au voisinage de la ligne de contact, l'évolution de cet angle de contact dynamique θ_D est quant à elle gouvernée par la relation suivante [126, 127] :

$$\eta_{CL}\,\boldsymbol{v}_s^m = \sigma_s\left(\cos\theta_S - \cos\theta_D\right), \tag{5.11}$$

où η_{CL} désigne le coefficient de frottement associé à la ligne de contact, tandis que le terme $\sigma_s(\cos\theta_S - \cos\theta_D)$ représente la contrainte de Young déséquilibrée [126].

Cette relation (5.11), également appelée condition d'angle de contact dynamique sur la ligne de contact [166], peut être interprétée comme un équilibre des forces agissant localement sur celle-ci. En effet, le membre de gauche traduit la dissipation visqueuse associée au glissement, tandis que le membre de droite rend compte du déséquilibre des forces capillaires, attribué à la contrainte de Young.

Par analogie avec cette formulation, nous combinons la condition aux limites de Navier (5.3) imposée le long de la paroi solide et la condition sur l'angle de contact (5.11) en une unique relation [128] :

$$\eta(\phi^m)\,\boldsymbol{v}_s^m = -\left[\boldsymbol{n}_w \cdot 2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S\boldsymbol{v}^m + \sigma_s\,\delta_\varepsilon(\phi^m)\left(\cos\theta_S - \frac{\nabla\phi^m\cdot\boldsymbol{n}_w}{\|\nabla\phi^m\|}\right)\nabla\phi^m\right]\cdot\boldsymbol{N}(\boldsymbol{n}_w), \tag{5.12}$$

où η désigne le coefficient de friction le long de la paroi, défini par :

$$\eta(\phi^m) = \eta_{LW}H_{\varepsilon^m}(\phi^m) + \eta_{GW}\left(1 - H_{\varepsilon^m}(\phi^m)\right) + \eta_{CL}\,|\boldsymbol{t}_w\cdot\nabla H_{\varepsilon^m}(\phi^m)|, \tag{5.13}$$

où η_{LW} et η_{GW} sont respectivement les coefficients de glissement aux interfaces liquide–solide et gaz–solide. Par ailleurs, le coefficient σ_s correspond à la tension de surface entre les deux fluides au niveau de l'interface $\Gamma_{1,2}^m$ (voir figure 5.1) tandis que θ_S désigne l'angle de contact statique. Sur le plan dimensionnel, il convient de préciser que l'unité de η_{LW} et η_{GW} est le $\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}\cdot\mathrm{m}^{-1}$, alors que celle de η_{CL} est le $\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$.

Dans la relation (5.12) et d'après la sous-sous-section 2.1.4.3 du Chapitre 1, le tenseur de projection sur l'interface solide-fluide est représenté par $\boldsymbol{N}$, défini de la manière suivante :

$$\boldsymbol{N}(\boldsymbol{n}_w) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{n}_w\otimes\boldsymbol{n}_w, \tag{5.14}$$

où $\boldsymbol{I}$ désigne la matrice identité. Enfin, les forces singulières apparaissant dans ces expressions sont régularisées à l'aide de la fonction delta de Dirac régularisée :

$$\delta_{\varepsilon^m}(\phi^m) = \begin{cases} 0, & \text{si } |\phi^m| > \varepsilon^m, \\ \dfrac{1}{2\varepsilon^m}\left(1+\cos\left(\dfrac{\pi\phi^m}{\varepsilon^m}\right)\right), & \text{si } |\phi^m| \le \varepsilon^m. \end{cases} \tag{5.15}$$

En effet, lorsque l'épaisseur de régularisation ε^m tend vers zéro, on remarque que, dans le liquide et loin de l'interface, on retrouve la condition de glissement de type Navier définie par :

$$\eta_{LW}\,\boldsymbol{v}_s^m = -\boldsymbol{n}_w\cdot 2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S\boldsymbol{v}^m\cdot\boldsymbol{N}(\boldsymbol{n}_w). \tag{5.16}$$

Dans le cas particulier d'un écoulement bidimensionnel (2D), cette relation se simplifie sous la forme :

$$\eta_{LW} = \boldsymbol{n}_w\cdot 2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S\boldsymbol{v}^m\cdot\boldsymbol{t}_w = \mu\frac{\partial\boldsymbol{v}^m}{\partial\boldsymbol{y}_2}. \tag{5.17}$$

Cette condition de glissement de Navier permet alors de définir une longueur de glissement à la grande échelle, notée l_s, en fonction de la viscosité du fluide :

$$l_s = \frac{\mu}{\eta_{LW}}. \tag{5.18}$$

Au-delà de sa signification physique, la formulation intégrée de la relation (5.12) présente un intérêt numérique majeur. Sa mise en œuvre ne nécessite pas l'imposition géométrique de l'angle de contact sur la paroi, celui-ci étant déterminé de manière implicite par le modèle. Dans ce cadre, la vitesse de glissement $\boldsymbol{v}_s^m$ ainsi que l'angle de contact dynamique θ_D sont traités comme des inconnues du problème [174].

D'un point de vue physique, lorsque la ligne de contact est à l'équilibre statique, la contrainte visqueuse $2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S\boldsymbol{v}^m$ et la vitesse de glissement $\boldsymbol{v}_s^m$ s'annulent, ce qui permet de retrouver rigoureusement l'angle de contact statique ($\theta_D = \theta_S$). À l'inverse, lorsque la ligne de contact est en mouvement, la relation (5.12) conduit à un angle de contact dynamique distinct de l'angle statique. Plus précisément, θ_D devient supérieur à θ_S lors de l'avancée de la ligne de contact, et inférieur à θ_S lors de son recul [174].

Sur le plan de la résolution numérique, la réinitialisation de la fonction Level-Set s'avère indispensable afin de préserver sa propriété de fonction distance signée, cette dernière pouvant s'altérer au cours de l'advection lorsque l'interface se déforme ou s'aplatit [174]. C'est pourquoi la procédure de réinitialisation présentée au Chapitre 1 (sous-sous-section 2.1.4.4) et au Chapitre 3 (sous-section 4.2.3) pour la grande échelle, qui assure la transmission cohérente de la courbure de l'interface vers la petite échelle, demeure pleinement valable et est reconduite dans ce Chapitre 4.

En résumé, cette section a permis d'exposer le modèle multi-échelle diphasique intégrant la modélisation de l'angle de contact. Si les équations à la grande échelle demeurent inchangées, la prise en compte de l'angle de contact ainsi que de la condition de glissement de Navier est, quant à elle, entièrement réalisée à la petite échelle.

5.2 Méthode numérique

Dans cette section, nous détaillons la procédure de discrétisation numérique du modèle modifié à l'aide de la méthode des éléments finis, ainsi que l'algorithme de couplage entre les différentes échelles.

5.2.1 Discrétisation éléments finis

En s'inspirant de l'approche développée au Chapitre 3 (section 4.2), nous utilisons également le schéma de Taylor-Hood pour la discrétisation du modèle. Cela implique l'adoption d'une interpolation $P2/P1/P2$ pour les champs de vitesse, de pression et de level-set, respectivement. Plus précisément, les éléments $P2$ correspondent à une interpolation quadratique, tandis que les éléments $P1$ assurent une interpolation linéaire.

Par conséquent, le modèle discret à la grande échelle reste identique à celui présenté au Chapitre 3 (figure 4.2), aucune modification ne lui ayant été apportée. En revanche, le modèle discret à la petite échelle est reformulé dans ce chapitre afin d'intégrer la

modélisation de l'angle de contact.

Cependant, afin d'éviter de répéter l'ensemble de la formulation faible des équations à la petite échelle, nous nous concentrons ici exclusivement sur la détermination de la forme faible associée à la condition de glissement de type Navier introduite précédemment. Nous détaillons ensuite son assemblage au sein du système linéaire discrétisé. À cet effet, la contribution de la vitesse de glissement en forme faible s'écrit :

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_O^m} (2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S \boldsymbol{v}^m \cdot \boldsymbol{n}_w) \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\partial\Omega^m &= \int_{\Gamma_O^m} \left[\boldsymbol{N}(\boldsymbol{n}_w) \cdot (2\mu\nabla_{\boldsymbol{y}}^S \boldsymbol{v}^m \cdot \boldsymbol{n}_w)\right] \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\Gamma \\ &= -\int_{\Gamma_O^m} \eta_i \, \boldsymbol{v}_s^m \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\partial\Omega^m \\ &\quad - \int_{\Gamma_O^m} \sigma_s \, \delta_\varepsilon(\phi^m) \left(\cos\theta_S - \frac{\nabla\phi^m \cdot \boldsymbol{n}_w}{\|\nabla\phi^m\|}\right) \nabla\phi^m \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\partial\Omega^m,\end{aligned} \tag{5.19}$$

où $\boldsymbol{\delta v}^m$ désigne une fonction test appartenant à l'espace fonctionnel $\mathcal{V}^m$, lequel est défini par :

$$\mathcal{V}^m = \left\{ \boldsymbol{\delta v}^m \in \left(H^1(\Omega^m)\right)^d \;\middle|\; \boldsymbol{\delta v}^m(\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{n}_w = \boldsymbol{0},\ \forall\, \boldsymbol{y} \in \Gamma_O^m \right\}.$$

En intégrant ce terme de glissement de Navier à la formulation variationnelle initiale, la forme bilinéaire devient :

$$\begin{aligned}a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m}(\boldsymbol{\delta v}^m, \boldsymbol{v}^m) &= \frac{1}{|\Omega^m|} \int_{\Omega^m} 2\mu^m(\boldsymbol{y}, t)\, \nabla_{\boldsymbol{y}}^{S,\mathrm{dev}} \boldsymbol{v}^m : \nabla_{\boldsymbol{y}} \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\ &\quad - \int_{\Gamma_O^m} \eta_i \, \boldsymbol{v}_s^m \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\partial\Omega^m,\end{aligned} \tag{5.20}$$

tandis que la forme linéaire associée s'exprime sous la forme :

$$\begin{aligned}l_{\boldsymbol{f}_s^m}(\boldsymbol{\delta v}^m) &= \int_{\Omega^m} \boldsymbol{f}_s^m \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\boldsymbol{y} \\ &\quad + \int_{\Gamma_O^m} \left[\sigma_s \, \delta_\varepsilon(\phi^m) \left(\cos\theta_S - \frac{\nabla\phi^m \cdot \boldsymbol{n}_w}{\|\nabla\phi^m\|}\right) \nabla\phi^m\right] \cdot \boldsymbol{N}(\boldsymbol{n}_w) \cdot \boldsymbol{\delta v}^m \,\mathrm{d}\partial\Omega^m.\end{aligned} \tag{5.21}$$

Il ressort de ces expressions que la condition de glissement de Navier se trouve désormais scindée : elle est en partie intégrée dans l'opérateur bilinéaire $a_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m}(\boldsymbol{\delta v}^m, \boldsymbol{v}^m)$ lié au gradient symétrique de la vitesse, et en partie injectée dans le vecteur second membre linéaire $l_{\boldsymbol{f}_s^m}(\boldsymbol{\delta v}^m)$.

Par conséquent, après discrétisation spatiale par la méthode des éléments finis, le système algébrique global décrivant l'écoulement diphasique et le glissement pariétal sur les fibres se formule ainsi :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{v}^m} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m p^m} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\alpha} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^m\beta} \\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m p^m} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\alpha}} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}^T_{\boldsymbol{v}^m\boldsymbol{\beta}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^m} \\ \mathbf{U}_{p^m} \\ \mathbf{U}_{\boldsymbol{\alpha}} \\ \mathbf{U}_{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{l}_{\mathbf{f_s^m}} \\ 0 \\ \mathbf{l}_{\boldsymbol{\alpha}} \\ \mathbf{l}_{\boldsymbol{\beta}} \end{pmatrix} \tag{5.22}$$

où la dimension du vecteur $\mathbf{U}_\beta$ est $d \times n$, avec n le nombre de degrés de liberté de la vitesse sur le bord $\partial\Omega^{m,-}$. Celle de $\mathbf{U}_\alpha$ est d, celle de $\mathbf{U}_{p^m}$ correspond au nombre de nœuds $P1$ du maillage, et celle de $\mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^m}$ correspond au nombre de nœuds $P2$ multiplié par d.

En complément des termes de glissement dans la direction tangentielle, la condition de non-pénétration est maintenue dans la direction normale. Cette dernière est prise en compte de manière algébrique, directement lors de l'assemblage global du système. Cette technique requiert la définition de normales nodales. Celles-ci sont obtenues simplement par moyenne à partir des moyennes aux faces du bord.

5.2.2 Algorithme du couplage multi-échelle

La démarche adoptée pour réaliser la simulation à la grande échelle dépend de la solution déterminée à la petite échelle, conformément à ce qui a été présenté au Chapitre 3 (sous-sous-section 4.2.2.2). Le système linéaire issu de la simulation à la petite échelle s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^M\boldsymbol{v}^M} & \mathbf{A}_{\boldsymbol{v}^M p^M} \\ \mathbf{A}^T_{p^M\boldsymbol{v}^M} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\boldsymbol{v}^M} \\ \mathbf{U}_{p^M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{\boldsymbol{v}^M} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \tag{5.23}$$

auquel est couplé le problème d'interface :

$$\mathbf{A}_{\phi^M\phi^M}\mathbf{U}_{\phi^M} = \mathbf{B}_{\phi^M}. \tag{5.24}$$

Ce couplage permet de déterminer simultanément le champ de vitesse $\boldsymbol{v}^M$, le champ de pression p^M, ainsi que le champ level-set ϕ^M.

En pratique, la résolution de ce système et le calcul des résidus nécessitent, dans un premier temps, la résolution du problème diphasique à la petite échelle. Cette étape s'effectue en imposant la vitesse de grande échelle $\boldsymbol{v}_i^M(\boldsymbol{x})$ ainsi que la position de l'interface $\phi^m(\boldsymbol{y}, t^{n+1})$. À partir de cette solution locale, on détermine les grandeurs duales :

$$\boldsymbol{f}^M = \boldsymbol{\alpha}, \tag{5.25}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}^{M,\mathrm{dev}} = -\int_{\partial\Omega^{m,-}} \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{y}^-) \cdot \left(\boldsymbol{\delta v}^m(\boldsymbol{y}^-) - \boldsymbol{\delta v}^m(\boldsymbol{y}^+)\right) \mathrm{d}\boldsymbol{y}^-. \tag{5.26}$$

Une fois ces grandeurs duales obtenues, le calcul des composantes du tenseur d'ordre 2 du système (5.23) est réalisé au niveau des points d'intégration. À cet égard, il convient de noter que l'introduction de la condition de Navier à la petite échelle ne modifie pas la linéarité du problème d'écoulement. Par conséquent, le résidu global est déterminé en seulement deux itérations, ce qui garantit une convergence rapide du solveur Newton-Raphson.

Dans un second temps, la condition CFL est évaluée afin d'assurer la stabilité du couplage avec l'équation de transport. Si cette condition est satisfaite, le résidu de l'équation de transport est alors calculé, également aux points d'intégration. De la même manière, deux itérations suffisent pour assurer la convergence de ce processus numérique, validant ainsi l'étape de transport de l'interface.

5.3 Résultats des simulations mono-échelle

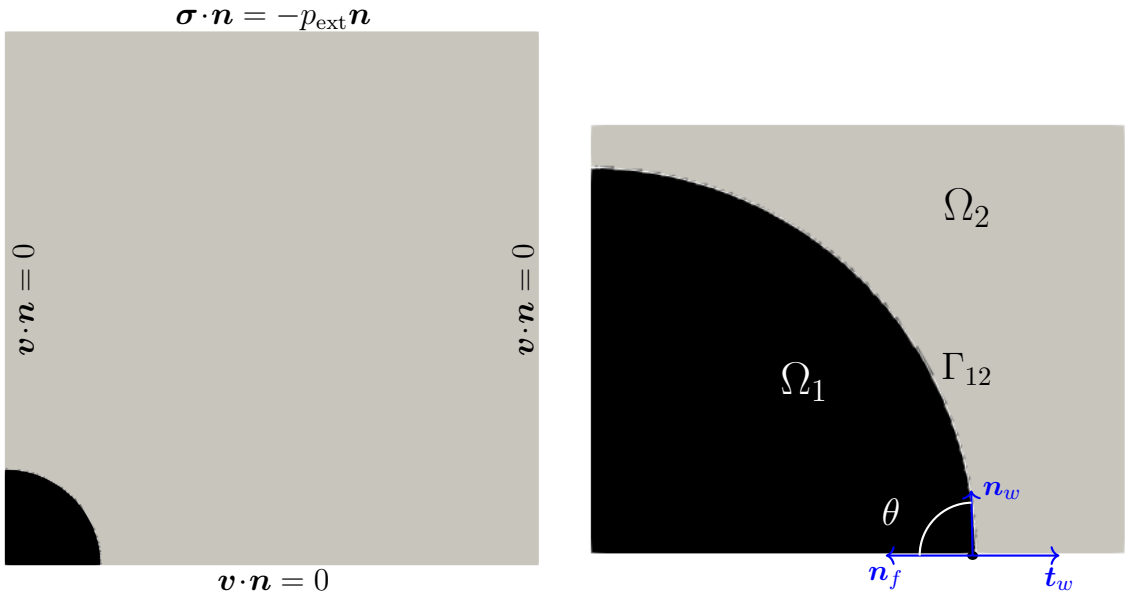
L'implémentation du modèle d'écoulement diphasique selon l'approche mono-échelle a été réalisée dans le code maison FEMS, qui n'intégrait pas, jusqu'à présent, la prise en compte de l'angle de contact. Suite à cette modification, il s'avère nécessaire de procéder à la validation du code dans ce cadre restreint. À cet effet, deux simulations de référence issues de la littérature sont considérées.

La première est analogue aux travaux de Bruchon *et al.* [30], dans lesquels l'étalement d'une goutte est étudié dans un cadre bidimensionnel. Cette étude, reposant sur un maillage non structuré, propose une comparaison entre des formulations avec et sans enrichissement du champ de pression. La seconde est inspirée des travaux de Gründing *et al.* [62]. Il s'agit d'un cas test d'écoulement diphasique mettant en jeu une interface initialement courbe, pour laquelle un angle de contact spécifique est imposé à la ligne de triple contact fluide–fluide–solide.

Dans un second temps, cette approche directe, une fois validée, servira de référence pour l'évaluation et la validation de la stratégie multi-échelle, laquelle intègre la condition de glissement de Navier.

5.3.1 Simulation de l'étalement d'une goutte

La simulation est réalisée dans un domaine carré de dimensions 1×1 m^2, discrétisé par un maillage de référence de pas $h = 6.25$ mm. Le domaine contient deux fluides immiscibles : la phase liquide, notée Ω_1, et le milieu environnant, noté Ω_2, correspondant à de l'air. Comme l'illustre la figure 5.2, la phase liquide Ω_1 est initialement positionnée en contact avec un support rigide situé sur la frontière inférieure ($y = 0$). Plus précisément, Ω_1 représente la moitié d'une gouttelette symétrique amenée à s'étaler sur ce plan (figure 5.2b).



(a) (b)

FIGURE 5.2 – Configuration bidimensionnelle considérée pour l'étude de l'étalement d'une goutte : (a) domaine de simulation et conditions aux limites associées (Neumann sur le bord supérieur Γ_N à $y = 1$ et Dirichlet homogène sur $\Gamma_D = \partial\Omega \setminus \Gamma_N$), (b) zoom sur le point triple.

Du point de vue rhéologique, les deux phases (liquide et air) sont modélisées comme des fluides newtoniens incompressibles. Leurs viscosités dynamiques respectives sont fixées à $\mu_1 = 3.0 \times 10^{-2}$ Pa · s et $\mu_2 = 3.0 \times 10^{-5}$ Pa · s. Par ailleurs, les effets d'inertie ainsi que la gravité sont supposés négligeables devant les forces visqueuses et capillaires, ce qui permet de considérer un écoulement quasi-stationnaire (de type Stokes). La pression extérieure de référence est quant à elle fixée à $p_{\text{ext}} = 0$ Pa.

Concernant les propriétés d'interface et de paroi, le coefficient de tension de surface est de $\sigma_s = 1.0$ N · m^{-1}. Sur la paroi solide ($y = 0$), une condition de glissement de Navier est imposée. Elle se caractérise par un coefficient de friction liquide–paroi $\eta_{\text{LW}} = 0.5$ Pa·s·m^{-1} et un coefficient air–paroi $\eta_{\text{GW}} = 0.1$ Pa · s · m^{-1}. Au niveau de la ligne de contact, le coefficient est nul ($\eta_{\text{CL}} = 0$ Pa · s) et un angle de contact statique $\theta_S = 60°$ est prescrit. La résolution temporelle est menée avec un pas de temps constant $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ s jusqu'à un temps final $t = 8.0 \times 10^{-2}$ s. L'objectif de ce cas test est d'évaluer l'évolution du champ de pression ainsi que de l'angle de contact dynamique, afin de les comparer aux résultats numériques de référence rapportés par Bruchon *et al.* [30]. Les résultats obtenus à l'issue de cette simulation sont présentés sur la figure 5.3.

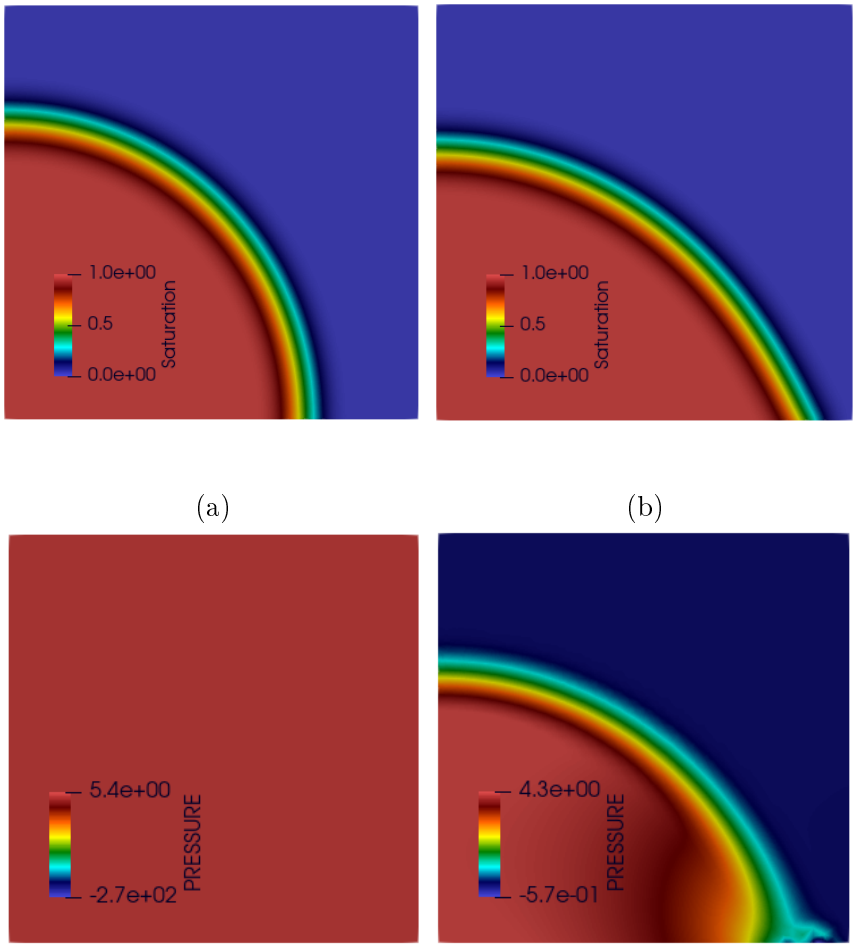
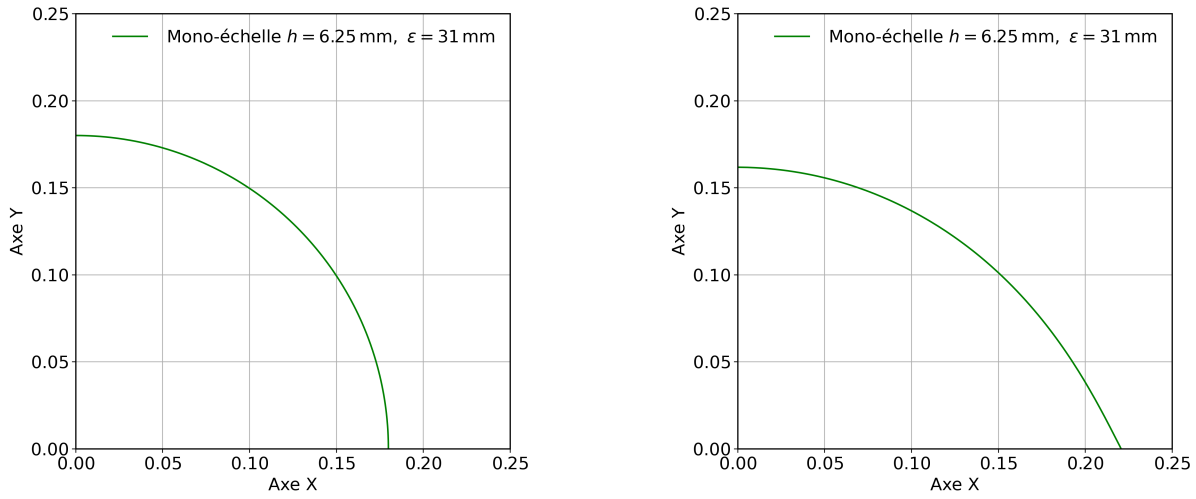


FIGURE 5.3 – Illustration du champ de saturation et de pression : (a) saturation à $t = 0$ s, (b) saturation à $t = 1.0 \times 10^{-2}$ s, (c) pression à $t = 0$ s et (d) pression à $t = 1.0 \times 10^{-2}$ s. La pression est en Pa

Pour illustrer l'étalement de la goutte, les profils de l'interface à deux instants distincts sont représentés sur la figure 5.4.



(a) (b)

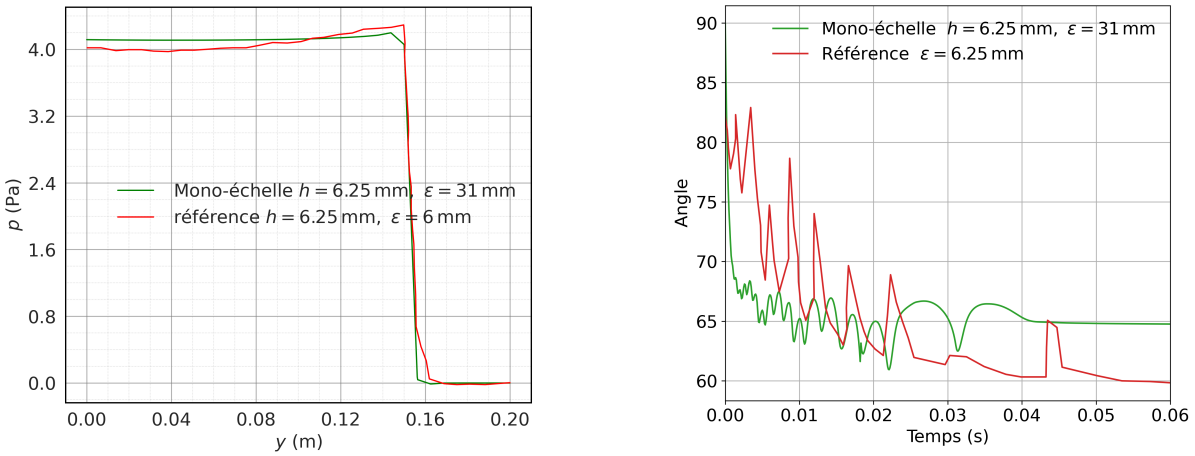
FIGURE 5.4 – Évolution de la forme de la goutte à différents instants : (a) profil initial à $t = 0$ s, (b) profil à $t = 0.01$ s.

À partir de ces résultats, on observe un avancement progressif du point triple par rapport à sa position initiale. Ce comportement traduit le phénomène d'étalement de la goutte, lequel est gouverné par les forces capillaires agissant à l'interface liquide–air qui tendent à minimiser l'énergie de surface du système.

Au-delà de cet aspect qualitatif, une analyse quantitative est menée afin de valider la précision de notre modèle. D'une part, le profil de pression obtenu est comparé aux données de référence de la littérature (figure 5.5a). D'autre part, la dynamique de l'angle de contact au cours de la simulation est évaluée. À cet effet, la valeur de cet angle est calculée a posteriori à l'aide de la relation proposée par Bruchon *et al.* [30] :

$$\theta = \pi - \arccos\left(\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \cdot \boldsymbol{n}_w\right). \tag{5.27}$$

L'évolution temporelle de l'angle ainsi obtenue est ensuite confrontée aux résultats de référence (obtenus sur un maillage de 160×160), comme l'illustre la figure 5.5b.



(a) (b)

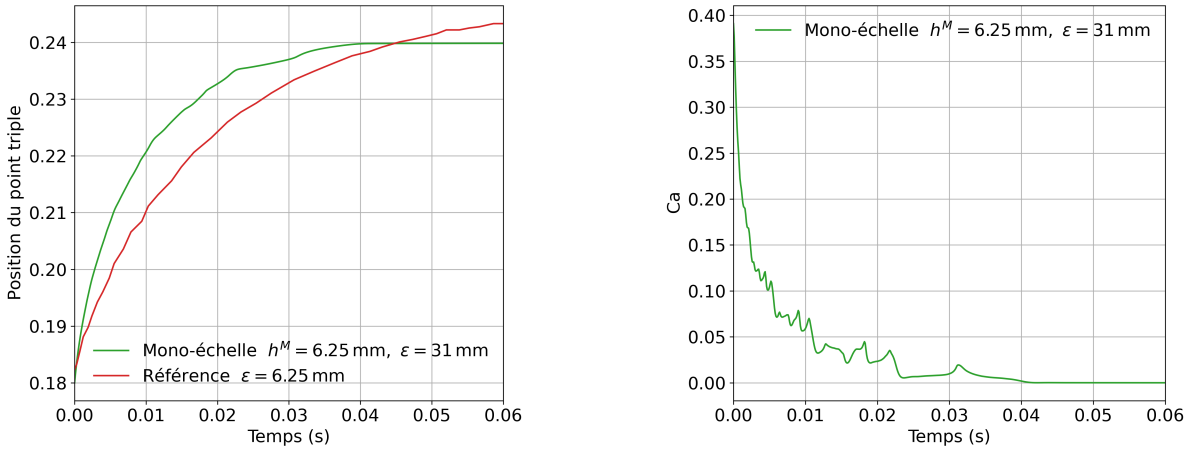
FIGURE 5.5 – Simulation de l'étalement d'une goutte : (a) comparaison du champ de pression à $t = 0,01$ s et (b) évolution de l'angle de contact en fonction du temps.

D'après cette figure, on observe que l'accord entre les résultats de l'approche mono-échelle et la solution de référence est satisfaisant pour le champ de pression. En effet, l'erreur relative sur la valeur du plateau, évaluée dans la zone stationnaire, est de l'ordre de 1 %. Concernant l'évolution temporelle de l'angle de contact, les deux approches présentent en revanche de fortes oscillations. De plus, l'angle d'équilibre prédit par la référence (59.5°) diffère de celui obtenu avec l'approche mono-échelle (65°). Plusieurs facteurs d'ordre numérique et méthodologique peuvent expliquer cet écart.

En premier lieu, l'écart peut être attribué à la méthode de post-traitement de l'angle. Dans Bruchon *et al.* [30], la relation (5.27) est évaluée localement sur l'élément contenant le point triple. Dans notre cas, bien que nous utilisions également cette relation sous le logiciel PARAVIEW en nous appuyant sur le gradient de ϕ et sur la normale à la paroi, la détection géométrique diffère. Le point triple est ici identifié à partir d'une procédure de type `slice`, basée sur l'isocontour $\phi = 0$, ce qui conduit à une estimation de sa position légèrement décalée vers le bord. L'évolution temporelle de l'angle de contact étant déduite de cette localisation, cette divergence dans la définition numérique du point triple introduit un biais systématique dans la mesure.

En second lieu, la discrétisation spatiale joue un rôle déterminant. La simulation de référence bénéficie d'une adaptation de maillage anisotrope dans la zone interfaciale, ce qui améliore la résolution de la courbure au voisinage de la ligne de contact et réduit les erreurs d'estimation. À l'inverse, l'absence d'adaptation dans notre approche peut dégrader la précision locale, en particulier lorsque l'interface traverse des éléments fixes relativement grossiers. Néanmoins, au regard de ces contraintes, les résultats obtenus avec notre modèle, fondé sur une description implicite de la mouillabilité via la condition de Navier et la dynamique de l'interface, restent globalement acceptables.

Par ailleurs, l'analyse de la dynamique du point triple permet de quantifier précisément ce mécanisme d'étalement progressif sur la paroi solide, comme le montre la figure 5.6.



(a) (b)

FIGURE 5.6 – Dynamique du point triple : (a) évolution de la position du point triple au cours du temps et (b) évolution du nombre capillaire associé.

On constate sur la figure 5.6a que la cinétique du point triple prédite par notre approche est en très bon accord avec la solution de référence. Plus précisément, à $t = 0$ s, le point triple est localisé à $x_T = 0.18$ m, tandis qu'à $t = 0.06$ s, il atteint $x_T = 0.24$ m dans notre simulation. Une légère divergence subsiste néanmoins concernant la valeur asymptotique du plateau final. Tout comme pour l'angle de contact, ce décalage résiduel s'explique par les choix de discrétisation et la méthode de détection numérique. D'un point de vue physique, ces courbes traduisent parfaitement l'étalement de la goutte le long de la paroi horizontale jusqu'à l'atteinte d'un état d'équilibre stationnaire, estimé ici à $t \approx 0.04$ s.

Afin de caractériser la dynamique de la ligne de contact, sa vitesse de déplacement est évaluée en calculant la dérivée temporelle de la position du point triple. Cette vitesse est ensuite utilisée pour déterminer le nombre capillaire, noté Ca, défini par l'expression suivante :

$$\mathrm{Ca} = \frac{\mu_1 \boldsymbol{v}_{\mathrm{cl}}}{\sigma_s}, \tag{5.28}$$

où $\boldsymbol{v}_{\mathrm{cl}}$ représente la vitesse de la ligne de contact déterminée à partir de l'évolution temporelle du point triple, et μ_1 désigne la viscosité dynamique du liquide. Ce nombre sans dimension permet de quantifier le rapport entre les forces visqueuses et les forces capillaires. Les résultats associés sont reportés sur la figure 5.6b. On observe sur cette figure que le nombre capillaire décroît progressivement jusqu'à s'annuler à $t \approx 0.04$ s, pour demeurer nul jusqu'à la fin de la simulation. Ce comportement indique que la ligne de contact cesse de se déplacer, ce qui traduit l'atteinte d'un état d'équilibre stationnaire entre les forces capillaires, les effets visqueux et les conditions de paroi. Cette observation est parfaitement cohérente avec la stabilisation de la position du point triple constatée

sur la figure 5.6a.

Pour conclure sur ce cas test, il convient de préciser que notre courbe du nombre capillaire n'est pas directement comparée à celle de la référence. En effet, cette dernière est calculée à partir de la vitesse maximale de l'écoulement dans l'ensemble du domaine, tandis que dans notre approche, Ca est évalué localement à partir de la vitesse propre du point triple. Bien que basées sur le même nombre adimensionnel, ces deux définitions ne sont pas strictement équivalentes et décrivent des aspects différents de la dynamique du système. Notre choix se justifie néanmoins par la volonté de caractériser rigoureusement la cinématique locale de la ligne de contact.

5.3.2 Simulation d'un écoulement diphasique à interface courbe

Ce cas d'étude consiste à considérer un domaine rectangulaire sans fibre, de dimensions 0.04×0.005 m^2, contenant deux phases immiscibles. Issu des travaux de Gründing *et al.* [62], ce cas test met en jeu une phase liquide (notée Ω_1) et une phase gazeuse (notée Ω_2), caractérisées par des viscosités dynamiques respectives $\mu_1 = 0.01$ Pa $\cdot$ s et $\mu_2 = 18.5 \times 10^{-5}$ Pa$\cdot$s. La configuration géométrique ainsi que le maillage associé sont illustrés sur la figure 5.7.

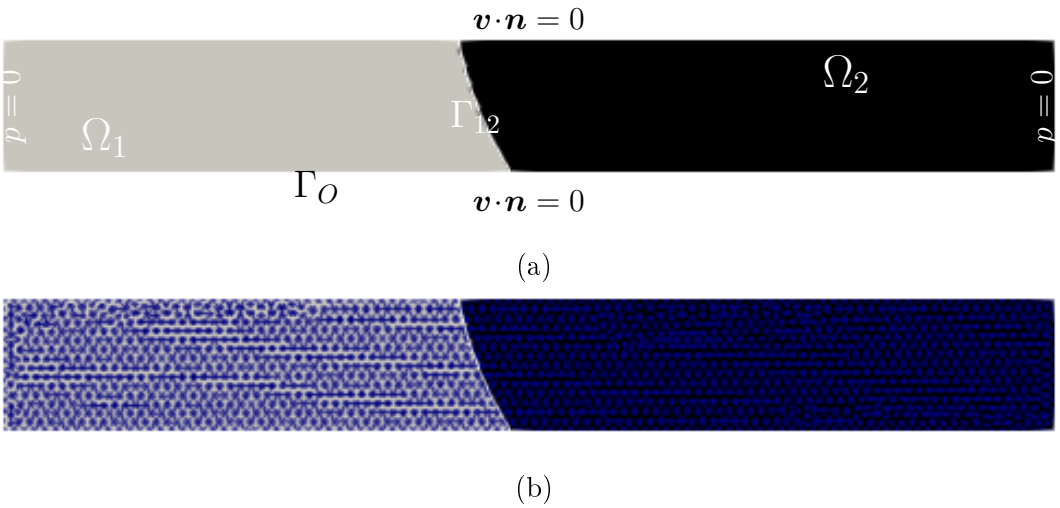


FIGURE 5.7 – Configuration du canal rectangulaire : (a) géométrie et conditions aux limites ; (b) maillage de référence avec $h = 0.2$ μm.

Concernant les conditions aux limites, une condition de glissement de Navier est appliquée sur la frontière solide supérieure du domaine. Elle se caractérise par un coefficient de frottement liquide–paroi $\eta_{\mathrm{LW}} = 100$ Pa $\cdot$ s $\cdot$ m^{-1} et un coefficient gaz–paroi $\eta_{\mathrm{GW}} = 0.1$ Pa $\cdot$ s $\cdot$ m^{-1}. Au voisinage de la ligne de contact, un coefficient de friction $\eta_{\mathrm{CL}} = 1$ Pa$\cdot$s est introduit, conjointement à un angle de contact statique imposé $\theta_S = 30°$. Il convient de préciser que si la valeur de cet angle statique provient directement de la référence, les coefficients de frottement ont en revanche été calibrés pour notre modèle, ceux-ci n'étant pas fournis dans la littérature de référence.

La simulation temporelle est menée avec un pas de temps constant $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ s jusqu'à un temps final $t = 1.0 \times 10^{-2}$ s. Ce choix diffère de la stratégie adoptée par Gründing *et al.*, où le pas de temps est dynamique et dicté par des critères de stabilité liant la tension de surface à la densité des phases. Dans la présente formulation quasi-stationnaire, les effets d'inertie étant négligés, un pas de temps fixe s'avère parfaitement adapté et justifié.

L'objectif principal de ce cas test est de caractériser la dynamique de montée capillaire. À cet effet, l'influence relative des forces capillaires et visqueuses est analysée en faisant varier le coefficient de tension surface selon les valeurs $\sigma_s \in \{0.2,\ 0.1,\ 0.04,\ 0.01\}\ \mathrm{N \cdot m^{-1}}$, suivant ainsi le protocole d'évaluation proposé dans [62].

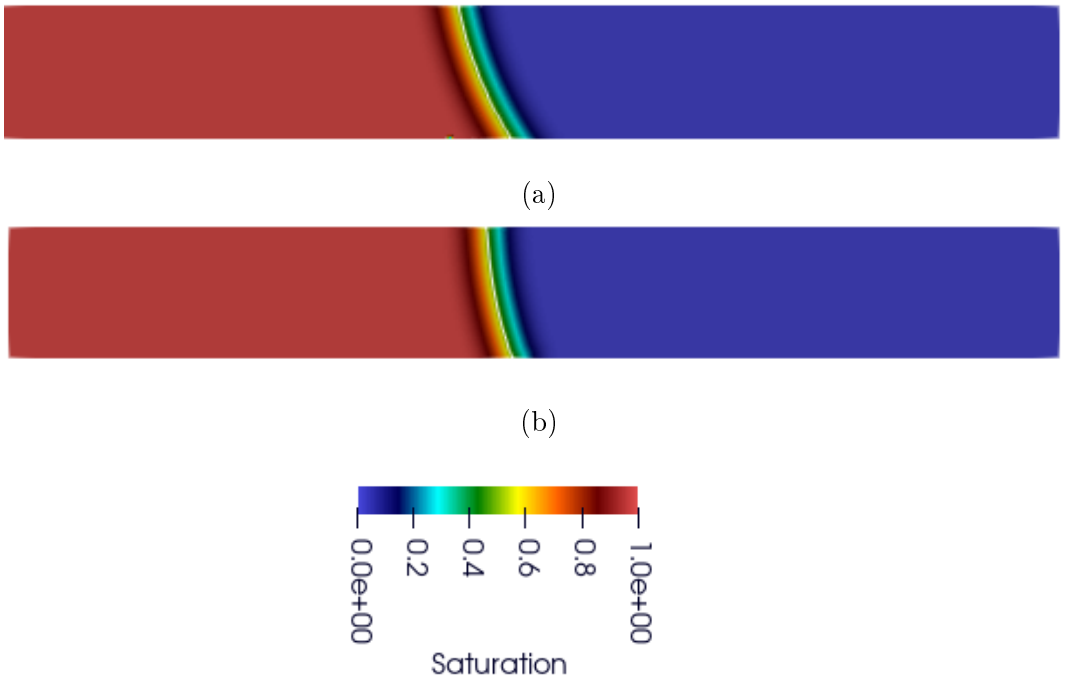
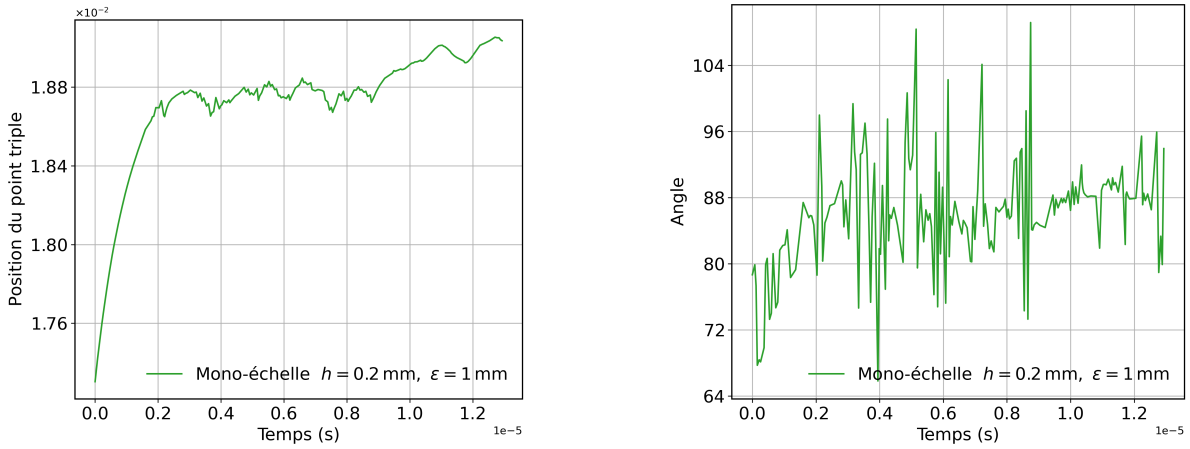


FIGURE 5.8 – Évolution de la saturation pour une tension de surface $\sigma_s = 0.2\ \mathrm{N \cdot m^{-1}}$: (a) $t = 0$ s et (b) $t = 1.0 \times 10^{-5}$ s.

La figure 5.8 illustre l'évolution du champ de saturation dans le domaine à deux instants distincts. En raison des paramètres physiques contraignants au début de la simulation, le pas de temps initial a généré un nombre CFL largement supérieur à l'unité dès le premier incrément. Le critère de stabilité du couplage entre les équations de Stokes et l'advection de l'interface n'étant plus satisfait, une procédure de réduction automatique du pas de temps (par divisions successives par 2) s'est activée afin de garantir la convergence du schéma numérique. Le pas de temps a ainsi décru jusqu'à atteindre une valeur minimale de 3.0×10^{-8} s. Cette phase transitoire de stabilisation initiale justifie le choix de représenter la figure 5.8b à l'instant décalé $t = 1.0 \times 10^{-5}$ s, évitant ainsi d'afficher les artefacts numériques des toutes premières itérations.

Sur le plan de la cinématique, on observe qu'à partir de $t = 0.2 \times 10^{-5}$ s, des oscillations

apparaissent sur l'avancement du point triple, fluctuant entre les positions $x = 0.0172\,\mathrm{m}$ et $x = 0.0190\,\mathrm{m}$ (figure 5.9a). Ce déplacement traduit l'avancée progressive du liquide le long de la paroi sous l'effet prédominant des forces capillaires.



(a) (b)

FIGURE 5.9 – Dynamique du point triple dans la géométrie rectangulaire : (a) évolution de la position du point triple au cours du temps et (b) évolution de l'angle de contact en fonction du temps.

Ces légères oscillations peuvent être attribuées à une compétition physique : d'un côté, les forces capillaires tendent à faire progresser l'interface, tandis que de l'autre, la configuration géométrique de l'écoulement au niveau du bord supérieur freine cette avancée. Ce phénomène de résistance est corroboré par l'évolution de l'angle de contact présentée sur la figure 5.9b. Celui-ci oscille de manière amortie autour de 90°, ce qui correspond à l'angle d'équilibre imposé par la mouillabilité du système.

Avant d'analyser plus en détail l'influence de l'intensité de ces forces capillaires sur la progression globale de l'interface, il convient de relier cette cinématique au nombre adimensionnel local. Comme défini précédemment, la variation du coefficient de tension de surface modifie directement la valeur du nombre capillaire Ca calculé au point triple. Les différentes configurations évaluées dans cette étude paramétrique sont récapitulées dans le tableau 5.1.

h (μm)	μ (Pa · s)	σ_s (N m^{-1})	θ_S (°)	Ca (−)	Ca$_{\max}$ (−)
0.2	0.01	0.2	30	0.062	0.003
0.2	0.01	0.1	30	0.033	0.015
0.2	0.01	0.04	30	0.032	0.029
0.1	0.01	0.01	30	0.103	0.106

TABLE 5.1 – Tableau récapitulatif de l'étude de l'influence de la tension de surface. Avec Ca obtenu par l'expression (5.28), et Ca$_{\max}$ est issu de la référence.

En se référant à la colonne du nombre capillaire Ca du tableau 5.1, on observe que,

pour l'ensemble des configurations considérées (σ_s = 0.2, 0.1, 0.04 et 0.01 $\mathrm{N \cdot m^{-1}}$), les valeurs du nombre capillaire restent strictement inférieures à l'unité. Cela indique que les forces capillaires dominent les forces visqueuses, favorisant ainsi l'apparition et le développement du phénomène de montée capillaire.

Toutefois, Gründing *et al.* [62] introduisent un nombre capillaire maximal, noté $\mathrm{Ca_{max}}$, défini à partir de la vitesse globale de la ligne de contact. La méthode d'obtention de ces valeurs n'étant pas explicitée dans leur étude, il n'est pas possible de comparer directement les nombres capillaires que nous avons calculés localement à partir de l'avancement du point triple à ceux rapportés par les auteurs. Néanmoins, à des fins d'information, nous avons conservé les valeurs issues de la référence dans le tableau 5.1.

En résumé, la prise en compte de l'angle de contact et de la condition de glissement de Navier sur la composante tangentielle de la vitesse, dans le cadre du modèle mono-échelle, a été validée partiellement pour des configurations de canaux sans fibres. En effet, le cas de l'interface courbe n'a pas pu être validé de manière exhaustive, en raison de définitions du nombre capillaire divergentes de celles considérées dans la solution de référence. Ces écarts peuvent être attribués au choix des coefficients de frottement, à la discrétisation temporelle, à la topologie du maillage, ainsi qu'à la méthode numérique de capture de l'interface.

Sur la base de ces acquis en description mono-échelle, les sections suivantes seront consacrées au développement de l'approche multi-échelle et à son application à des cas d'écoulements complexes en milieux fibreux poreux.

5.4 Résultats des simulations à multi-échelle

Afin de valider également la modélisation de l'angle de contact dans le cadre de l'approche multi-échelle, nous conduisons deux simulations mono-échelle servant de solutions de référence, que nous comparerons à la solution issue du modèle multi-échelle. La première configuration correspond à une simulation de montée capillaire dans un milieu contenant des fibres disposées verticalement. La seconde configuration illustre une simulation d'injection de résine dans un milieu poreux carré, au sein duquel l'interface fluide–fluide adopte une morphologie courbe.

5.4.1 Simulation d'une montée capillaire dans un milieu poreux

L'objectif principal de ce cas d'étude est d'évaluer la dynamique de montée capillaire dans un milieu poreux sous l'effet de la tension de surface de la résine. La géométrie considérée, constituée de fibres disposées en mosaïque, est illustrée sur la figure 5.10. Afin d'établir une solution de référence à cette configuration, une simulation mono-échelle est réalisée.

À cette fin, le domaine de calcul retenu est un rectangle de dimensions 80×300 $\mu\mathrm{m}^2$, discrétisé à l'aide d'un maillage de référence de taille caractéristique $h = 0.4$ μm. Ce domaine est initialement occupé par deux phases distinctes : une phase liquide, correspondant à une résine époxy de viscosité 0.2 $\mathrm{Pa \cdot s}$ et localisée dans la moitié inférieure du domaine, et une phase gazeuse de viscosité 18.5×10^{-6} $\mathrm{Pa \cdot s}$. La tension de surface à l'interface résine/air est quant à elle fixée à $\sigma_s = 31.7 \times 10^{-3}$ $\mathrm{N \cdot m^{-1}}$.

Pour ce qui est des conditions aux limites, des conditions de non-pénétration et de glissement de Navier sont imposées sur les parois des fibres. De plus, la condition d'angle de contact est introduite de manière implicite à l'aide de coefficients de friction, avec $\eta_{\mathrm{LW}} = 0.2\ \mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$ pour la phase résine et $\eta_{\mathrm{GW}} = 0.1\ \mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$ pour la phase air. Au niveau de la ligne de contact, un coefficient de friction $\eta_{\mathrm{CL}} = 1.0\ \mathrm{Pa \cdot s}$ est considéré, associé à un angle de contact statique $\theta_S = 60°$.

Enfin, la simulation numérique est conduite avec un pas de temps $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ s jusqu'au temps final $t_f = 1.0 \times 10^{-3}$ s. Il est à noter que pour ce cas d'étude, le volume élémentaire représentatif présenté à la figure 5.10(c) et associé à chaque point d'intégration à la grande échelle est constitué de deux sous-domaines séparés, ce qui conduit à un maillage non connecté à la petite échelle.

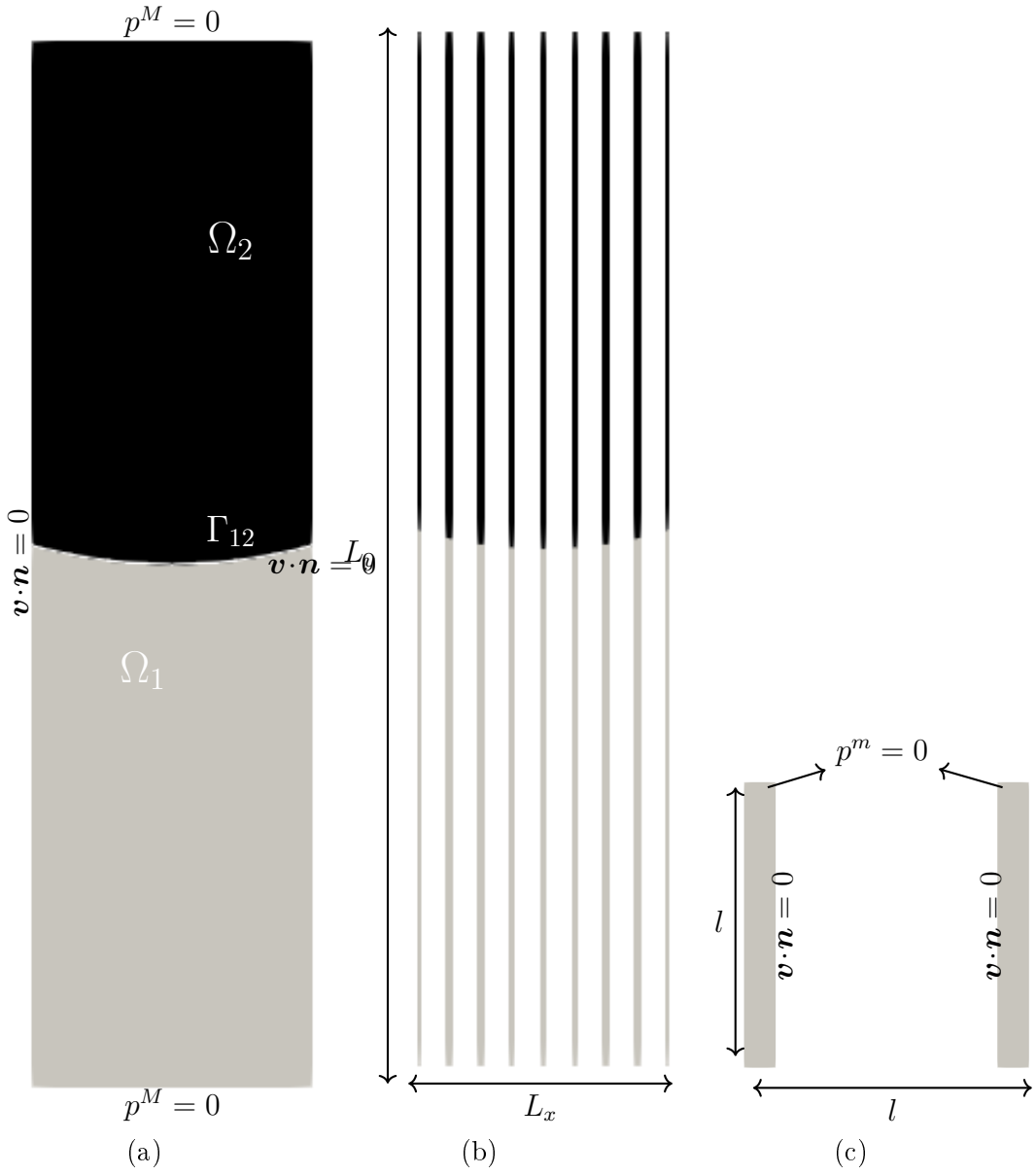


FIGURE 5.10 – Géométrie et conditions aux limites de la simulation de la montée capillaire dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine macroscopique et (c) domaine microscopique avec $l = 10$ μm.

La comparaison entre les deux approches est illustrée sur la figure 5.11.

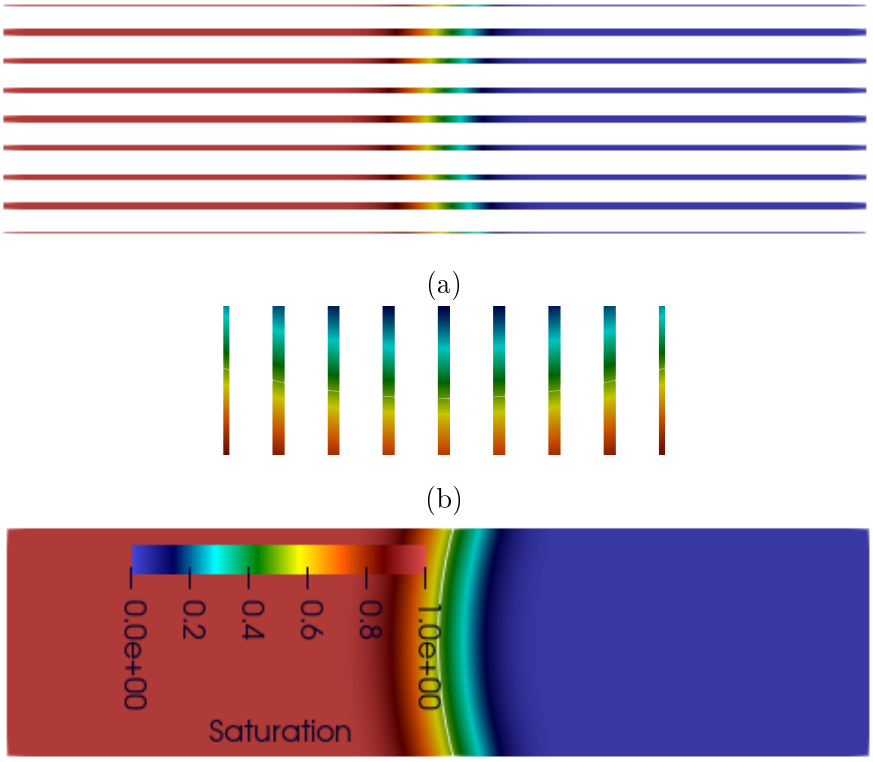


FIGURE 5.11 – Comparaison du champ de saturation lors de la simulation de la montée capillaire dans un milieu poreux à $t = 1,0 \times 10^{-5}$ s : (a) champ de saturation mono-échelle ; (b) zoom sur (a).

Pour la géométrie présentée en figure 5.10(b), le maillage du domaine est généré avec des éléments non connectés en raison de la non-discrétisation des fibres. Dans cette configuration, la simulation mono-échelle ne peut pas être parallélisée sur plusieurs processeurs. Elle a donc dû être réalisée sur un unique processeur, ce qui entraîne un coût de calcul élevé. Il convient de préciser que cette limitation, propre au code `FEMS`, n'avait pas été identifiée jusqu'alors.

En contrepartie, l'approche multi-échelle permet en principe de conserver l'algorithme de couplage sous-jacent, combinant une résolution séquentielle des problèmes de petite échelle au niveau du VER et un partitionnement du maillage à la grande échelle. Néanmoins, malgré l'imposition de conditions de pression nulle en deux points du VER, comme illustré sur la figure 5.10(c), le calcul ne converge que lors de la première itération. Dès la seconde itération, la matrice globale du problème de petite échelle devient non inversible, ce qui conduit à la divergence du calcul.

Ce comportement peut être attribué à la combinaison des différentes conditions aux limites imposées lors de l'assemblage de la matrice globale, à savoir les conditions périodiques, les conditions de non-pénétration et la condition de glissement de Navier. En particulier, la présence simultanée de coefficients de très grande valeur et de coefficients nuls, associée à un rapport de viscosité élevé (de l'ordre de 10^4), peut détériorer le conditionnement de la matrice globale jusqu'à la rendre non inversible. Par conséquent, des

investigations supplémentaires devront être menées afin de pleinement appréhender les mécanismes de ce cas d'étude.

5.4.2 Simulation d'injection de résine dans un milieu poreux

Dans cette sous-section, nous étudions le problème d'injection de résine dans un milieu poreux constitué de fibres de diamètre $D = 7.8$ μm, comme illustré à la figure 5.12. Les propriétés physiques des deux phases (résine époxy et air) sont identiques à celles utilisées dans les simulations précédentes.

Pour modéliser le phénomène d'injection, une condition de traction est imposée sur le bord inférieur, correspondant à une pression $p = 0.05$ MPa pour le domaine mono-échelle et à une pression $p^M = 0.05$ MPa pour le domaine de grande échelle. Sur les bords gauche et droit des deux domaines, ainsi que sur les parois des fibres, des conditions de non-pénétration associées à un glissement de Navier sont appliquées. Par ailleurs, une condition d'angle de contact est imposée implicitement à partir des coefficients de friction, avec $\eta_{\mathrm{LW}} = 100$ Pa$\cdot$s$\cdot$m^{-1} pour la phase résine et $\eta_{\mathrm{GW}} = 0.1$ Pa$\cdot$s$\cdot$m^{-1} pour la phase air. Au niveau de la ligne de contact, un coefficient de friction $\eta_{\mathrm{CL}} = 1$ Pa $\cdot$ s est considéré.

Concernant la discrétisation spatio-temporelle, la taille de maille adoptée pour la simulation mono-échelle est $h = 0.4$ μm. La même résolution est employée pour les domaines de petite échelle dans l'approche multi-échelle, afin de garantir une comparaison cohérente. En revanche, le domaine de grande échelle est discrétisé avec une taille de maille plus grossière, $h^M = 8$ μm. Pour les deux approches, l'épaisseur de lissage des propriétés physiques au voisinage de l'interface est fixée à $\varepsilon^M = 40$ μm. Enfin, la simulation est réalisée avec un pas de temps $\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$ s jusqu'au temps final $t_f = 8.0 \times 10^{-4}$ s.

À l'instar de la démarche présentée au Chapitre 3 (voir sous-sous-section 4.3.1.1, la validation repose sur une comparaison directe entre les résultats des simulations mono-échelle et multi-échelle. Cette procédure s'appuie sur la même méthodologie, en appliquant une moyenne intrinsèque définie spécifiquement sur la phase fluide du VER.

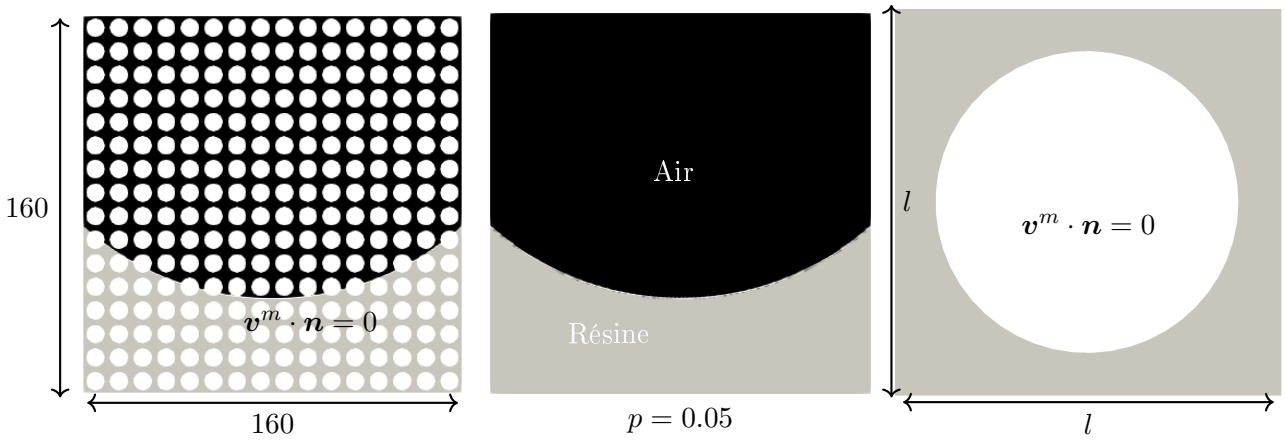


FIGURE 5.12 – Domaines et conditions aux limites utilisés pour le problème d'injection de résine dans un milieu poreux : (a) domaine mono-échelle, (b) domaine de grande échelle et (c) domaine hétérogène de petite échelle. Les longueurs sont exprimées en μm, les vitesses en $\mathrm{mm\,s^{-1}}$ et la pression en MPa

Les résultats des simulations selon les deux approches sont illustrés sur la figure 5.13.

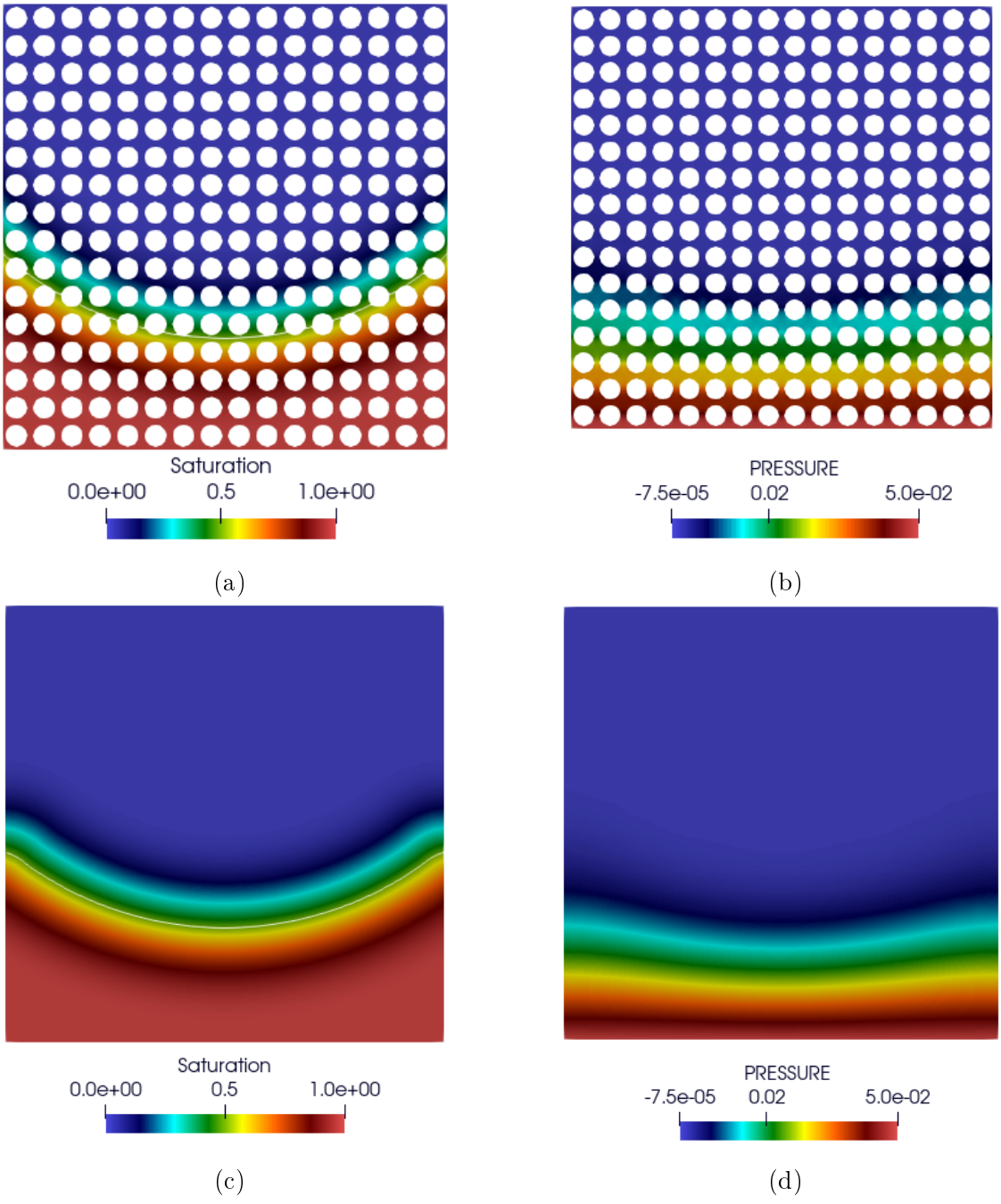


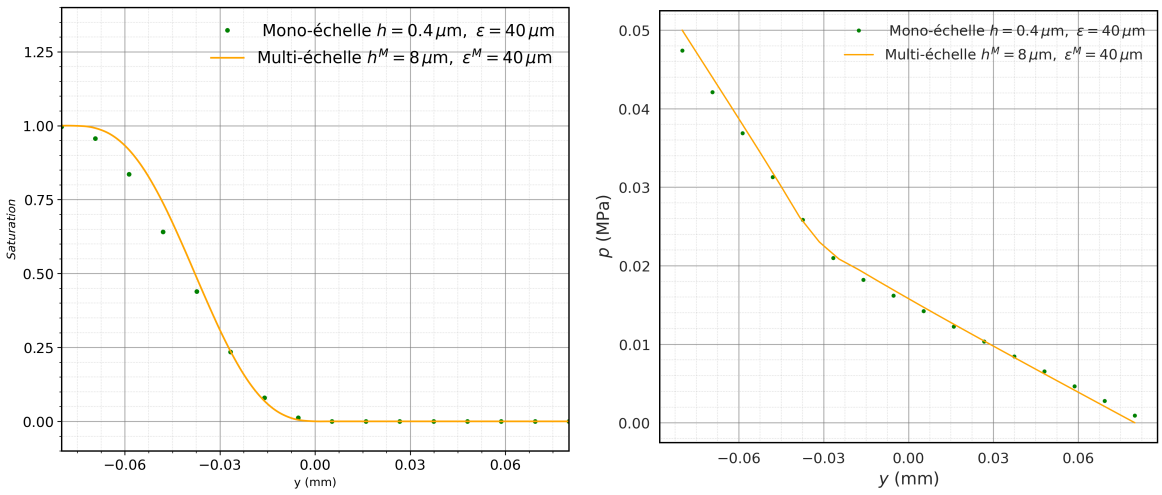
FIGURE 5.13 – Champs de saturation et de pression à la grande échelle à $t = 8 \times 10^{-4}$ s, comparés à la simulation mono-échelle pour le problème d'injection de résine en milieu poreux : (a) saturation mono-échelle, (b) pression mono-échelle, (c) saturation grande échelle et (d) pression grande échelle.

Cette figure permet de confronter directement l'approche mono-échelle et l'approche multi-échelle pour les champs de saturation et de pression. Pour ce faire, la saturation est évaluée dans chaque configuration à l'aide d'une fonction de Heaviside régularisée, définie sur une épaisseur $\varepsilon = 5 \times h^M = 40$ μm. Ce choix méthodologique garantit une reconstruction cohérente de la saturation entre les deux modèles. De plus, il permet d'obtenir une meilleure approximation des valeurs limites conventionnelles (0 dans l'air et 1 dans la résine), conformément aux conclusions du Chapitre 3 qui établissaient que le raffinement du maillage améliore la netteté de la transition interfaciale.

À l'instant $t = 8 \times 10^{-4}$ s, l'évaluation qualitatif du champ de saturation montre toutefois que le front de fluide a encore peu progressé, ce qui limite la portée d'une analyse purement visuelle de cette grandeur. En revanche, les champs de pression obtenus avec les deux approches reproduisent fidèlement les conditions aux limites imposées, confirmant ainsi la cohérence globale des solutions. Ces premières observations qualitatives tendent à démontrer que le modèle multi-échelle est apte à prédire le processus d'injection de résine tout en intégrant les effets de mouillabilité.

Afin d'étayer ce constat, une comparaison quantitative entre les deux approches est proposée dans la figure 5.14. Celle-ci présente les profils spatiaux de la pression extraits à la position $x = 0.005$ mm pour $t = 8 \times 10^{-4}$ s. Ces grandeurs sont calculées à partir des relations (4.46) et (4.47) introduites au Chapitre 3 (sous-sous-section 4.3.1.1), en effectuant une moyenne sur la phase fluide.

La forte corrélation observée entre les profils mono-échelle et multi-échelle de la figure 5.14, tant pour la saturation que pour la pression, valide la capacité prédictive du modèle multi-échelle. Ce dernier parvient à reproduire fidèlement les mécanismes de grande échelle de l'écoulement diphasique, y compris les phénomènes fins liés à la condition de glissement de Navier et à la dynamique de l'angle de contact.



(a)

FIGURE 5.14 – Évolution de la saturation et de la pression tracé en $x = 0.005$ mm pour $t = 0.0008$ s : (a) saturation et (b) pression. La pression est exprimée en MPa.

Pour valider l'évolution du front de résine prédite par le modèle multi-échelle, une analyse comparative entre les deux approches est effectuée. À cet effet, les résultats correspondants sont présentés dans la figure 5.15.

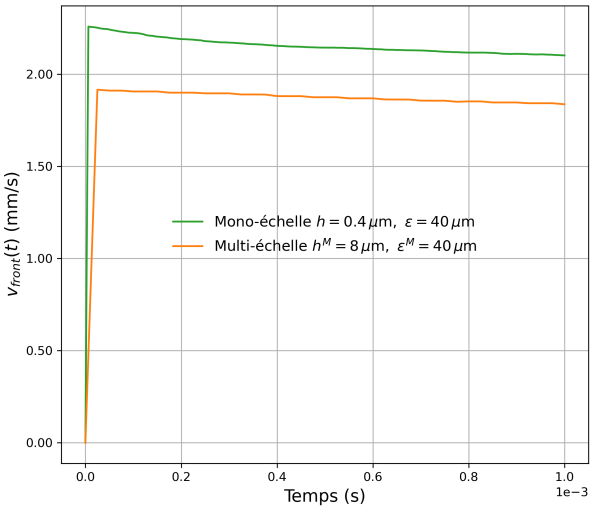


FIGURE 5.15 – Comparaison de la vitesse globale du front de résine entre les approches mono-échelle et multi-échelle.

Quant à la figure 5.15, elle expose la comparaison de la vitesse globale de la résine entre les deux méthodes. Cette vitesse est calculée à partir de la relation suivante :

$$\boldsymbol{v}_r(t) = \frac{\displaystyle\int_\Omega H(\phi(\boldsymbol{x},t))\ \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)\,\mathrm{d}\Omega}{S_r(t)}\ \boldsymbol{e}_y, \tag{5.29}$$

où $S_r(t)$ désigne l'aire occupée par la résine au cours du temps et $\boldsymbol{v}$ représente la vitesse d'écoulement. Cette figure met en évidence un écart entre les deux approches, un résultat qui soulève des questions quant à la prise en compte de l'angle de contact. Deux sources potentielles peuvent expliquer cette divergence : la discrétisation du maillage et la valeur du coefficient de friction de la résine.

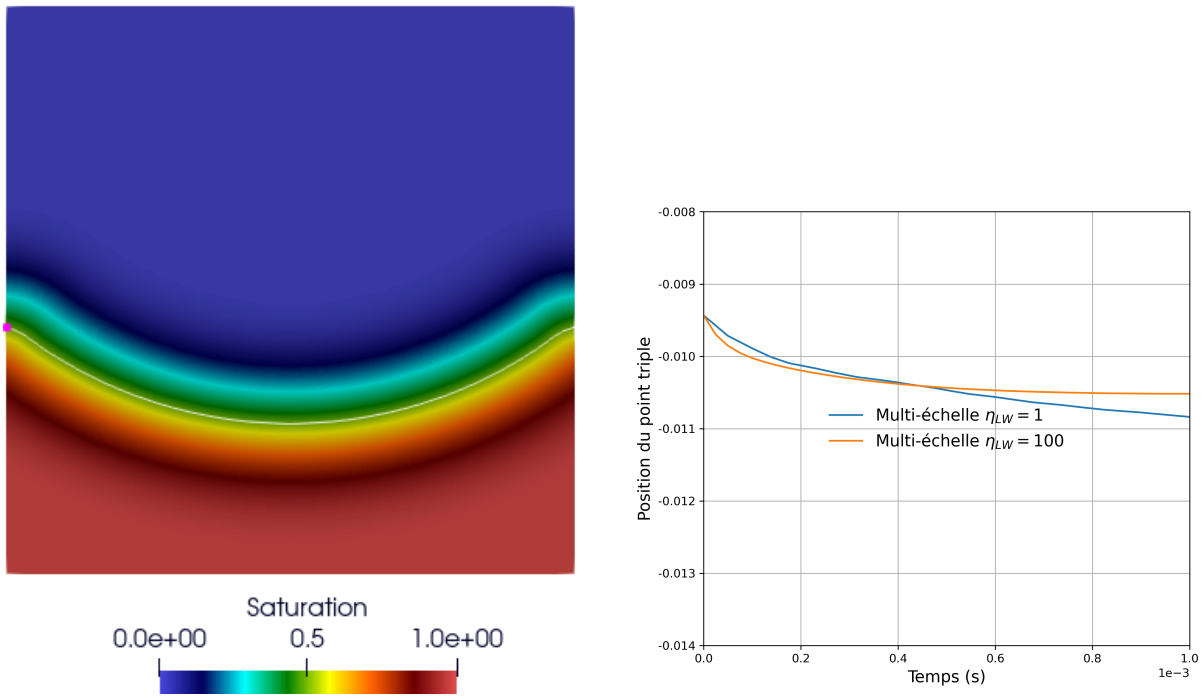
Dans le but d'étudier l'influence du coefficient de friction de la résine sur la prédiction de la mouillabilité, ce paramètre a été modifié entre deux valeurs distinctes, à savoir $\eta_{\mathrm{LW}} = \{1,\ 100\}$ Pa $\cdot$ s $\cdot$ m^{-1}. D'après la figure 5.16, obtenue dans les conditions décrites précédemment à l'exception de cette variation paramétrique, on observe que, pour les deux valeurs considérées, le point triple situé sur le bord gauche du domaine recule. De plus, l'instant auquel cette observation est effectuée correspond à $t = 0.001$ s. Un tel comportement est attendu dans la mesure où le front de résine n'a pas encore progressé de manière significative à ce stade.

Néanmoins, l'erreur relative globale en norme L^2 sur l'intervalle temporel, définie selon

[141] par :

$$e_{L^2(t)} = \frac{\sqrt{\int_{t_0}^{t_f} \left(Y_{\eta_1}(t) - Y_{\eta_{100}}(t)\right)^2 \, \mathrm{d}t}}{\sqrt{\int_{t_0}^{t_f} \left(Y_{\eta_1}(t)\right)^2 \, \mathrm{d}t}}, \tag{5.30}$$

met en évidence un écart de 1.4 % entre les prédictions de l'avancement du point triple obtenues avec les deux coefficients de friction. Dans cette expression, t_0 et t_f désignent respectivement l'instant initial et l'instant final de l'intervalle d'observation, tandis que $Y_{\eta_1}(t)$ et $Y_{\eta_{100}}(t)$ représentent la position temporelle du point triple calculée pour $\eta_{\mathrm{LW}} = 1\ \mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$ et $\eta_{\mathrm{LW}} = 100\ \mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$. Cette différence observée entre les deux courbes confirme que le coefficient de frottement influence l'avancement du front de résine.



(a) (b)

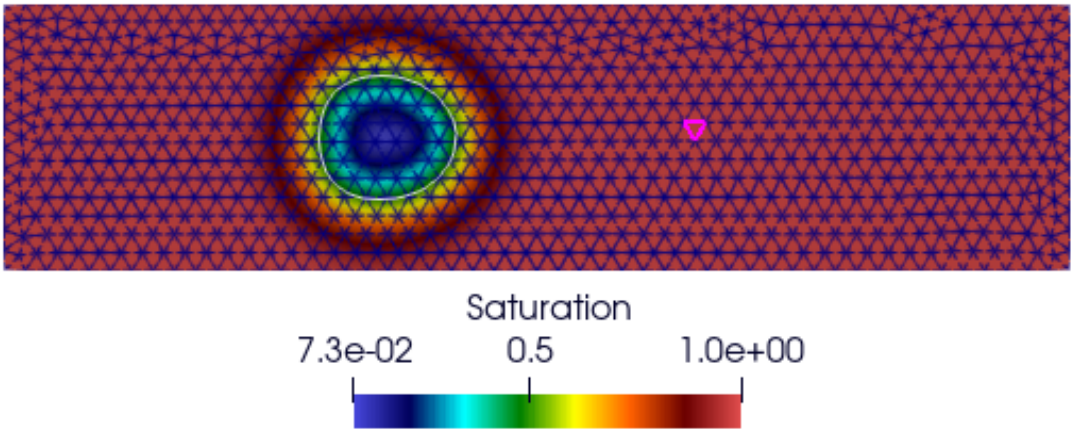
FIGURE 5.16 – Influence du coefficient de friction de la résine sur la position du point triple pour deux valeurs du coefficient de friction : (a) point rose représente le point triple et (b) comparaison des déplacements verticaux des points triples pour différentes valeurs des coefficients de friction.

Enfin, d'après la littérature, les valeurs typiques du coefficient de glissement de la résine se situent entre 0.2 et 1.0 $\mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$. Au regard de ces ordres de grandeur, les simulations suivantes seront menées en fixant cette valeur à $\eta_{\mathrm{LW}} = 1.0\ \mathrm{Pa \cdot s \cdot m^{-1}}$.

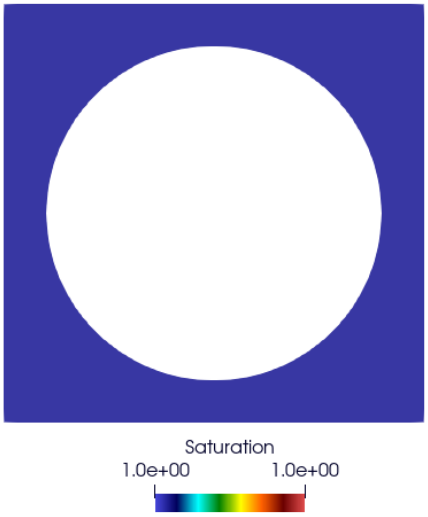
5.4.3 Influence de la condition de Navier sur la vitesse de migration de bulle

Pour analyser l'influence de la condition de glissement de Navier et de l'angle de contact sur la vitesse de migration d'une bulle, le cas de la migration d'une bulle d'air

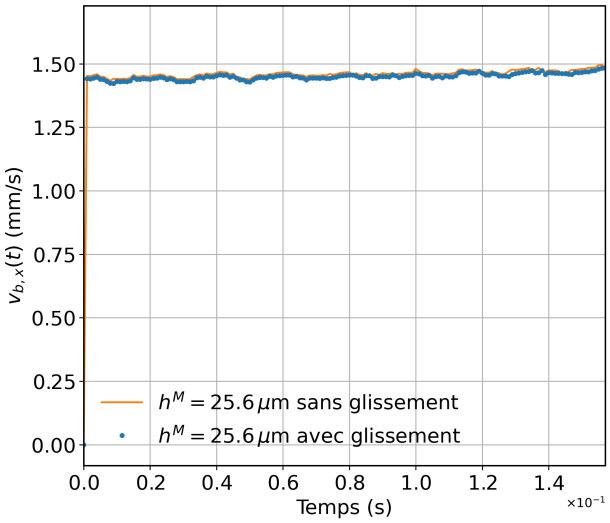
dans une mèche, présenté au Chapitre 3 (figure 4.16), a été repris dans la mesure où il constitue une configuration de référence, et ce afin de fixer la vitesse d'injection de la résine à 1 $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$. Aux paramètres physiques et numériques initialement définis dans ce chapitre s'ajoutent un angle de contact statique $\theta_S = 60°$, un coefficient de friction résine/paroi $\eta_{\text{LW}} = 1\ \text{Pa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1}$, un coefficient de friction gaz/paroi $\eta_{\text{GW}} = 0.1\ \text{Pa}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-1}$, ainsi qu'un coefficient de friction de la ligne de contact $\eta_{\text{CL}} = 0.1\ \text{Pa}\cdot\text{s}$.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 5.17 – Champs de saturation et comparaison de la vitesse de migration à $t = 0.157$ s : (a) saturation à la grande échelle, (b) saturation à la petite échelle et (c) comparaison de la vitesse de migration de la bulle.

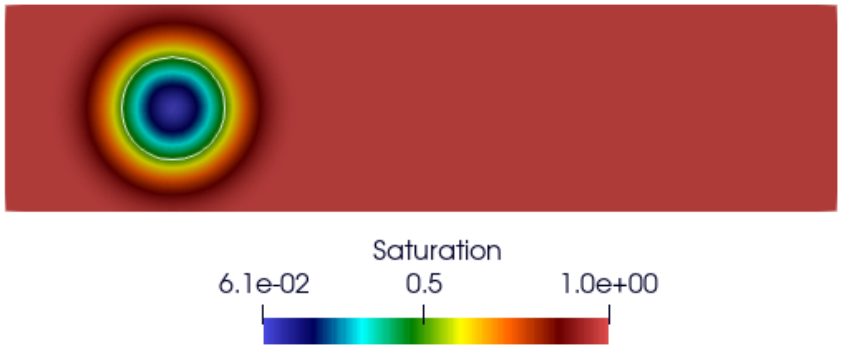
Après une durée de 0.157 s, la vitesse de migration de la bulle obtenue est confrontée aux résultats du Chapitre 3 afin d'évaluer l'apport du modèle intégrant le glissement de Navier et l'angle de contact à l'échelle des fibres.

La figure 5.17(a) illustre le champ de saturation à la grande échelle. Pour mettre en

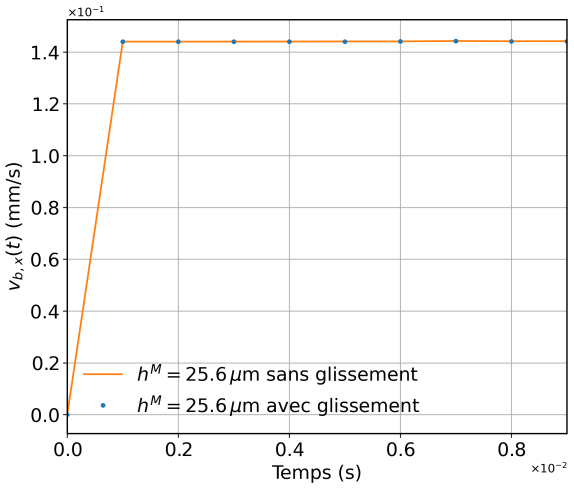
évidence le mécanisme de remplissage à la petite échelle, la saturation correspondante est représentée sur la figure 5.17(b) au niveau d'un point d'intégration de l'élément de grande échelle. On observe que le volume élémentaire représentatif sélectionné est entièrement saturé de résine (saturation égale à 1), ce qui est en parfaite cohérence avec la zone de capture choisie pour cet élément illustratif.

Par ailleurs, la figure 5.17(c) montre une forte corrélation entre la vitesse de migration de la bulle obtenue sous condition de non-glissement total aux parois et celle issue de la condition de glissement de Navier associée à l'angle de contact. Ce résultat s'avère toutefois contre-intuitif. En effet, la présence d'une composante tangentielle non nulle de la vitesse à la paroi des fibres aurait dû théoriquement contribuer à augmenter la vitesse globale de migration de la bulle à la grande échelle par rapport au cas de non-glissement strict.

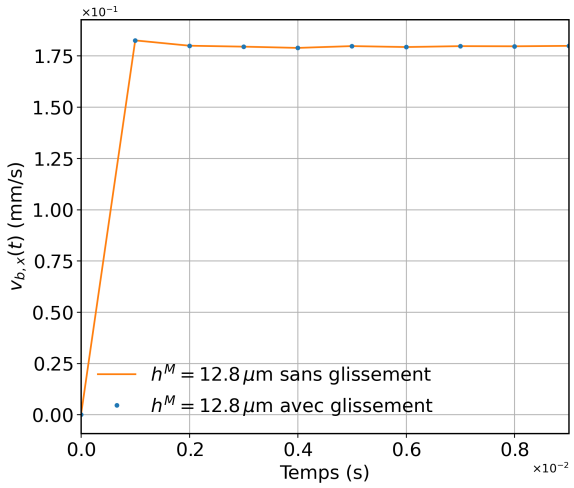
Dans le but de comprendre l'absence d'écart significatif entre ces deux configurations, une seconde simulation a été menée en testant une vitesse d'injection plus faible, de l'ordre de $0.1\ \mathrm{mm} \cdot \mathrm{s}^{-1}$. Le résultat de cette comparaison est illustré sur la figure 5.18 :



(a)



(b)



(c)

FIGURE 5.18 – Résultats de la simulation de la migration de la bulle : (a) saturation, et comparaison de la vitesse de migration de la bulle pour (b) $h^M = 25.6$ μm et (c) $h^M = 12.8$ μm.

À la lumière de ces résultats, plusieurs hypothèses peuvent être formulées. D'une part, il est possible que la condition de glissement de Navier n'exerce qu'une influence limitée sur la détermination des forces et des contraintes de grande échelle requises pour la construction de la matrice à grande échelle. D'autre part, la prise en compte conjointe de l'angle de contact et de la condition de frottement de Navier ne semble pas dicter de manière significative la cinétique de migration de la bulle au sein de la mèche. En effet, pour les configurations étudiées, les nombres capillaires associés s'avèrent particulièrement bas, de l'ordre de 6.3×10^{-3} et 6.3×10^{-4}, compte tenu des vitesses d'injection imposées.

Pour étayer cette analyse, l'effet du rapport d'échelles doit être considéré. La taille caractéristique du domaine grande échelle étant très supérieure à celle des fibres, l'influence de la vitesse tangentielle introduite à la petite échelle est susceptible de devenir négligeable dans la dynamique globale. Afin de vérifier si cette absence d'écart provenait d'un manque de résolution spatiale, un raffinement du maillage de grande échelle initial ($h^M = 25.60$ μm) a été opéré.

La figure 5.18(c) apporte des éléments de réponse à cette question. En effet, le double raffinement du maillage ($h^M = 12.80$ μm) conduit à une vitesse de migration de la bulle plus élevée, de l'ordre de $v_{bx} = 0.18$ mm $\cdot$ s^{-1}, comparée à celle du maillage initial estimée à $v_{bx} = 0.14$ mm $\cdot$ s^{-1}. Plus précisément, en dehors de cette accélération imputable au raffinement numérique, on observe que les courbes avec et sans glissement restent superposées. Cela confirme que l'accord entre le modèle de non-glissement et celui de Navier ne dépend pas de la finesse du maillage grande échelle.

En se basant sur l'hypothèse selon laquelle le raffinement améliore la précision de la solution numérique, ces conclusions suggèrent que la condition de glissement de Navier n'exerce pas d'influence notable sur les prédictions à la grande échelle pour les cas d'écoulements diphasiques étudiés. Par conséquent, les simulations réalisées avec une condition de non-glissement classique menant à des résultats comparables, il apparaît pertinent, dans une optique de réduction du temps de calcul, de privilégier le modèle sans frottement à l'échelle supérieure. Néanmoins, il convient de souligner qu'à la petite échelle, la présence d'une ligne de contact mobile engendre intrinsèquement des singularités de contraintes, comme rapporté dans la littérature [151], ce qui justifie pleinement le recours à la condition de Navier pour une description physique rigoureuse des phénomènes locaux.

Conclusion

Dans ce Chapitre 4, le modèle numérique multi-échelle dédié à l'écoulement diphasique en milieux poreux, initialement développé avec des conditions aux limites de non-frottement sur les parois des fibres, a été étendu afin de prendre en compte la condition de glissement de Navier sur la composante tangentielle de la vitesse, ainsi que l'imposition de l'angle de contact par une approche implicite à la petite échelle.

Par rapport au Chapitre 3, les équations gouvernant l'écoulement à la grande échelle demeurent inchangées et sont toujours obtenues à partir des dérivées des forces et des contraintes calculées au niveau de la petite échelle. De même, l'équation de transport de l'interface à la grande échelle conserve sa formulation initiale. Le domaine de petite

échelle est modélisé par un VER contenant une fibre. L'introduction de la condition de glissement de Navier et de l'angle de contact à l'interface fluide–solide conduit à l'apparition de termes supplémentaires dans l'assemblage de la matrice globale de la petite échelle ainsi que dans le second membre, qui ne contenait auparavant que la contribution liée à la tension de surface dans le cas de la condition de non-glissement. En revanche, la procédure d'initialisation de l'interface à cette échelle demeure inchangée et permet le calcul de l'angle de contact dynamique. L'ensemble du modèle a été discrétisé à l'aide de la méthode des éléments finis, puis implémenté dans le code de calcul maison `FEMS`.

Nous avons procédé, dans un premier temps, à la validation de la prédiction du phénomène de mouillabilité par le modèle mono-échelle, en comparant les résultats des simulations numériques aux solutions de référence disponibles dans la littérature. Les simulations numériques réalisées à l'aide de ce modèle ont porté, d'une part, sur l'étalement d'une goutte et, d'autre part, sur une montée capillaire dans un milieu homogène. Une attention particulière a été portée à l'évolution du point triple, de l'angle de contact, de la forme de la goutte et de la pression le long de l'axe horizontal. Une comparaison des nombres capillaires a également été effectuée. Dans cette démarche, le modèle mono-échelle utilisé pour les simulations reproduit correctement la physique observée dans les travaux de référence. Néanmoins, de légères différences subsistent. Celles-ci peuvent être attribuées à la stratégie de discrétisation adoptée, à la définition de l'angle de contact statique dans le modèle, ainsi qu'à l'absence d'une adaptation de maillage au voisinage de la ligne de contact.

Dans un second temps, le modèle multi-échelle a été validé par comparaison avec les résultats obtenus à l'aide du modèle mono-échelle, afin d'évaluer sa capacité à reproduire les phénomènes observés. Les simulations numériques réalisées à l'aide de ce modèle multi-échelle ont porté sur la montée capillaire dans un domaine contenant des fibres disposées verticalement en mosaïque, sur l'injection de résine, ainsi que sur la migration de bulles dans une mèche. Une attention particulière a été portée à l'évolution du champ de saturation et de la pression le long de l'axe vertical. L'influence de la condition de glissement de Navier sur la vitesse de migration des bulles dans la mèche a été évaluée.

En revanche, le cas de fibres disposées verticalement en mosaïque nécessite des développements supplémentaires afin de rendre la matrice globale de la petite échelle inversible. De même, pour le cas de la montée capillaire dans un milieu homogène, il reste nécessaire de vérifier et de comprendre la méthode employée par les auteurs pour déterminer le nombre capillaire. Cette analyse est d'autant plus importante que le modèle mono-échelle ne converge pas vers les valeurs de $\mathrm{Ca}_{\max}$ rapportées dans la référence.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

6.1 Conclusion

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet ANR JCJC MISSA pour le développement d'un modèle numérique multi-échelle dédié à la modélisation du procédé d'imprégnation, avec un intérêt particulier pour la prédiction de la migration de bulles dans un milieu fibreux de renfort composite. Les travaux précédents dans ce projet avaient été dédiés à la modélisation multi-échelle de l'écoulement instationnaire et monophasique dans un milieu poreux. Dans ces travaux, la méthode des puissances virtuelles multi-échelle avait été utilisée pour établir le modèle numérique de l'écoulement à grande échelle. Ceci avait été réalisé à partir de l'équation de Navier-Stokes à petite échelle, avec une implémentation éléments finis au carré (FE^2). Ces travaux avaient fait l'objet de développements dans le logiciel d'éléments finis *FEMS*.

Les différents travaux présentés dans cette thèse ont contribué au développement d'un modèle numérique multi-échelle dédié à la modélisation des hétérogénéités de petite taille présentes dans les écoulements diphasiques en milieu poreux, tout en maintenant un coût de calcul raisonnable. Ce modèle, basé sur la séparation de l'échelle des fibres de celle du moule, est destiné à simuler la migration de bulles au sein des renforts composites. La simulation numérique de cette migration repose sur la résolution du modèle à l'aide d'une méthode numérique appropriée.

Dans ce travail, nous avons discrétisé et implémenté ce modèle multi-échelle dans le code *FEMS* [137] en utilisant une formulation par éléments finis, avec un algorithme de type FE^2 permettant de coupler la résolution du problème à petite échelle à celle du problème à grande échelle. Cette séparation explicite entre l'échelle des fibres et celle du moule, combinée à ce couplage FE^2 offrant une efficacité de calcul optimale, constitue la principale originalité de cette thèse. Les approches multi-échelles de modélisation des écoulements diphasiques dans les milieux poreux reposent en effet sur l'homogénéisation asymptotique [13, 14, 26, 121] et la méthode de prise de moyenne volumique (*volume averaging*), complétées par la méthode de l'adjoint avec la formule de Green [84, 133]. Ces différentes approches permettent d'établir des extensions de la loi de Darcy, tandis

que les modèles existants de prédiction de la migration des bulles restent empiriques.

Le modèle multi-échelle diphasique développé dans cette thèse est composé de deux volets complémentaires. Le premier est consacré à la représentation multi-échelle de l'écoulement de chacune des phases fluides, tandis que le second porte sur la modélisation multi-échelle de l'interface séparant ces deux phases. Nous avons tout d'abord étendu le modèle multi-échelle monophasique existant [142, 143] en enrichissant la définition du champ de vitesse par l'introduction d'un terme de fluctuation soumis à des conditions aux limites périodiques. Néanmoins, il est important de souligner que ce modèle de départ n'avait pas été conçu à l'origine pour traiter des écoulements diphasiques caractérisés par de forts rapports de viscosité.

Nous avons ensuite proposé trois formulations multi-échelles distinctes pour la représentation de l'interface : (i) un modèle d'ordre un sans fluctuation, (ii) un modèle d'ordre un avec fluctuation, et (iii) un modèle d'ordre deux sans fluctuation. Bien que le premier modèle, caractérisé par une initialisation affine de l'interface à la petite échelle, soit simple à implémenter, il présente des limitations majeures pour prédire les écoulements à interface courbe. Il ne permet pas, en effet, de déterminer la courbure, une grandeur pourtant indispensable au calcul cohérent des forces de tension de surface.

Afin de surmonter cette restriction, nous avons développé une deuxième approche intégrant un terme de fluctuation entre les échelles, assorti d'une condition aux limites périodique sur ce champ. L'objectif était d'introduire des contributions supplémentaires susceptibles de capter la courbure de l'interface. Néanmoins, s'il apparaît que ce modèle contient effectivement un terme de courbure à l'échelle locale, toute courbure éventuelle de grande échelle n'est pas transmise à la petite échelle. De plus, la définition retenue pour le champ décrivant la position de l'interface ne permet pas de concilier simultanément les propriétés de fonction *Level-Set* et de périodicité.

Ces constats nous ont finalement conduits à concevoir un troisième modèle, d'ordre deux et sans fluctuation, dans lequel la position de l'interface est décrite à l'aide d'une fonction *Level-Set*. Dans cette approche, l'interface de grande échelle est représentée implicitement par une fonction distance signée, tandis que sa description de petite échelle est construite à partir de la première en tenant compte des dérivées d'ordre supérieur. Cette formulation permet de transmettre l'information de courbure de la grande échelle vers la petite, assurant ainsi un calcul rigoureux des forces de tension de surface. Couplé au modèle d'écoulement enrichi, ce dernier bloc constitue le modèle multi-échelle complet d'écoulement diphasique en milieu poreux proposé dans cette thèse.

Dans ce travail, la méthode RBVMS est utilisée pour stabiliser l'équation d'advection de l'interface à la grande échelle. La résolution du problème macroscopique est effectuée après la détermination des solutions locales, lesquelles permettent de calculer les grandeurs physiques effectives nécessaires à la construction de la matrice globale. Cette stratégie repose sur un algorithme d'implémentation de type éléments finis au carré, initialement développé dans [142], que nous avons adapté et enrichi dans le cadre de ces travaux pour le traitement des écoulements diphasiques.

Notre nouvelle approche modélise la présence de l'interface résine-air à la grande échelle lors de la prise en compte d'écoulements diphasiques. Ceci est rendu possible grâce à la méthode *Level-Set*, qui capte le front fluide tout en identifiant la localisation de chaque phase. La progression du front d'écoulement à cette échelle est régie par l'équation d'advection du champ de *Level-Set*. Ensuite, une transmission de la courbure de grande échelle est réalisée vers la petite échelle à partir de la définition proposée dans ces travaux.

Au cours de la simulation, l'interface évolue et peut subir des déformations importantes, ce qui entraîne une perte de la propriété de distance signée du champ. Afin de préserver cette caractéristique essentielle à l'évaluation correcte des grandeurs géométriques, notamment la normale et la courbure, une méthode de réinitialisation géométrique directe [144] a été employée.

La validation du modèle multi-échelle développé s'appuie sur une comparaison rigoureuse entre les résultats issus des simulations mono-échelle et multi-échelles. Elle repose sur l'évaluation des grandeurs moyennes extraites du modèle mono-échelle et sur la vérification de leur concordance avec les réponses obtenues à la grande échelle, conformément au principe de Hill–Mandel, assurant ainsi la satisfaction des contraintes cinématiques entre les différentes échelles.

Une étude du coût computationnel associé à l'utilisation du modèle a également été réalisée. Elle met en évidence que l'approche multi-échelle perd de son intérêt en l'absence de fibres dans le domaine ou lorsque le rapport entre la taille du domaine de grande échelle et celle des fibres est faible. En revanche, en présence de fibres et lorsque ce rapport dépasse 100, la méthode devient particulièrement avantageuse, tant en termes de précision que de temps de calcul.

Les résultats obtenus avec le modèle multi-échelle diphasique, formulé avec des conditions aux limites de non-glissement sur les parois des fibres, se sont révélés satisfaisants pour plusieurs cas-tests. Ces validations concernent notamment les bulles statiques en milieux homogène et poreux, la transition d'une bulle carrée vers une forme circulaire dans ces mêmes milieux, ainsi que l'étude de la migration d'une bulle dans une mèche présentée au Chapitre 3. Cependant, malgré ces résultats encourageants, l'applicabilité du modèle aux problématiques de mouillabilité demeure limitée. En effet, la condition de non-glissement imposée empêche la création de nouvelles lignes de contact et contraint l'interface résine-air à envelopper les fibres [59].

Pour lever cette restriction, nous avons, dans un troisième temps, enrichi le modèle multi-échelle d'écoulement diphasique en intégrant une condition de glissement de type Navier ainsi qu'une condition d'angle de contact à l'échelle des fibres. Cette extension permet de représenter les phénomènes de mouillabilité, essentiels à la prédiction du procédé d'imprégnation dans les matériaux composites.

D'une part, le modèle mono-échelle diphasique, qui intègre une condition de non-glissement normal, un glissement de Navier tangentiel et un angle de contact sur les parois des fibres, a démontré de solides capacités prédictives sur plusieurs configurations

de référence. Les résultats ont été validés notamment à travers l'étude de l'étalement d'une goutte sur un solide, de la montée capillaire en milieu homogène et de la simulation de l'injection de résine en milieu poreux.

D'autre part, la transposition de cette formulation à l'approche multi-échelle a également conduit à des résultats satisfaisants pour plusieurs cas-tests, en particulier pour la simulation de l'injection de résine dans un milieu poreux et pour l'étude de la migration d'une bulle au sein d'une mèche. Néanmoins, la simulation de la montée capillaire dans un milieu poreux, réalisée à partir d'un VER comportant des domaines fluides disjoints, révèle encore certaines limites d'applicabilité.

6.2 Perspectives

Le modèle numérique multi-échelle développé dans le cadre de cette thèse a été conçu pour résoudre, à terme, les problématiques de migration de bulles dans les renforts composites avec un temps de calcul raisonnable. Ce type de problème nécessite de prendre en compte les équations de transport d'interface afin de représenter fidèlement la migration de bulles dans les canaux inter-mèches. Par conséquent, l'état actuel du modèle, bien que validé et implémenté dans le code *FEMS*, requiert encore des améliorations pour atteindre cet objectif.

Les résultats présentés dans ce travail sont actuellement limités à des configurations bidimensionnelles. Toutefois, afin de répondre à des problématiques industrielles plus réalistes, il est nécessaire d'envisager une extension vers des simulations tridimensionnelles. Cette évolution peut s'opérer naturellement au sein du code *FEMS*, dont l'architecture est pensée pour traiter des problèmes en une, deux et trois dimensions. Ces calculs en 3D requièrent généralement des ressources informatiques importantes, tant en termes de mémoire que de temps CPU. Néanmoins, cette contrainte se trouve atténuée par les capacités de parallélisation du code, qui permettent une répartition efficace des charges sur plusieurs cœurs de processeurs. Ainsi, les analyses tridimensionnelles envisagées pourront être menées à bien de manière particulièrement efficace.

Les problématiques de migration de bulles présentées dans ce travail ont été traitées grâce à un couplage entre le modèle multi-échelle des écoulements et celui de l'interface. Ce dernier repose sur une équation d'advection classique à la grande échelle, dans la mesure où une simplification du modèle s'avère physiquement justifiée au sein de la mèche. À plus long terme, si l'on envisage d'identifier l'équation de transport dans son intégralité dans le cadre du modèle d'ordre 2, qui intègre le terme de moment géométrico-cinématique d'ordre 2, il sera essentiel de prendre en compte cette contribution afin d'en assurer la stabilisation numérique. Une telle évolution permettrait de modéliser avec précision le transport de bulles de très petite taille, particulièrement sensibles aux phénomènes de diffusion.

Par ailleurs, les résultats présentés pour l'approche multi-échelle reposent sur l'hypothèse d'une répartition unitaire des VER à chaque point d'intégration du domaine macroscopique. Une alternative intéressante consisterait à adopter une répartition

hexagonale, plus représentative de la réalité du procédé d'imprégnation, dans laquelle les fibres ne sont pas nécessairement disposées de manière régulière. Pour ce faire, il serait envisageable de conserver une homogénéisation d'ordre 1 pour l'écoulement, tout en considérant un VER contenant plusieurs fibres sans découpe aux frontières du domaine local. Une telle configuration reste réalisable dans le code FEMS via une implémentation FE^2. En effet, une topologie de VER où la présence de fibres coupe partiellement ou totalement certaines portions de ses frontières peut engendrer un chevauchement entre les conditions de non-pénétration et les conditions de périodicité. Cette incompatibilité peut conduire à une perte d'inversibilité de la matrice globale du problème micro. Des développements méthodologiques supplémentaires sont donc requis afin de surmonter ce verrou numérique.

Dans la perspective d'améliorer la validation du modèle multi-échelle intégrant la condition de glissement de Navier et l'angle de contact, un raffinement du maillage à l'échelle locale constitue une piste d'étude pertinente. Celui-ci permettrait de mieux capturer les effets de mouillabilité et de régulariser les singularités du tenseur des contraintes de cisaillement au voisinage de la ligne de contact, contribuant ainsi à une prédiction plus précise de la vitesse de migration des bulles.

Une autre voie de recherche consiste à exploiter le formalisme diphasique développé afin d'accélérer les simulations en milieux poreux par des approches d'apprentissage profond, à l'image de ce qui a été récemment proposé dans la référence [138]. Cette accélération repose sur une stratégie FE^2 fondée sur un partitionnement par k-médoïdes, permettant de réduire significativement le nombre de problèmes locaux à résoudre. À chaque itération du problème linéaire macroscopique, les points d'intégration sont classés *a priori* par cet algorithme de classification en fonction du gradient de vitesse courant à grande échelle et des variables internes de l'échelle inférieure. Cette approche limite la résolution répétée de sous-problèmes micro similaires tout en préservant la précision globale du modèle.

Enfin, la simulation tridimensionnelle restant particulièrement coûteuse en temps CPU, une opportunité majeure d'accélération résiderait dans l'utilisation d'auto-encodeurs couplés à des modèles d'ordre réduit (ROM, *Reduced-Order Models*), comme illustré dans [145]. En effet, pour des applications industrielles 3D complexes, le coût de calcul de l'approche FE^2 standard constitue un facteur limitant : à chaque pas de temps, la simulation requiert la résolution d'un système linéaire macroscopique faiblement couplé à l'advection, ainsi que d'un très grand nombre de problèmes linéaires micro associés à chaque point d'intégration. Le remplacement du solveur éléments finis local par un ROM basé sur un réseau de neurones profond permettrait d'abaisser drastiquement ce coût numérique.

Chapitre A

Valorisation des travaux de recherche

Au cours de ces trois années de thèse, j'ai eu l'opportunité de valoriser mes travaux de recherche à travers des communications lors de conférences nationales et internationales, ainsi que par des publications. Le détail de chacune d'elles est présenté ci-dessous.

A.1 Communications

A.1.1 Communications nationales

- S. Kperegueni, C.-H. Park et M. Shakoor, *"Prédiction de l'avancement de l'interface dans les écoulements diphasiques en milieu poreux par approche multi-échelle"*, **Conférence nationale MECA-J 2024**, en ligne, 28–30 août 2024, France.

- S. Kperegueni, C.-H. Park et M. Shakoor, *"Une nouvelle approche multi-échelle pour la simulation des écoulements diphasiques dans les milieux poreux"*, **GDR FIBMAT 2024**, Mines Alès, 12–13 septembre 2024, France.

A.1.2 Communications internationales

- S. Kperegueni, C.-H. Park et M. Shakoor, *"Multi-scale Interface Tracking in Two-phase Fluid Flow in Porous Media"*, **ECCOMAS International Conference**, Lisbonne (Portugal), 3–7 juin 2024.
- S. Kperegueni, C.-H. Park et M. Shakoor, *"Computational Homogenization of Two-phase Fluid Flow with Surface Tension in Porous Media"*, **COUPLED 2025 International Conference**, Villasimius (Italie), 26–29 mai 2025.

A.2 Publications

Auteur principal

S. Kperegueni, C.-H. Park et M. Shakoor, *"Computational homogenization of two-phase fluid flow in porous media"*, *Finite Elements in Analysis and Design*. Accepté, 2026.

Co-auteur

M. Bodaghi, M. Nikzad, C. Lira, A. Endruweit, I. Afgan, A. B. Albayraktar, C. Binetruy, S. Cassola, D. Droste, M. Duhovic, M. Faizan, S. Guessesma, L. Kärger, S. Kperegueni, A. Leitão, S. V. Lomov, S. M. Mokli, P. Mulye, D. May, M. Matveev, J. Machado, C.-H. Park, K. Pilkauskas, M. Rouhi, S. Schlegel, T. Schmidt, M. Shakoor, E. Syerko, E. M. Sozer, R. Umer, M. Waqas, D. Weitze, H. Yazdani Nezhad, *Benchmarking permeability predictions for an engineered reference medium : towards calibration of permeability rigs*, *Polymer Composites*. Accepté, 2026.

Bibliographie

[1] Process induced defects in liquid molding processes of composites. *International Polymer Processing*, 32(5) :527–544, 2017.

[2] B. Aaboud, A. Saouab, and C. H. Park. Modeling of air bubble dynamics during resin transfer molding by pore doublet model. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 105 :2343–2355, 2019.

[3] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian. A fast level set method for propagating interfaces. *Journal of computational physics*, 118(2) :269–277, 1995.

[4] S. G. Advani and E. M. Sozer. *Process modeling in composites manufacturing*. CRC press, 2002.

[5] S. Afkhami. Challenges of numerical simulation of dynamic wetting phenomena : a review. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 57 :101523, 2022.

[6] T. Ageyeva, I. Sibikin, and J. G. Kovács. A review of thermoplastic resin transfer molding : Process modeling and simulation. *Polymers*, 11(10) :1555, 2019.

[7] B. Almeshari, H. Junaedi, M. Baig, and A. Almajid. Development of 3d printing short carbon fiber reinforced polypropylene composite filaments. *Journal of Materials Research and Technology*, 24 :16–26, 2023.

[8] H. Alotaibi, C. Abeykoon, C. Soutis, and M. Jabbari. A numerical thermo-chemo-flow analysis of thermoset resin impregnation in lcm processes. *Polymers*, 15(6) :1572, 2023.

[9] H. Alotaibi, M. Jabbari, and C. Soutis. A numerical analysis of resin flow in woven fabrics : Effect of local tow curvature on dual-scale permeability. *Materials*, 14(2) :405, 2021.

[10] E. Amani and S. Abdi-Sij. Direct numerical simulation of droplet impact onto dry stationary and moving walls at low to high weber numbers. *International Journal of Multiphase Flow*, 181 :105014, 2024.

[11] D. Ambrosi, P. Ciarletta, E. Danesi, C. d. Falco, M. Taffetani, and P. Zunino. A multiscale modeling approach to transport of nano-constructs in biological tissues. In *Multiscale Models in Mechano and Tumor Biology : Modeling, Homogenization, and Applications*, pages 109–138. Springer, 2018.

[12] B. T. Astrom, R. B. Pipes, and S. G. Advani. On flow through aligned fiber beds and its application to composites processing. *Journal of composite materials*, 26(9) :1351–1373, 1992.

[13] J.-L. Auriault. Nonsaturated deformable porous media : Quasistatics. *Transport in Porous media*, 2(1) :45–64, 1987.

[14] J.-L. Auriault. Transport in porous media : upscaling by multiscale asymptotic expansions. In *Applied micromechanics of porous materials*, pages 3–56. Springer, 2005.

[15] J.-L. Auriault, O. Lebaigue, and G. Bonnet. Dynamics of two immiscible fluids flowing through deformable porous media. *Transport in Porous Media*, 4(2) :105–128, 1989.

[16] S. Balay, S. Abhyankar, M. Adams, S. Benson, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, E. Constantinescu, L. Dalcin, A. Dener, et al. Petsc/tao users manual (rev. 3.20). Technical report, Argonne National Laboratory (ANL), Argonne, IL (United States), 2023.

[17] I. Baran, K. Cinar, N. Ersoy, R. Akkerman, and J. H. Hattel. A review on the mechanical modeling of composite manufacturing processes. *Archives of computational methods in engineering*, 24(2) :365–395, 2017.

[18] Y. Bazilevs, V. M. Calo, J. A. Cottrell, T. J. Hughes, A. Reali, and G. Scovazzi. Variational multiscale residual-based turbulence modeling for large eddy simulation of incompressible flows. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 197(1-4) :173–201, 2007.

[19] D. Bertling, R. Kaps, and E. Mulugeta. Analysis of dry-spot behavior in the pressure field of a liquid composite molding process. *CEAS Aeronautical Journal*, 7(4) :577–585, 2016.

[20] C. Bilger, M. Aboukhedr, K. Vogiatzaki, and R. Cant. Evaluation of two-phase flow solvers using level set and volume of fluid methods. *Journal of Computational Physics*, 345 :665–686, 2017.

[21] P. J. Blanco, A. Clausse, and R. A. Feijóo. Homogenization of the navier-stokes equations by means of the multi-scale virtual power principle. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 315 :760–779, 2017.

[22] P. J. Blanco, P. J. Sánchez, E. A. De Souza Neto, and R. A. Feijóo. The method of multiscale virtual power for the derivation of a second order mechanical model. *Mechanics of Materials*, 99 :53–67, 2016.

[23] P. J. Blanco, P. J. Sánchez, E. A. de Souza Neto, and R. A. Feijóo. Variational foundations and generalized unified theory of rve-based multiscale models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 23 :191–253, 2016.

[24] M. Bodaghi, C. H. Park, and P. Krawczak. Reactive processing of acrylic-based thermoplastic composites : a mini-review. *Frontiers in Materials*, 9 :931338, 2022.

[25] V. Bogdanov, F. S. Schranner, J. M. Winter, S. Adami, and N. A. Adams. A level-set-based sharp-interface method for moving contact lines. *Journal of Computational Physics*, 467 :111445, 2022.

[26] A. Bourgeat. Homogenized behavior of two-phase flows in naturally fractured reservoirs with uniform fractures distribution. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 47(1-2) :205–216, 1984.

[27] A. Bourgeat. Two-phase flow. In *Homogenization and porous media*, pages 95–127. Springer, 1997.

[28] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2) :335–354, 1992.

[29] A. N. Brooks and T. J. Hughes. Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 32(1-3) :199–259, 1982.

[30] J. Bruchon, Y. Liu, and N. Moulin. Finite element setting for fluid flow simulations with natural enforcement of capillary effects. *arXiv preprint arXiv :1711.09722*, 2017.

[31] F. C. Campbell Jr. *Manufacturing processes for advanced composites.* elsevier, 2003.

[32] P. Carlone, F. Rubino, V. Paradiso, and F. Tucci. Multi-scale modeling and online monitoring of resin flow through dual-scale textiles in liquid composite molding processes. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 96(5) :2215–2230, 2018.

[33] B. X. Chai, M. Gunaratne, M. Ravandi, J. Wang, T. Dharmawickrema, A. Di Pietro, J. Jin, and D. Georgakopoulos. Smart industrial internet of things framework for composites manufacturing. *Sensors*, 24(15) :4852, 2024.

[34] A. W. Chan and S.-T. Hwang. Modeling of the impregnation process during resin transfer molding. *Polymer Engineering & Science*, 31(15) :1149–1156, 1991.

[35] N. Charalambakis. Homogenization techniques and micromechanics. a survey and perspectives. *Applied Mechanics Reviews*, 63 :030803–1, 2010.

[36] B. Coutinho, V. F. Bezerra, S. R. de Farias Neto, and A. G. B. de Lima. Modelling and simulation of resin transfer moulding : a finite volume approach applied to the mold filling stage. In *Defect and Diffusion Forum*, volume 353, pages 67–72. Trans Tech Publ, 2014.

[37] M. Cremonesi, A. Franci, S. Idelsohn, E. Oñate, et al. A state of the art review of the particle finite element method (pfem). *Archives of Computational Methods in Engineering*, 27(5) :1709–1735, 2020.

[38] F. Daghia and L. Gendre. Quelques procédés de mise en forme des composites. *Site DESCO Sciences de l'Ingénieur*, 2011.

[39] K. R. Daly and T. Roose. Homogenization of two fluid flow in porous media. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2176), 2015.

[40] H. Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon exposition et application... par Henry Darcy.* Victor Dalmont, 1856.

[41] T. A. Davis. Algorithm 832 : Umfpack v4. 3—an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 30(2) :196–199, 2004.

[42] M. K. Deb, M. P. Reddy, R. S. Mayavaram, and C. E. Baumann. Finite element analysis of three-dimensional rtm process. *Journal of reinforced plastics and composites*, 18(11) :968–978, 1999.

[43] Y. Deng, Y. Chen, J. Zhi, W. Yang, and Y. Li. Modeling capillary pressure in dual-scale fibrous structures for resin transfer molding processing of composites : A brief review and perspective. *Capillarity*, 13(3) :60–67, 2024.

[44] Z. Dimitrovová and S. G. Advani. Free boundary viscous flows at micro and mesolevel during liquid composites moulding process. *International journal for numerical methods in fluids*, 46(4) :435–455, 2004.

[45] X. Ding, Q. He, Q. Yang, S. Wang, and K. Chen. Numerical simulation of impregnation process of reactive injection pultrusion for glass fiber/pa6 composites. *Polymers*, 14(4) :666, 2022.

[46] W. F. dos Santos, I. A. R. Lopes, F. M. A. Pires, and S. P. Proença. Second-order multi-scale modelling of natural and architected materials in the presence of voids : Formulation and numerical implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 416 :116374, 2023.

[47] T. P. dos Santos Barros, D. G. de Lima Cavalcante, D. F. de Oliveira, R. E. Caluete, and S. J. G. de Lima. Study of the surface properties of the epoxy/quasicrystal composite. *Journal of Materials Research and Technology*, 8(1) :590–598, 2019.

[48] T. A. Dutra, R. T. L. Ferreira, H. B. Resende, A. Guimaraes, and J. M. Guedes. A complete implementation methodology for asymptotic homogenization using a finite element commercial software : preprocessing and postprocessing. *Composite Structures*, 245 :112305, 2020.

[49] B. El Said, D. Ivanov, A. C. Long, and S. R. Hallett. Multi-scale modelling of strongly heterogeneous 3d composite structures using spatial voronoi tessellation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88 :50–71, 2016.

[50] S. Elgeti and H. Sauerland. Deforming fluid domains within the finite element method : five mesh-based tracking methods in comparison. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 23(2) :323–361, 2016.

[51] A. Elmasry, W. Azoti, S. A. El-Safty, and A. Elmarakbi. A comparative review of multiscale models for effective properties of nano-and micro-composites. *Progress in Materials Science*, 132 :101022, 2023.

[52] F. Feyel. Multiscale fe2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1-4) :344–354, 1999.

[53] A. Fortin and A. Garon. Les éléments finis : de la théorie à la pratique. *Université Laval*, 2011.

[54] B. Friedrichs and S. Güçleri. A hybrid numerical technique to model 3-d flow fields in resin transfer molding processes. *Polymer Engineering & Science*, 35(23) :1834–1851, 1995.

[55] R. Gantois, A. Cantarel, B. Cosson, G. Dusserre, J.-N. Felices, and F. Schmidt. Bem-based models to simulate the resin flow at macroscale and microscale in lcm processes. *Polymer Composites*, 34(8) :1235–1244, 2013.

[56] L. Gascón, J. García, F. LeBel, E. Ruiz, and F. Trochu. A two-phase flow model to simulate mold filling and saturation in resin transfer molding. *International Journal of Material Forming*, 9 :229–239, 2016.

[57] M. G. Geers, V. G. Kouznetsova, and W. Brekelmans. Multiscale first-order and second-order computational homogenization of microstructures towards continua. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1(4), 2003.

[58] M. G. Geers, V. G. Kouznetsova, K. Matouš, and J. Yvonnet. Homogenization methods and multiscale modeling : nonlinear problems. *Encyclopedia of computational mechanics second edition*, pages 1–34, 2017.

[59] A. Geoffre. *Upscaling impregnation flows in random fibrous media Application to infusion-based manufacturing process of composite materials.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2022.

[60] O. Gipouloux. *Contribution numérique à l'homogenéisation des équations de Stokes et de Navier-Stokes en milieux poreux.* PhD thesis, Bordeaux 1, 1992.

[61] V. R. Gopala and B. G. Van Wachem. Volume of fluid methods for immiscible-fluid and free-surface flows. *Chemical Engineering Journal*, 141(1-3) :204–221, 2008.

[62] D. Gründing, M. Smuda, T. Antritter, M. Fricke, D. Rettenmaier, F. Kummer, P. Stephan, H. Marschall, and D. Bothe. A comparative study of transient capillary rise using direct numerical simulations. *Applied Mathematical Modelling*, 86 :142–165, 2020.

[63] K. Han and L. Lee. Dry spot formation and changes in liquid composite molding : I—experimental. *Journal of composite materials*, 30(13) :1458–1474, 1996.

[64] F. Hassan, R. Zulkifli, M. Ghazali, and C. Azhari. Kenaf fiber composite in automotive industry : an overview. *Int. J. Adv. Sci. Eng. Inf. Technol*, 7(1) :315–321, 2017.

[65] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1) :201–225, 1981.

[66] N. A. Ilangakoon and A. G. Malan. A higher-order accurate vof interface curvature computation scheme for 3d non-orthogonal structured meshes. *Computers & Fluids*, 245 :105595, 2022.

[67] D. P. Islami, A. F. Muzaqih, R. Adiputra, A. R. Prabowo, N. Firdaus, S. Ehlers, M. Braun, M. Jurkovič, D. F. Smaradhana, and H. Carvalho. Structural design parameters of laminated composites for marine applications : Milestone study and extended review on current technology and engineering. *Results in engineering*, 24 :103195, 2024.

[68] L. A. Isoldi, C. P. Oliveira, L. A. Rocha, J. A. Souza, and S. C. Amico. Three-dimensional numerical modeling of rtm and lrtm processes. *Journal of the brazilian society of mechanical sciences and engineering*, 34(2) :105–111, 2012.

[69] K. H. Ji and S. J. Kim. Dynamic direct numerical simulation of woven composites for low-velocity impact. *Journal of Composite Materials*, 41(2) :175–200, 2007.

[70] B. Julián, J. Claramunt, M. Ardanuy, and H. Ventura. Influence of long-fibre content on the reinforcement capacity of nonwovens obtained from recycled textile waste for application in cement composites. *Case Studies in Construction Materials*, page e05083, 2025.

[71] Y. Jung, S. J. Kim, and W.-S. Han. Numerical simulation of rtm process using the extended finite element method combined with the level set method. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 32(5) :308–317, 2013.

[72] D. Kaczmarek, D. Walczyk, J. Garofalo, and M. Sobkowicz-Kline. An investigation of in situ impregnation for additive manufacturing of thermoplastic composites. *Journal of Manufacturing Processes*, 64 :972–981, 2021.

[73] A. L. Kalamkarov, I. V. Andrianov, and V. V. Danishevs' kyy. Asymptotic homogenization of composite materials and structures. 2009.

[74] P. Kanouté, D. Boso, J.-L. Chaboche, and B. Schrefler. Multiscale methods for composites : a review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16(1) :31–75, 2009.

[75] E. Kazantsev. Parameterizing subgrid scale eddy effects in a shallow water model. 2017.

[76] K. Khedkar, A. C. Mamaghani, P. Ghysels, N. A. Patankar, and A. P. S. Bhalla. Preventing mass loss in the standard level set method : New insights from variational analyses. *Journal of Computational Physics*, 520 :113495, 2025.

[77] S. J. Kim, C. S. Lee, H. J. Yeo, J. H. Kim, and J. Y. Cho. Direct numerical simulation of composite structures. *Journal of composite materials*, 36(24) :2765–2785, 2002.

[78] Y. Kinugawa, Y. Kawagoe, K. Oine, K. Ryuzono, Y. Hoshikawa, and T. Okabe. Experiment-free multiscale simulation of residual deformation in non-crimp fabric composites. *Advanced Composite Materials*, 33(6) :1420–1432, 2024.

[79] A. L. Kokai, P. Baumli, and G. Kaptay. Impregnation dynamics of liquid resins into rectangular capillaries formed by polymer-coated copper hairpins in electric motors : Experiments and theory. *Advanced Engineering Materials*, 27(10) :2402550, 2025.

[80] D. Kothe, D. Juric, K. Lam, and B. Lally. Numerical recipes for mold filling simulation. Technical report, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1998.

[81] V. Kouznetsova, M. G. Geers, and W. Brekelmans. Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials : a nested finite element solution strategy. *Computer methods in applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51) :5525–5550, 2004.

[82] M. Larson and F. Bengzon. The finite element method : Theory, implementation, and practice, texts comput. *Sci. Eng*, 10, 2010.

[83] F. Larsson, K. Runesson, S. Saroukhani, and R. Vafadari. Computational homogenization based on a weak format of micro-periodicity for rve-problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 200(1-4) :11–26, 2011.

[84] D. Lasseux and F. J. Valdés-Parada. A macroscopic model for immiscible two-phase flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 944 :A43, 2022.

[85] D. Lasseux and F. J. Valdés-Parada. Upscaled dynamic capillary pressure for two-phase flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 959 :R2, 2023.

[86] F. LeBel, A. E. Fanaei, É. Ruiz, and F. Trochu. Prediction of optimal flow front velocity to minimize void formation in dual scale fibrous reinforcements. *International journal of material forming*, 7(1) :93–116, 2014.

[87] J. S. Leclerc and E. Ruiz. Porosity reduction using optimized flow velocity in resin transfer molding. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 39(12) :1859–1868, 2008.

[88] C. Li, C. Xu, C. Gui, and M. D. Fox. Level set evolution without re-initialization : a new variational formulation. In *2005 IEEE computer society conference on computer vision and pattern recognition (CVPR'05)*, volume 1, pages 430–436. IEEE, 2005.

[89] C. Li, C. Xu, C. Gui, and M. D. Fox. Distance regularized level set evolution and its application to image segmentation. *IEEE transactions on image processing*, 19(12) :3243–3254, 2010.

[90] S. T. Lim and W. I. Lee. An analysis of the three-dimensional resin-transfer mold filling process. *Composites Science and Technology*, 60(7) :961–975, 2000.

[91] Y. Liu, N. Moulin, J. Bruchon, P.-J. Liotier, and S. Drapier. Towards void formation and permeability predictions in lcm processes : a computational bifluid–solid mechanics framework dealing with capillarity and wetting issues. *Comptes Rendus Mécanique*, 344(4-5) :236–250, 2016.

[92] K. P. Logakannan, I. Guven, G. Odegard, K. Wang, C. Zhang, Z. Liang, and A. Spear. A review of artificial intelligence (ai)-based applications to nanocomposites. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 197 :109027, 2025.

[93] I. A. R. Lopes, B. P. Ferreira, and F. M. A. Pires. On the efficient enforcement of uniform traction and mortar periodic boundary conditions in computational homogenisation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 384 :113930, 2021.

[94] I. A. R. Lopes and F. M. A. Pires. An assessment of multi-scale models based on second-order computational homogenisation. *Computers & Structures*, 259 :106679, 2022.

[95] I. A. R. Lopes and F. M. A. Pires. Formulation and numerical implementation of a variationally consistent multi-scale model based on second-order computational homogenisation at finite strains for quasi-static problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 392 :114714, 2022.

[96] J. G. Lu, N. S. Woo, and W. R. Hwang. The optimal stokes-brinkman coupling for two-dimensional transverse flows in dual-scale fibrous porous media using the effective navier slip approach. *Physics of Fluids*, 31(7), 2019.

[97] F. F. Luz, S. C. Amico, J. Á. Souza, E. S. Barbosa, and A. G. B. de Lima. Resin transfer molding process : fundamentals, numerical computation and experiments. In *Numerical Analysis of Heat and Mass Transfer in Porous Media*, pages 121–151. Springer, 2012.

[98] L. Ma, X. Dong, W. Zhou, and B. Wang. Direct fe2-based multiscale modeling of progressive damage in woven carbon fiber composites. *Polymer Composites*, 47(3) :2762–2780, 2026.

[99] G. M. C. Magalhães, J. A. Souza, and E. D. dos Santos. A constructal-theory-based methodology to determine the configuration of empty channels used in the resin impregnation of a square porous plate. *Fluids*, 8(12) :317, 2023.

[100] S. P. Makri, E. Xanthopoulou, M. A. Valera, A. Mangas, G. Marra, V. Ruiz, S. Koltsakidis, D. Tzetzis, A. Zoikis Karathanasis, I. Deligkiozi, et al. Poly (lactic acid) composites with lignin and nanolignin synthesized by in situ reactive processing. *Polymers*, 15(10) :2386, 2023.

[101] M. D. F. M. L. Mangani, M. Darwish, et al. The finite volume method in computational fluid dynamics, 2016.

[102] E. Marchandise, P. Geuzaine, N. Chevaugeon, and J.-F. Remacle. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics. *Journal of Computational Physics*, 225(1) :949–974, 2007.

[103] E. Marchandise and J.-F. Remacle. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *Journal of computational physics*, 219(2) :780–800, 2006.

[104] S. Mathieu. *Modélisation du comportement mécanique lors du procédé de mise en forme et pyrolyse des interlocks CMC*. PhD thesis, INSA de Lyon, 2014.

[105] L. Meng, H. Zhang, Z. Liu, X. Shu, and P. Li. A direct fe2 method for concurrent multilevel modeling of a coupled thermoelectric problem–joule heating effect–in multiscale materials and structures. *Thin-Walled Structures*, 203 :112166, 2024.

[106] V. Michaud, M. Nordlund, S. Lundström, and J. Månsson. Capillary phenomena in liquid composite moulding. In *International Conference on Composite Materials : 08/07/2007-13/07/2007*, 2007.

[107] S. Mirjalili, S. S. Jain, and M. Dodd. Interface-capturing methods for two-phase flows : An overview and recent developments. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, 2017(117-135) :13, 2017.

[108] A. Mohan and G. Tomar. Volume of fluid method : A brief review. *Journal of the Indian Institute of Science*, 104(1) :229–248, 2024.

[109] R. Mohan, N. Ngo, K. Tamma, and K. Fickie. On a pure finite-element-based methodology for resin transfer mold (rtm) filling simulations. 1995.

[110] N. Nawafleh and E. Celik. Additive manufacturing of short fiber reinforced thermoset composites with unprecedented mechanical performance. *Additive Manufacturing*, 33 :101109, 2020.

[111] N. Ngo and K. Tamma. Computational developments for simulation based design : Multi-scale physics and flow/thermal/cure/stress modeling, analysis, and validation for advanced manufacturing of composites with complex microstructures. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 10(1) :3, 2003.

[112] H. Ning, N. Lu, A. A. Hassen, K. Chawla, M. Selim, and S. Pillay. A review of long fibre thermoplastic (lft) composites. *International Materials Reviews*, 65(3) :164–188, 2020.

[113] Y. Okagaki, T. Yonomoto, M. Ishigaki, and Y. Hirose. Numerical study on an interface compression method for the volume of fluid approach. *fluids*, 6(2) :80, 2021.

[114] J. S. Oliveira, L. H. Carvalho, J. M. Delgado, A. G. Lima, A. S. Pereira, C. M. Franco, and F. S. Chaves. Applying resin radial injection for manufacturing fiber-reinforced polymer composite : Advanced mathematical modeling and simulation. *Polymers*, 16(24) :3525, 2024.

[115] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1) :12–49, 1988.

[116] E. Öztürk, A. D. Çavdar, and T. Çavdar. Artificial intelligence applications in composites : A survey. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 32(3) :1323–1333, 2025.

[117] M. Panfilov. Homogenized model with capillary nonequilibrium for two-phase flow through highly heterogeneous porous media. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série II, Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 322(3) :195–202, 1996.

[118] C. Park. Numerical simulation of flow processes in composites manufacturing. In *Advances in Composites Manufacturing and Process Design*, pages 317–378. Elsevier, 2015.

[119] C. H. Park, A. Lebel, A. Saouab, J. Bréard, and W. I. Lee. Modeling and simulation of voids and saturation in liquid composite molding processes. *Composites Part A : Applied science and manufacturing*, 42(6) :658–668, 2011.

[120] D. Peng, B. Merriman, S. Osher, H. Zhao, and M. Kang. A pde-based fast local level set method. *Journal of computational physics*, 155(2) :410–438, 1999.

[121] D. Picchi and I. Battiato. The impact of pore-scale flow regimes on upscaling of immiscible two-phase flow in porous media. *Water resources research*, 54(9) :6683–6707, 2018.

[122] E. Polukhov and M.-A. Keip. Second-order computational homogenization of nonlinear fluid flow through porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 127(1) :e70100, 2026.

[123] M. Priyadharshini, D. Balaji, V. Bhuvaneswari, L. Rajeshkumar, M. Sanjay, and S. Siengchin. Fiber reinforced composite manufacturing with the aid of artificial intelligence–a state-of-the-art review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(7) :5511–5524, 2022.

[124] M. Quintard and S. Whitaker. Two-phase flow in heterogeneous porous media : The method of large-scale averaging. *Transport in porous media*, 3(4) :357–413, 1988.

[125] K. Raju, T.-E. Tay, and V. B. C. Tan. A review of the fe2 method for composites. *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design*, 4(1) :1–24, 2021.

[126] W. Ren et al. Boundary conditions for the moving contact line problem. *Physics of fluids*, 19(2), 2007.

[127] W. Ren, D. Hu, et al. Continuum models for the contact line problem. *Physics of fluids*, 22(10), 2010.

[128] W. Ren and E. Weinan. Contact line dynamics on heterogeneous surfaces. *Physics of Fluids*, 23(7), 2011.

[129] I. A. Rodrigues Lopes and F. M. Andrade Pires. A fully second-order homogenization formulation for the multi-scale modeling of heterogeneous materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 123(21) :5274–5318, 2022.

[130] I. A. Rodrigues Lopes and F. M. Andrade Pires. Unlocking the potential of second-order computational homogenisation : an overview of distinct formulations and a guide for their implementation. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(3) :1339–1393, 2022.

[131] P. Royer and F. Cherblanc. Homogenisation of advective–diffusive transport in poroelastic media. *Mechanics Research Communications*, 37(2) :133–136, 2010.

[132] C. D. Rudd, A. C. Long, K. Kendall, and C. Mangin. *Liquid moulding technologies : Resin transfer moulding, structural reaction injection moulding and related processing techniques*. Woodhead Publishing, 1997.

[133] J. Sánchez-Vargas, F. J. Valdés-Parada, M. A. Trujillo-Roldán, and D. Lasseux. Macroscopic model for generalised newtonian inertial two-phase flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 970 :A19, 2023.

[134] M. Sandberg, J. H. Hattel, and J. Spangenberg. Simulation of liquid composite moulding using a finite volume scheme and the level-set method. *International Journal of Multiphase Flow*, 118 :183–192, 2019.

[135] S. Sarojini Narayana, L. Khoun, P. Trudeau, N. Milliken, and P. Hubert. Numerical and experimental investigation of resin flow, heat transfer and cure in a 3d compression resin transfer moulding process using fast curing resin. *Advanced Manufacturing : Polymer & Composites Science*, 10(1) :2378586, 2024.

[136] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *proceedings of the National Academy of Sciences*, 93(4) :1591–1595, 1996.

[137] M. Shakoor. Fems–a mechanics-oriented finite element modeling software. *Computer Physics Communications*, 260 :107729, 2021.

[138] M. Shakoor. A k-medoids-based partitioned method for computational homogenization of heterogeneous materials. *Computers & Structures*, 316 :107875, 2025.

[139] M. Shakoor. Review of level-set reinitialization methods in computational mechanics and materials science. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 33(5) :053001, 2025.

[140] M. Shakoor, M. Bernacki, and P.-O. Bouchard. Three-dimensional numerical modeling of ductile fracture mechanisms at the microscale. In *4th ECCOMAS Young Investigator Conference-YIC 2017*, 2017.

[141] M. Shakoor and C. H. Park. A higher-order finite element method with unstructured anisotropic mesh adaption for two phase flows with surface tension. *Computers & Fluids*, 230 :105154, 2021.

[142] M. Shakoor and C. H. Park. Computational homogenization of unsteady flows with obstacles. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 95(4) :499–527, 2023.

[143] M. Shakoor and C. H. Park. A pure stokes approach for coupling fluid flow with porous media flow. *Finite Elements in Analysis and Design*, 231 :104106, 2024.

[144] M. Shakoor, B. Scholtes, P.-O. Bouchard, and M. Bernacki. An efficient and parallel level set reinitialization method–application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24) :7291–7302, 2015.

[145] K. Shinde, V. Itier, J. Mennesson, D. Vasiukov, and M. Shakoor. Dimensionality reduction through convolutional autoencoders for fracture patterns prediction. *Applied Mathematical Modelling*, 114 :94–113, 2023.

[146] A. Shojaei, S. R. Ghaffarian, and S. M.-H. Karimian. Modeling and simulation approaches in the resin transfer molding process : A review. *Polymer Composites*, 24(4) :525–544, 2003.

[147] K. D. Shokrollahi, D. Toghraie, and M. Hashemian. Experimental and numerical investigation of resin flow within different shapes in the process of composite construction by using of the resin transfer method. *Fibers and Polymers*, 21(3) :571–582, 2020.

[148] S. Soukane and F. Trochu. Application of the level set method to the simulation of resin transfer molding. *Composites Science and Technology*, 66(7-8) :1067–1080, 2006.

[149] J. A. Souza, M. J. A. Nava, L. A. O. Rocha, and S. C. Amico. Two-dimensional control volume modeling of the resin infiltration of a porous medium with a heterogeneous permeability tensor. *Materials Research*, 11 :261–268, 2008.

[150] P. D. Spelt. A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis. *Journal of Computational physics*, 207(2) :389–404, 2005.

[151] J. E. Sprittles and Y. D. Shikhmurzaev. Finite element framework for describing dynamic wetting phenomena. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 68(10) :1257–1298, 2012.

[152] Y. Sudhakar, U. Lācis, S. Pasche, and S. Bagheri. Higher-order homogenized boundary conditions for flows over rough and porous surfaces. *Transport in Porous Media*, 136(1) :1–42, 2021.

[153] D. Sun and W. Tao. A coupled volume-of-fluid and level set (voset) method for computing incompressible two-phase flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(4) :645–655, 2010.

[154] E. Svenning, M. Fagerström, and F. Larsson. Localization aligned weakly periodic boundary conditions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 111(5) :493–500, 2017.

[155] V. B. C. Tan, K. Raju, and H. P. Lee. Direct fe2 for concurrent multilevel modelling of heterogeneous structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 360 :112694, 2020.

[156] J. Thiesen, B. Klahr, T. Carniel, G. Holzapfel, P. Blanco, and E. Fancello. Second-order computational homogenization for bridging poromechanical scales under large deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 433 :117481, 2025.

[157] M. K. Touré and A. Soulaïmani. Stabilized finite element methods for solving the level set equation without reinitialization. *Computers & Mathematics with Applications*, 71(8) :1602–1623, 2016.

[158] F. Trochu and R. Gauvin. Limitations of a boundary-fitted finite difference method for the simulation of the resin transfer molding process. *Journal of reinforced plastics and composites*, 11(7) :772–786, 1992.

[159] F. Trochu, R. Gauvin, and Z. Zang. Numerical analysis of the resin transfer molding process by the finite element method. *ANTEC 92–Shaping the Future.*, 2 :1954–1957, 1992.

[160] J. Varna, R. Joffe, L. A. Berglund, and T. S. Lundström. Effect of voids on failure mechanisms in rtm laminates. *Composites Science and technology*, 53(2) :241–249, 1995.

[161] J. Vila, F. Sket, F. Wilde, G. Requena, C. González, and J. LLorca. An in situ investigation of microscopic infusion and void transport during vacuum-assisted infiltration by means of x-ray computed tomography. *Composites science and technology*, 119 :12–19, 2015.

[162] K. Voronetska, G. Vinay, A. Wachs, and J.-P. Caltagirone. Méthode level-set dans la modélisation des écoulements diphasiques. In *CFM 2011-20ème Congrès Français de Mécanique*. AFM, Maison de la Mécanique, 39/41 rue Louis Blanc-92400 Courbevoie, 2011.

[163] Y. Wang, F. Li, Z. Sun, C. Gu, K. Fu, and X. Zhao. Effect of fiber content on the preparation and mechanical properties of 3d printed short carbon fiber reinforced pa composites. *Polymers*, 17(5) :671, 2025.

[164] Y. Wang, S. Xu, K. Bwar, B. Eisenbart, G. Lu, A. Belaadi, B. Fox, and B. Chai. Application of machine learning for composite moulding process modelling. compos commun 48 : 101960, 2024.

[165] M. Wolff. *Multi-scale modeling of two-phase flow in porous media including capillary pressure effects*. 2013.

[166] J.-J. Xu and W. Ren. A level-set method for two-phase flows with moving contact line and insoluble surfactant. *Journal of Computational Physics*, 263 :71–90, 2014.

[167] B. Yang, Q. Tang, S. Wang, T. Jin, and F. Bi. Three-dimensional numerical simulation of the filling stage in resin infusion process. *Journal of Composite Materials*, 50(29) :4171–4186, 2016.

[168] H. Yang, B. E. Abali, W. H. Müller, S. Barboura, and J. Li. Verification of asymptotic homogenization method developed for periodic architected materials in strain gradient continuum. *International Journal of Solids and Structures*, 238 :111386, 2022.

[169] X. I. Yang and K. P. Griffin. Grid-point and time-step requirements for direct numerical simulation and large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 33(1), 2021.

[170] S. Yashiro, D. Nakashima, Y. Oya, T. Okabe, and R. Matsuzaki. Particle simulation of dual-scale flow in resin transfer molding for process analysis. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 121 :283–288, 2019.

[171] G. You, X. Gao, J. Chen, and K. Zhao. Experimental and numerical simulation of resin flowing in vari process. *Fibers and Polymers*, 24(8) :2673–2681, 2023.

[172] B. Zhang, S. Zhang, Y. Zhang, S. Zhang, B. Zhu, and R. Li. Numerical simulation of dendrite motion fidelity based on the interface capture method. *Journal of Engineering*, 2023(1) :9615648, 2023.

[173] J. Zhang, W. Yang, and Y. Li. Process-dependent multiscale modeling for 3d printing of continuous fiber-reinforced composites. *Additive Manufacturing*, 73 :103680, 2023.

[174] J. Zhang and P. Yue. A level-set method for moving contact lines with contact angle hysteresis. *Journal of Computational Physics*, 418 :109636, 2020.

[175] N. Zhang, S. Gao, M. Song, Y. Chen, X. Zhao, J. Liang, and J. Feng. A multiscale study of cfrp based on asymptotic homogenization with application to mechanical analysis of composite pressure vessels. *Polymers*, 14(14) :2817, 2022.

[176] L. Zhao, J. Mao, X. Bai, X. Liu, T. Li, and J. Williams. Finite element implementation of an improved conservative level set method for two-phase flow. *Computers & Fluids*, 100 :138–154, 2014.

[177] J. Zhi, B. Yang, Y. Li, T.-E. Tay, and V. B. C. Tan. Multiscale thermo-mechanical analysis of cure-induced deformation in composite laminates using direct fe2. *Composites Part A : Applied Science and Manufacturing*, 173 :107704, 2023.

[178] J. Zhu, R. Taylor, and J. Z. (OC). *The finite element method : its basis and fundamentals*. 2005.