

In compliance with the
Canadian Privacy Legislation
some supporting forms
may have been removed from
this dissertation.

While these forms may be included
in the document page count,
their removal does not represent
any loss of content from the dissertation.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DE L'ENTASSEMENT DE PARTICULES LORS DE PROCÉDÉS
DE COUCHAGE DU PAPIER

EVELYNE DESAULNIERS
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)
AOÛT 2003

©Evelyne Desaulniers, 2003.



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

Acquisitions et
services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-86392-1

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-86392-1

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé

MODÉLISATION ET CARACTÉRISATION DE L'ENTASSEMENT DE PIGMENTS
LORS DE PROCÉDÉS DE COUCHAGE DU PAPIER

Présenté par : DESAULNIERS, Evelyne

en vue de l'obtention d'un diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen composé de :

M. PERRIER, Michel, Ph. D., président

M. BERTRAND, François, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. VIDAL, David, M. Sc. A., membre et codirecteur de recherche

M. STUART, Paul, Ph. D., membre

Remerciements

Merci au Professeur François Bertrand de l'URPEI ainsi qu'à M. David Vidal de Paprican pour leur support durant ce travail.

Merci à Timothy Gange et Louis-Alexandre Leclaire pour le modèle de déposition des pigments par la méthode des éléments discrets.

Merci à Mathieu Cloutier, mes parents et amis ainsi que mes collègues de travail pour leur compréhension et leur support moral.

Merci à Poly-Théâtre de m'avoir permis d'évacuer mes frustrations en périodes de stress et de m'avoir fait grandir.

Résumé

Le papier couché est important pour l'industrie canadienne. La conception de nouvelles formulations demeure cependant laborieuse et souvent heuristique. Des outils pour aider les pigmentiers à exécuter leur tâche leur seraient profitables. C'est pourquoi nous avons fait l'étude de modèles de déposition de pigments pour les procédés de couchage du papier.

Nous avons développé un outil de caractérisation pour les gâteaux de pigments obtenus numériquement. Nous pouvons ainsi comparer la porosité, la microrugosité et les caractéristiques du réseau de pores formé par les particules.

Nous avons utilisé une méthode d'analyse d'image, à savoir la segmentation par bassins versants et lignes d'eau, pour obtenir les différents pores de l'entassement de particules. Nous avons par la suite calculé la distribution de leurs tailles, de la taille des cols, de la surface interne, du ratio de la taille des cols / surface interne et de leur connectivité. Nous avons également déterminé la distribution du volume des pores à travers la hauteur du gâteau de pigments. Nous avons validé notre méthode à l'aide d'entassements réguliers et nous avons fait l'étude des caractéristiques d'un entassement monodisperse.

Par ailleurs, nous avons comparé les résultats de porosité obtenus pour des entassements monodisperses et bidisperses en utilisant trois modèles de déposition des pigments, à savoir la méthode de Monte Carlo, la méthode de la descente la plus rapide et la méthode des éléments discrets. Nous avons également comparé les résultats à des valeurs expérimentales et théoriques. Dans tous les cas, les particules utilisées avaient un ratio de taille de 5. Nous avons effectué la comparaison pour plusieurs compositions.

Abstract

Coated paper is important to Canadian industry. However, developing new formulations is time consuming and often uses heuristics. Tools to help coaters would be profitable. This is why we chose to study models to simulate pigment deposition during coating process.

We developed characterization tools to compute packing properties. We can then compare the porosity, microroughness and the porous network characteristics of various packings of pigments.

We used an image analysis method called catchment basins and watersheds to determine pore limits within particle packings. We were then able to determine pore size, throat area, surface area, throat to surface ratio and connectivity distribution. We also computed pore size distribution within the packing. We validated our characterization algorithm with known ordered spheres packings and we studied the characteristics of a typical monodispersed packing.

We compared the porosity of monodisperse and bidisperse packings predicted using three different models, namely the Steepest Descent Deposition Method (SDD), the Discrete Element Method (DEM) and the Monte Carlo Method (MC). Finally, we compared these results to experimental and theoretical data from literature. For all cases, the particle size ratio used was 5. We compared for different compositions.

Table des matières

Remerciements.....	iv
Résumé.....	v
Abstract.....	vi
Table des matières	vii
Liste des figures.....	ix
Liste des tableaux.....	xii
CHAPITRE 1	1
1- Introduction	1
CHAPITRE 2.....	5
2- Revue de littérature.....	5
2.1 Description du procédé de couchage du papier	6
2.2 Modélisation du procédé.....	9
2.2.1 La méthode de descente la plus rapide	10
2.2.2 La méthode de Monte Carlo	13
2.2.3 La dynamique stokesienne.....	17
2.2.4 La méthode des éléments discrets.....	21
2.3 Caractérisation d'un entassement de particules	28
2.3.1 La porosité, la microrugosité et la hauteur moyenne.....	29
2.3.2 L'orientation des particules ellipsoïdales	36
2.3.3 La segmentation de l'espace poreux	38
2.4 Entassements de particules sphériques	57
CHAPITRE 3.....	58
3- Méthodologie.....	58
3.1 Élaboration de l'algorithme de caractérisation	59
3.1.1 Les centres de pores.....	59
3.1.2 La segmentation.....	62
3.1.3 Les statistiques du réseau de pores	63

3.1.4 Validation des résultats	65
3.2 Comparaison de Monte Carlo, de la méthode de la descente la plus rapide et de la méthode des éléments discrets	67
3.2.1 La méthode des éléments discrets	68
3.2.2 La méthode de Monte Carlo	70
3.2.3 La méthode de la descente la plus rapide	71
3.2.4 Données expérimentales	71
CHAPITRE 4	72
4- Résultats et discussion	72
4.1 Validation de l'algorithme de caractérisation	72
4.1.1 Effet du filtre	73
4.1.2 Le calcul des statistiques	77
4.2 Caractéristiques d'un entassement monodisperse	86
4.3 Comparaison des méthodes de la descente la plus rapide, de Monte Carlo et des éléments discrets	98
4.3.1 La méthode des éléments discrets – les entassements monodisperses ...	98
4.3.2 Porosité d'entassements bidisperses en fonction du pourcentage de petites sphères	101
CHAPITRE 5	105
5. Conclusions et recommandations	105
CHAPITRE 6	108
6- Références	108

Liste des figures

Figure 2.1 – Kaolin	7
Figure 2.2 – TiO_2	7
Figure 2.3 – CaCO_3	7
Figure 2.4 – Schéma des couches obtenues selon le type de coucheuse	8
Figure 2.5 – Les trois configurations possibles pour un contact entre sphères	11
Figure 2.6 – Trajectoire d'une particule telle que calculée par la méthode de descente la plus rapide	12
Figure 2.7 – Résumé de la méthode de Monte Carlo	16
Figure 2.8 – Entassement de particules ellipsoïdales obtenu à l'aide de la méthode de Monte Carlo	17
Figure 2.9 – Déformation vs chevauchement	21
Figure 2.10 – Modèle des amortisseurs et des ressorts pour des sphères	22
Figure 2.11 – Chevauchement entre deux particules	24
Figure 2.12 – Tétraèdre formé par quatre particules	39
Figure 2.13 – Polygone de Voronoi et simplexe de Delauney	40
Figure 2.14 – Dilatation	45
Figure 2.15 – Érosion	45
Figure 2.16 – Érosion itérative pour obtenir les marqueurs	46
Figure 2.17 – Érosion ultime	47
Figure 2.18 – Distance géodésique entre deux points	48
Figure 2.19 – Dilatation géodésique	49
Figure 2.20 – Mauvaise segmentation	49
Figure 2.21 – Segmentation correcte	50
Figure 2.22 – Bassins versants et barrages	51
Figure 2.23 – Relations possibles entre Y et $Y \cap X_{h_{\min}}$	51
Figure 2.24 – Exemple de boules et de boules maximales	54

Figure 2.25 – Squelette de trois objets différents	54
Figure 2.26 – Surface médiale et axe médial pour un cylindre elliptique	55
Figure 3.1 – Col en dents de scie	63
Figure 3.2 – Illustration de la surface à calculer dans le cas où elle est en contact avec deux faces d'un voxel	64
Figure 3.3 – Entassement cubique	65
Figure 3.4 – Entassement hexagonal	65
Figure 4.1 – Nombre de centres de pores en fonction de la résolution pour un entassement hexagonal	74
Figure 4.2 – Nombre de centres de pores en fonction de la résolution pour un entassement hexagonal avant et après le filtre	75
Figure 4.3 – Nombre de centres de pores en fonction de la résolution pour un entassement aléatoire	76
Figure 4.4 – Illustration de cinq pores pour un entassement aléatoire	77
Figure 4.5 – Effet de la résolution sur le volume des pores pour un entassement cubique	78
Figure 4.6 – Effet de la résolution sur la taille des cols pour un entassement cubique	79
Figure 4.7 – Effet de la résolution sur la surface interne des pores pour un entassement cubique	81
Figure 4.8 – Effet de la résolution sur le volume des pores pour un entassement hexagonal	82
Figure 4.9 – Effet de la résolution sur la taille des cols pour un entassement hexagonal	83
Figure 4.10 – Effet de la résolution sur la surface interne des pores pour un entassement hexagonal	85
Figure 4.11 – Distribution de la taille des pores en nombre	87
Figure 4.12 – Distribution de la taille des pores en volume	87

Figure 4.13 – Distribution de la taille des pores en nombre obtenue par Toivakka et Nyfors	88
Figure 4.14 – Distribution de la taille des pores en volume obtenue par Toivakka et Nyfors	88
Figure 4.15 – Distribution de la taille moyenne des pores en fonction de la hauteur	89
Figure 4.16 – Distribution de la taille des cols en nombre	90
Figure 4.17 – Distribution de la taille des cols en volume	90
Figure 4.18 – Distribution de la surface interne des pores en nombre	91
Figure 4.19 – Distribution de la surface interne des pores en volume	92
Figure 4.20 – Distribution de la surface interne des pores en volume obtenue par Toivakka et Nyfors	92
Figure 4.21 – Distribution du ratio taille des cols / surface en nombre	93
Figure 4.22 – Distribution du ratio taille des cols / surface en volume	94
Figure 4.23 – Distribution du ratio taille des cols / surface en nombre obtenue par Toivakka et Nyfors	94
Figure 4.24 – Distribution de la connectivité des pores en nombre	95
Figure 4.25 – Distribution de la connectivité des pores en volume	96
Figure 4.26 – Distribution de la connectivité des pores en nombre (à gauche) et en volume (à droite) obtenue par Toivakka et Nyfors	96
Figure 4.27 – Consolidation d'un entassement de particules monodisperse obtenu à l'aide de la méthode des éléments discrets	99
Figure 4.28 – Phénomène de ponts	101
Figure 4.29 – Porosité en fonction du pourcentage de petites sphères pour des entassements bidisperses avec un ratio de taille de 5	102

Liste des tableaux

Tableau 2.1 – Critères de décision pour déterminer si l'ellipsoïde est coupé par le plan	32
Tableau 3.1 – Valeurs théoriques pour l'entassement cubique	66
Tableau 3.2 – Valeurs théoriques pour l'entassement hexagonal	67
Tableau 3.3 – Pourcentages de petites sphères utilisés pour l'étude des entassements bidisperses	70
Tableau 3.4 – Ratios et diamètres des petites sphères utilisés pour l'étude des entassements bidisperses	70
Tableau 4.1 – Porosité d'entassements monodisperses obtenues par les différentes méthodes	100

CHAPITRE 1

1- Introduction

L'industrie papetière est l'une des plus importantes pour l'économie canadienne. En 2000, le Canada était le plus grand producteur de papier journal au monde. L'année suivante, plus de 29 millions de tonnes de divers produits papetiers ont été fabriquées [1]. Dans son ensemble, l'industrie papetière canadienne a généré des revenus de 800 millions de dollars [2].

Une part importante du marché canadien est occupée par le papier couché. En effet, 6,1 millions de tonnes ont été produites en 2001. On fabrique ce produit à partir d'une feuille qu'on couvre d'une couche de pigments. Ceci est fait dans le but d'améliorer l'état de sa surface et d'obtenir les caractéristiques désirées. On a alors un produit à valeur ajoutée. On utilise ce procédé pour fabriquer, entre autres, du papier à usage spécialisé, tel le papier utilisé pour imprimer les magazines.

Le papier couché est obtenu en utilisant une suspension composée de pigments, d'adhésifs et d'adjuvants, qu'on appelle sauce de couchage. La couche de pigments qui est déposée lors du couchage forme, lorsque le liquide a été drainé, une structure poreuse. On peut par la suite mesurer les caractéristiques du produit fini, tels le lustre, l'opacité, la perméabilité et le lustre d'impression. Ces propriétés dépendent de plusieurs facteurs, notamment :

- Les propriétés des pigments (taille, forme, caractéristiques physiques, etc.);
- Les interactions entre les particules;

- Le poids de couche;
- La vitesse de déshydratation par le papier;
- Les conditions de séchage;
- Le type de coucheuse;
- Les propriétés physiques de la feuille de base.

Les caractéristiques macroscopiques du produit fini sont intimement reliées aux propriétés microscopiques du gâteau de pigments. Celles-ci incluent la porosité, la microrugosité, l'orientation des particules qui composent la couche et les caractéristiques du réseau poreux. Il existe des méthodes expérimentales, telle l'intrusion au mercure, qui permettent d'obtenir ces données.

L'un des aspects les plus importants du procédé de couchage est la composition de la suspension utilisée pour traiter la surface du papier. En effet, c'est en modifiant la recette de la sauce de couchage que les papetiers peuvent obtenir les caractéristiques désirées. Présentement, les nouvelles formulations sont développées plus ou moins par essais et erreurs. Bien qu'une longue expérience guide les pigmentiers dans l'élaboration de nouvelles recettes, une telle pratique est laborieuse et demande beaucoup de ressources (coucheuse pilote, appareils de mesure, ressources humaines, etc.).

Heureusement, il existe des outils mathématiques pour aider les pigmentiers à effectuer leurs tâches. Par exemple, ils peuvent utiliser la modélisation par réseau de neurones. Cette méthode permet de prédire de façon précise les caractéristiques du papier couché [3-5].

Il est également possible de modéliser le procédé de couchage. En effet, on peut simuler la déposition des pigments à l'aide de la modélisation d'écoulements granulaires. On suppose alors qu'il s'agit d'une simple sédimentation. Dans ces modèles, les particules

sont représentées individuellement et leur trajectoire est calculée en fonction des certaines règles, dépendamment de la méthode utilisée. Une fois que les particules ont terminé leur sédimentation, on calcule les caractéristiques microscopiques du gâteau de pigments.

De tels outils mathématiques faciliteraient grandement la tâche du pigmentier. En effet, il pourrait tout d'abord tester sa nouvelle recette de sauce de couchage à partir de simulations avant d'en faire l'essai sur une coucheuse pilote. Ainsi, les manipulations nécessaires pour le développement d'une nouvelle formulation seraient réduites.

En exploitant un peu plus loin le potentiel d'une telle méthode, nous ouvrons la porte à la rétro-ingénierie, ce qui rendrait possible l'obtention de la recette de sauce de couchage nécessaire à partir des caractéristiques macroscopiques recherchées. Bien que ce but soit ambitieux, il n'en demeure pas moins la motivation des travaux qui ont été exécutés dans le cadre de ce mémoire.

C'est pourquoi l'objectif général de ce travail est de modéliser et de caractériser le gâteau de pigments obtenu lors du procédé de couchage. L'analyse fera intervenir les caractéristiques de l'espace poreux d'entassements générés à l'aide de simulations numériques.

Plus spécifiquement, nous voulons développer et implanter un algorithme de caractérisation pour un gâteau de pigments. Cet algorithme sera applicable à des sphères et des ellipsoïdes. De plus, tout type de distribution de taille de particules devra pouvoir être caractérisé. Pour démontrer que notre algorithme est applicable, nous allons le valider à l'aide de résultats théoriques d'entassements connus. Par la suite, nous caractériserons un entassement monodisperse aléatoire.

Dans un deuxième temps, des résultats de simulations d'entassements monodisperses et bidisperses obtenus à l'aide de la méthode des éléments discrets seront présentés. Ceux-ci seront comparés aux résultats obtenus par d'autres chercheurs à l'aide des méthodes de Monte Carlo et de la descente la plus rapide. Les résultats seront également comparés à des résultats expérimentaux de la littérature.

Pour atteindre ces objectifs, nous présentons tout d'abord au chapitre 2 une revue de littérature. Nous ferons une description sommaire du procédé de couchage du papier. Nous verrons ensuite comment il est possible d'obtenir des entassements de particules par diverses méthodes de déposition, puis nous donnerons quelques résultats de porosité expérimentaux.

Par la suite, nous exposerons au chapitre 3 la méthodologie que nous utiliserons pour atteindre nos objectifs. Dans un premier temps, nous parlerons de la méthode utilisée pour la segmentation, de certains problèmes rencontrés et de la façon dont nous allons les résoudre. Nous discuterons également de la validation notre algorithme de caractérisation. Nous préciserons certains aspects de la méthode des éléments discrets.

Au chapitre 4, nous exposerons et analyserons les résultats obtenus pour les deux aspects mentionnés, c'est-à-dire la modélisation et la caractérisation. Nous allons tout d'abord valider notre l'algorithme de caractérisation en utilisant des entassements réguliers. Nous examinerons par la suite les résultats obtenus par cet algorithme pour un entassement aléatoire. De plus, nous comparerons les résultats de porosités obtenus par la méthode de Monte Carlo, la méthode de la descente la plus rapide et la méthode des éléments discrets pour des entassements monodisperses et bidisperses.

Finalement, le chapitre 5 présente les conclusions de ce travail et propose certaines recommandations.

CHAPITRE 2

2- Revue de littérature

Afin de bien connaître la situation en terme de modélisation de déposition des pigments, nous allons tout d'abord effectuer une revue de littérature. Pour commencer, nous allons décrire le procédé de couchage du papier.

Ensuite, nous décrirons quatre modèles de déposition des pigments. Nous allons dans un premier temps présenter deux modèles stochastiques, à savoir la méthode de la descente la plus rapide et la méthode de la descente la plus rapide. Par la suite, nous aborderons deux méthodes déterministes, c'est-à-dire la dynamique stokesienne et la méthode des éléments discrets.

Nous verrons ensuite comment il est possible de décrire les propriétés microscopiques des entassements de particules. En effet, nous décrirons une façon de calculer la porosité, la hauteur et la microrugosité des gâteaux de pigments. Nous présenterons également une méthode pour déterminer l'orientation des particules ellipsoïdales. Nous exposerons ensuite diverses méthodes pour déterminer les caractéristiques associées au réseau de pores à l'intérieur de l'entassement. Nous verrons des méthodes géométriques, à savoir la méthode des tétraèdres et la méthode des polyèdres de Voronoi. Nous aborderons également trois méthodes d'analyse d'image, c'est-à-dire la méthode d'érosion et dilatation, la méthode de segmentation par bassins versants et lignes d'eau et la méthode de la squelettisation.

Finalement, nous décrirons les travaux expérimentaux concernant la porosité d'entassements bidisperses.

2.1 Description du procédé de couchage du papier

Bien que le couchage du papier soit une méthode très répandue pour améliorer les caractéristiques du papier, il en existe plusieurs autres. En effet, nous pouvons changer les propriétés en agissant directement sur la pâte – procédé de mise en pâte, choix de l'essence de bois, ajout d'additifs, etc. – ou en faisant subir au produit fini un traitement de surface. Le couchage du papier fait partie de cette dernière catégorie.

Par ailleurs, le couchage du papier peut se faire à même la machine, c'est-à-dire après la zone de formation (couchage sur machine), ou encore sur un appareil à part (couchage hors machine). Le choix de la philosophie d'exploitation d'une coucheuse de papier a bien entendu des incidences sur le produit et même sur l'usine.

Dans le cas du couchage sur machine, la formation de la feuille et l'opération de couchage sont dépendantes l'une de l'autre. Par exemple, si un problème survient dans la production régulière, le couchage doit s'arrêter. En outre, il est plus laborieux de changer le produit fabriqué (la « sorte » de papier couché). De plus, le produit fini est généralement de moins bonne qualité que celui obtenu par le couchage hors machine.

Par contre, le couchage sur machine requiert moins d'espace et de main d'œuvre. De plus, la manutention des bobines de papier est réduite, ce qui diminue le risque de les endommager. Finalement, il encourage une bonne définition de la qualité désirée dès le départ, puisqu'il est plus complexe de modifier les paramètres en cours de production.

Plusieurs facteurs influencent plus directement les propriétés finales du papier. La composition de la sauce de couchage est sans doute l'un des paramètres les plus significatifs. En effet, il existe plusieurs types de pigments qui peuvent être utilisés, comme par exemple le kaolin, le CaCO_3 ou le TiO_2 . Ceux-ci ont, entre autres, des propriétés physiques différentes (dureté, couleur, etc.). De plus, leur forme et leur distribution de tailles varient selon leur nature, tel qu'il l'est illustré dans les figures 2.1 à 2.3. La forme et la taille des particules de la suspension affectent les propriétés du produit fini.

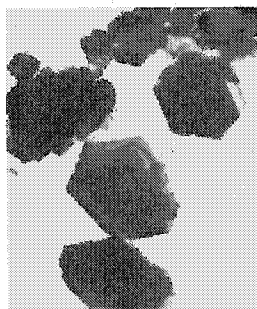


Figure 2.1 – Kaolin

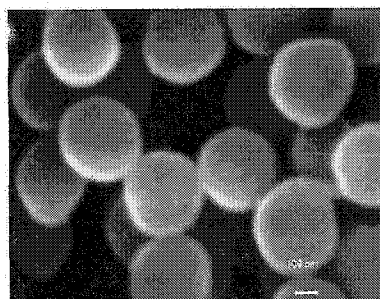


Figure 2.2 – TiO_2

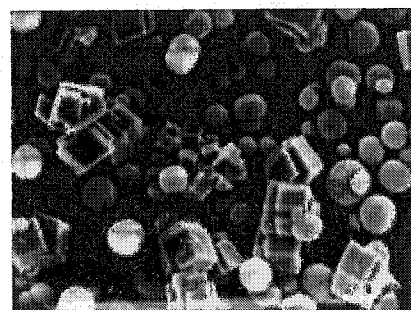


Figure 2.3 – CaCO_3

D'autres ingrédients forment la phase solide de la sauce de couchage, comme par exemple les adhésifs (latex, amidon) qui servent, entre autres, à lier les pigments entre eux de même qu'à la feuille de papier. En outre, certains adjuvants sont ajoutés pour améliorer la souplesse de la couche ou encore pour contrôler la viscosité de la suspension. Parmi ceux-ci, on retrouve les plastifiants : stéarates, émulsion de cire; et les agents épaississants : cellulose et dérivés; etc. Ces divers ingrédients déterminent également les propriétés de la sauce de couchage (rhéologie, densité, etc.).

Le type de coucheuse utilisé peut également agir sur la structure finale de la couche. On retrouve les coucheuses à rouleaux, à lame d'air, à barre rotative ou à lame. L'uniformité de la couche varie de l'une à l'autre. En effet, une coucheuse à lame aura

plutôt tendance à remplir les creux de la surface cellulosique, ce qui fait un fini plus plat. La couche de pigments sera donc d'épaisseur variable. La coucheuse à lame d'air, elle, va conserver la rugosité de la feuille. L'épaisseur de la couche est par conséquent plus uniforme. Finalement, la coucheuse à rouleau donne une couche entre celles formées par les deux autres types de coucheuse.

Chacune de ces structures a ses avantages et ses inconvénients et elles ont toutes une influence sur les propriétés macroscopiques du produit fini. Les schémas qui suivent illustrent les différences entre les couches rendues par les divers types de machine.

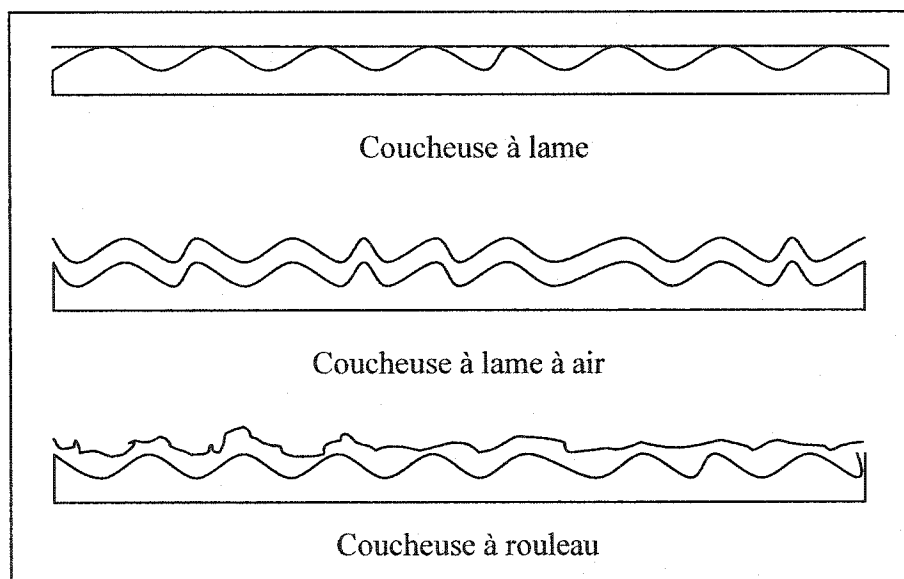


Figure 2.4 – Schéma des couches obtenues selon le type de coucheuse

Finalement, la feuille utilisée, la rhéologie de la sauce de couchage, la technique de séchage utilisée et le degré de supercalandrage sont aussi des paramètres qui influencent la structure finale de la couche, et par conséquent, ses propriétés microscopiques et macroscopiques.

2.2 Modélisation du procédé

Dans le but de simuler le procédé de couchage du papier, nous avons étudié plusieurs modèles. Ceux-ci ont été utilisés dans le contexte des écoulements granulaires. Certains ont également servi dans le cadre du couchage du papier.

Dans ces modèles, les particules sont représentées individuellement. Par conséquent, leur description est un élément clé. Elles peuvent être symbolisées par des sphères, des ellipsoïdes, des superellipsoïdes ou même des polyèdres. Le premier cas, le plus simple, est le plus répandu. Les ellipsoïdes sont très peu employés, bien qu'il soit possible de les utiliser dans quelques méthodes, comme Monte Carlo. Par ailleurs, les méthodes utilisant les superellipsoïdes ou des polyèdres sont pratiquement inexistantes. Par contre, pour le cas bidimensionnel, l'emploi de polygones est assez commun.

La distribution de la taille des particules peut être monodisperse (une seule taille), bidisperse (deux tailles) ou polydisperse (distribution normale, lognormale, etc.). Finalement, les forces en jeu et les règles utilisées pour calculer les déplacements changent d'un modèle à l'autre.

Dans la majorité des modèles, la feuille est tout simplement représentée par une surface plane. Il s'agit d'une représentation assez fidèle de la situation. Il est par contre possible de modéliser les imperfections du substrat cellulosique à l'aide d'un regroupement de sphères ou d'ellipsoïdes fixes ou encore par une surface sinusoïdale.

Nous nous sommes penchés sur quatre modèles en particulier. Dans chacun des cas, à moins qu'il ne le soit spécifiquement mentionné, le substrat est représenté par une surface plane. La plupart des méthodes utilisent des sphères. Nous avons étudié le fonctionnement ainsi que les avantages et les inconvénients de chacune des méthodes.

2.2.1 La méthode de descente la plus rapide

La méthode de descente la plus rapide (appelée aussi méthode de descente balistique) a été développée en 1987 par R. Jullien [7]. En 1995, elle a été implantée par Eksi [8] pour modéliser la déposition des pigments d'une sauce de couchage. L'hypothèse de base de ce modèle est que la déposition est essentiellement géométrique et qu'elle ne dépend pas des interactions particulières ou des collisions.

Ce modèle stochastique peut être utilisé aussi bien en deux qu'en trois dimensions. Au départ, les particules sont placées dans un domaine rectangulaire à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires. Le diamètre de chacune des particules est également déterminé de cette façon, tout en considérant la distribution des tailles désirée. De plus, on utilise un domaine périodique en x ou en x et y , selon le nombre de dimensions, pour éviter les effets de paroi.

Lorsque l'état initial a été déterminé, les particules sont soumises une à la fois à un champ de gravité. Chaque particule est alors déposée sur l'empilement en formation. Lorsqu'une particule en rencontre une qui a été stabilisée, un traitement spécial est nécessaire. Deux possibilités s'offrent alors à la trajectoire.

Premièrement, la particule peut être stabilisée. Pour ce faire, elle doit avoir un nombre suffisant de points de contact (deux ou trois, selon le nombre de dimensions). De plus, en trois dimensions, son centre de masse doit être à l'intérieur du triangle formé par les axes reliant les trois sphères deux par deux, comme il est illustré à la figure 2.5.

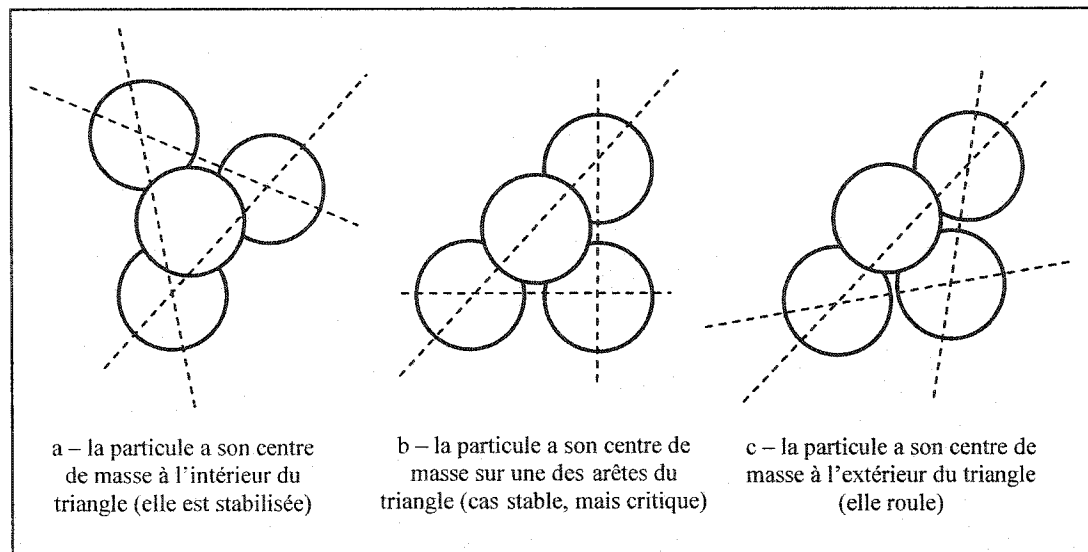


Figure 2.5 – Les trois configurations possibles pour un contact entre sphères

Si le nombre de contacts n'est pas suffisant ou si le centre de masse n'est pas stabilisé, la particule roule toujours autour de l'axe le plus près de son centre de masse, vers l'extérieur du triangle.

Si la particule n'est pas stabilisée, elle peut également changer de direction en roulant sur la particule support.

La figure 2.6 illustre la méthode pour un cas en deux dimensions.

La méthode de descente la plus rapide est un modèle simple et facile à implanter pour des particules sphériques. Le temps de calcul nécessaire est court et les résultats ainsi obtenus sont assez précis, comme vous pourrez le constater dans le chapitre 4. De plus, les collisions entre les particules sont permises, quoique instantanées [9].

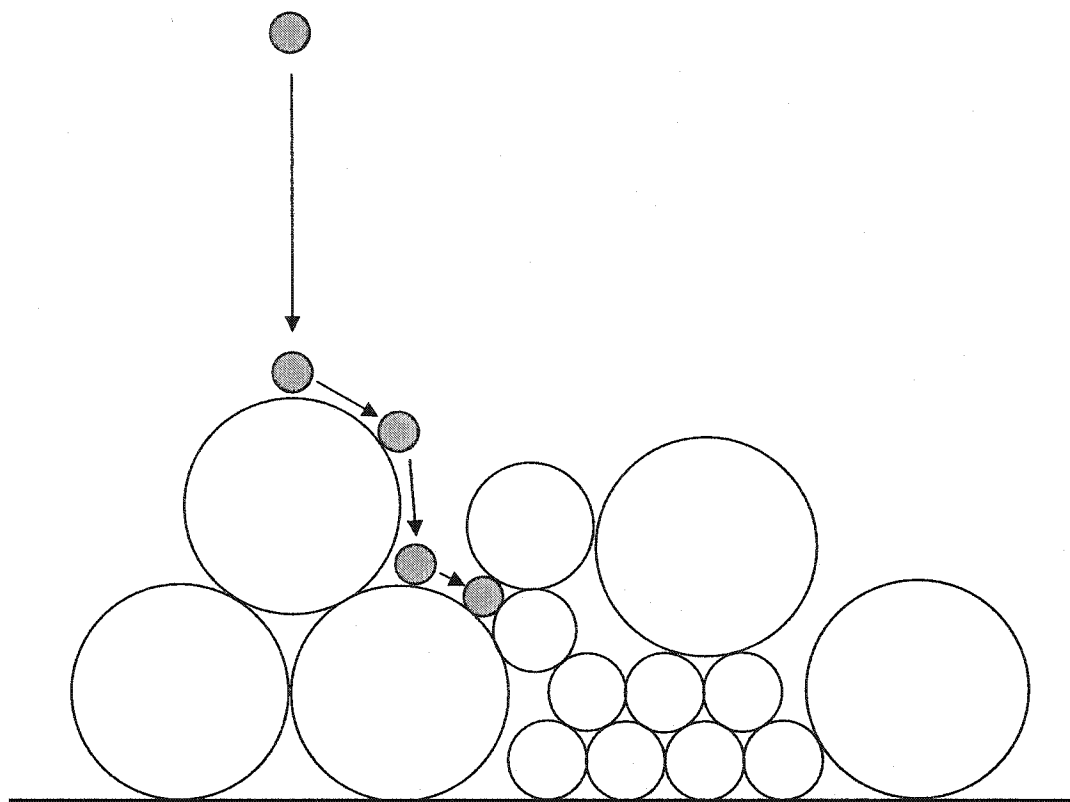


Figure 2.6 – Trajectoire d'une particule telle que calculée par la méthode de descente la plus rapide

En contrepartie, elle est peu pratique et difficile à implanter pour des particules ellipsoïdales. De plus, le taux de drainage de la phase liquide n'est pas considéré. Finalement, étant donné la nature stochastique du modèle, il n'est pas possible d'obtenir le temps réel requis pour que l'entassement soit stable, puisque qu'il n'est pas considéré.

En somme, la méthode de la descente la plus rapide est une méthode simple qui permet d'avoir des résultats précis pour un écoulement granulaire où les chocs entre les particules ont peu d'influence.

2.2.2 La méthode de Monte Carlo

En 1986, Rosato *et al.* [10] développèrent la méthode de Monte Carlo pour les écoulements granulaires. En effet, ils voulaient étudier le problème de la ségrégation par taille, aussi connu sous le nom du problème des noix du Brésil. Pour ce faire, ils ont simulé la déposition de cercles (2D) soumis à un champ gravitationnel.

En 2000, Vidal *et al.* [11, 12] ont adapté cette méthode au problème du couchage. À la gravité, ils ont ajouté l'énergie potentielle de traînée du liquide. Par ailleurs, le modèle a été implanté en trois dimensions, pour des sphères et des ellipsoïdes.

Il s'agit d'un modèle stochastique. La configuration initiale et la taille des particules sont établies de la même manière qu'avec la méthode de la descente la plus rapide, c'est-à-dire à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires. Des conditions aux limites périodiques sont également employées. Le mouvement des particules est déterminé par bilans d'énergie.

Pour chacune des itérations, l'énergie initiale totale du système est tout d'abord calculée. Pour ce faire, on utilise l'équation qui suit :

$$E(\tilde{c}) = U(\tilde{c}) + E_g(\tilde{c}) + E_d(\tilde{c}) , \quad (2.1)$$

où $\tilde{c}$ représente les coordonnées des centres de masse des particules, U l'énergie d'interaction entre les particules, E_g l'énergie potentielle gravitationnelle et E_d , une énergie potentielle de traînée.

L'énergie d'interaction totale entre les particules permet d'éviter les contacts. Elle est calculée à l'aide des relations suivantes :

$$U_{ij}(c_i, c_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } |c_i - c_j| \geq r_i + r_j \\ \infty & \text{si } |c_i - c_j| < r_i + r_j \end{cases}, \quad (2.2)$$

$$U(\tilde{c}) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j U_{ij}(c_i, c_j), \quad (2.3)$$

où r_i et r_j sont les rayons des particules. On obtient l'énergie potentielle gravitationnelle en utilisant la formule qui suit :

$$E_g(\tilde{c}) = \sum_{j=1}^N v_j \Delta \rho_j g z_j = \sum_{j=1}^N \frac{4\pi r_j^3}{3} \Delta \rho_j g z_j, \quad (2.4)$$

où v_j est le volume de la particule, $\Delta \rho_j$ la différence de densité entre la particule et le fluide, z_j la hauteur de la particule, et g l'accélération gravitationnelle.

Finalement, l'énergie potentielle de traînée est donnée par :

$$E_d(\tilde{c}) = \sum_{j=1}^N C_j \mu V z_j = \sum_{j=1}^N 6\pi r_j \mu V z_j, \quad (2.5)$$

où μ est la viscosité du fluide et V , la vitesse de drainage moyenne. Pour déterminer le mouvement des particules, on définit une translation maximale δ telle que $0 < \delta < \frac{2}{\sqrt{3}} r_{\min}$. Le déplacement se calcule sur une particule à la fois.

Tout d'abord, la longueur du déplacement est déterminée à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires. En effet, une translation ξ est déterminée au hasard pour chacune des directions. La nouvelle position de la particule est donnée par :

$$\left. \begin{aligned} x'_j &= x_j + \xi_x \delta \\ y'_j &= y_j + \xi_y \delta \\ z'_j &= z_j + \xi_z \delta \end{aligned} \right\} \text{ où } -1 \leq \xi_x, \xi_y, \xi_z \leq 1. \quad (2.6)$$

L'énergie totale du système peut subséquemment être évaluée, considérant la nouvelle position de la particule à l'étude. L'énergie de l'état initial et de l'état final sont comparées et on accepte le déplacement si $\Delta E = E(\tilde{c}') - E(\tilde{c}) \leq \varphi$. Dans la version implantée par Vidal *et al* [11], $\varphi = 0,05$ pour tenir compte du mouvement Brownien. Cette valeur a été déterminée par une analyse de sensibilité. En effet, au-delà de cette valeur, les particules ont tendance à osciller de haut en bas plutôt que de se stabiliser. Finalement, si $\Delta E > \varphi$, le mouvement est accepté au moyen d'une fonction de probabilité.

Une fois la nouvelle position acceptée ou rejetée, la procédure que nous venons de décrire est appliquée à la prochaine particule. La figure suivante résume la procédure pour le mouvement des particules.

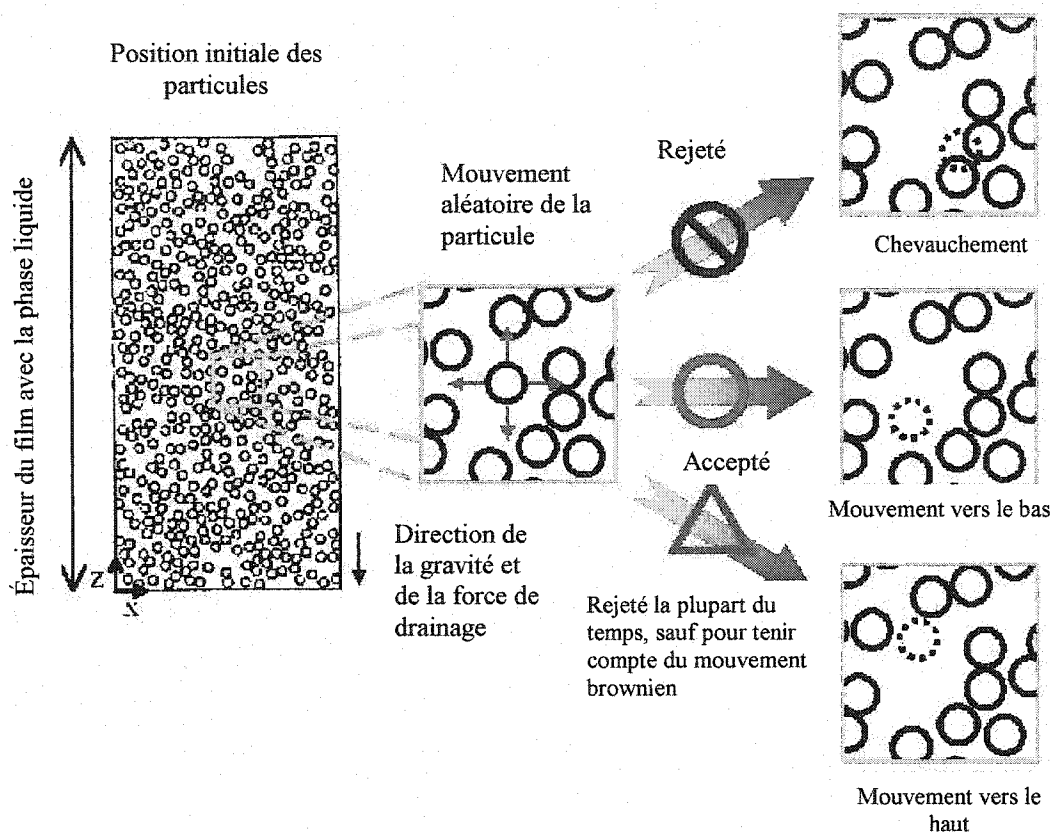


Figure 2.7 – Résumé de la méthode Monte Carlo
(adapté d'une figure dans [11])

La méthode de Monte Carlo est un modèle simple à implanter. Il est possible d'obtenir des résultats plutôt précis avec un temps de calcul relativement court. De plus, il est possible de modifier les calculs d'énergie pour représenter les particules par des ellipsoïdes plutôt que par des sphères. L'entassement illustré à la figure 2.8 a été obtenu par une simulation de type Monte Carlo utilisant des ellipsoïdes.

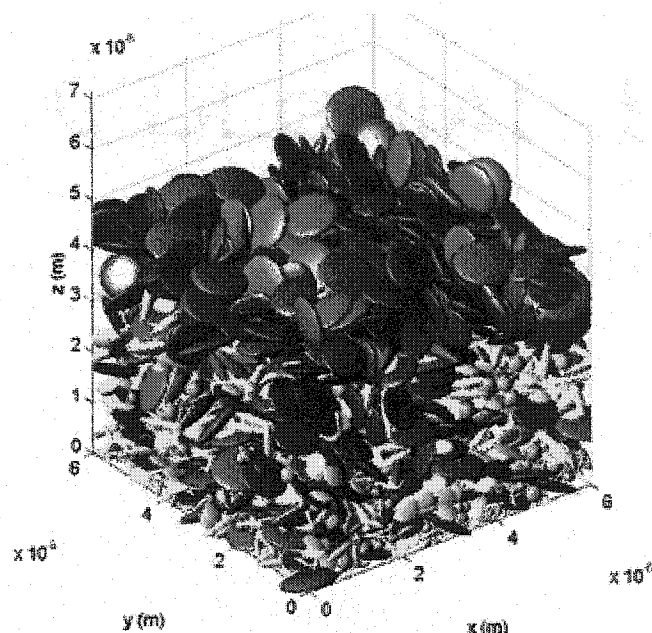


Figure 2.8 – Entassement de particules ellipsoïdales obtenu à l'aide de la méthode de Monte Carlo

Cependant, les contacts entre les particules ne sont pas permis. Les interactions particule – particule sont par conséquent négligées. Il serait par contre possible de modifier l'énergie d'interaction pour permettre de petits chevauchements. Ceci aurait pour effet de permettre des collisions instantanées entre les particules. Finalement, le temps réel n'est pas considéré.

Bref, la méthode de Monte Carlo semble être un modèle adapté aux écoulements granulaires où les interactions entre les particules ne sont pas importantes.

2.2.3 La dynamique stokesienne

La méthode de la dynamique stokesienne, qui est un modèle déterministe, a été développée en 1985 par Brady et Bossis [13] dans le cadre d'études sur la rhéologie des suspensions. Cette technique permet de considérer les interactions à plusieurs corps. Parmi elles, on retrouve celles qui régissent la relation entre les particules et la microstructure d'une suspension, ou encore les forces de champ éloigné. Il est par la suite possible de prédire les propriétés macroscopiques et microscopiques de la suspension (ou de la couche de pigments, dans le cas qui nous intéresse). L'étude des

caractéristiques peut se faire aussi bien sur le système dynamique que sur le système statique.

Ce modèle a surtout été utilisé dans le cadre de l'étude de la rhéologie des suspensions. Barbesta *et al.* [14] ont utilisé cette méthode pour étudier le cas particulier de la rhéologie des sauces de couchage. Ils ont implanté la dynamique stokesienne pour un cas bidimensionnel, avec des disques de rayon unique (monodispersés).

Dans le cadre d'autres travaux, ce groupe de recherche a modélisé le mouvement de pigments dans une coucheuse à lame. Pour ce faire, ils ont utilisé des particules ellipsoïdales [15]. Le champ de vitesse du fluide avait été obtenu à l'aide d'un logiciel de calcul utilisant la méthode des éléments spectraux. Le cas à l'étude était encore une fois en deux dimensions.

En 2001, Toivakka a implanté cette méthode pour la simulation du couchage du papier [16]. En particulier, il a considéré les forces colloïdales et les forces mécaniques de l'interaction entre le fluide et les particules et de l'interaction entre les particules. Ceci était dans le but d'avoir une représentation plus complète du phénomène. Les pigments étaient représentés par des sphères monodispersées.

Dans ce travail, la force motrice de l'écoulement était principalement due à la pénétration de la sauce de couchage dans le papier. Celle-ci a été simulée à partir de pores modélisés dans la feuille. Par ailleurs, cet auteur a étudié l'influence du type de surface en utilisant une surface plane et une surface sinusoïdale.

La dynamique stokesienne consiste à prédire le mouvement des particules en résolvant l'équation de Langevin, c'est-à-dire :

$$M \cdot \frac{dU}{dT} = F^T, \quad (2.7)$$

où M inclut la masse et le premier moment d'inertie des particules, U les vitesses de translation et de rotation et F^T , les forces et le couple. Il s'agit d'un cas particulier de la deuxième loi de Newton. Le terme de force contient trois paramètres, à savoir les forces hydrodynamiques (F^H), les forces non hydrodynamiques (F^P) et les forces browniennes (F^B). Elles sont reliées par l'équation suivante :

$$F^T = F^H + F^P + F^B \quad (2.8)$$

Dans le cas qui nous intéresse, les vitesses en jeu sont faibles et le diamètre des particules est très petit. Le nombre de Reynolds est donc bas. Par conséquent, les forces hydrodynamiques peuvent être calculées à l'aide de la relation suivante :

$$F^H = 6\pi\mu a(U^\infty - U) = \mu A(U^\infty - U), \quad (2.9)$$

où U^∞ est la vitesse de la phase liquide, U la vitesse des particules et μ la viscosité du liquide. Cette relation provient simplement de la loi de Stokes. Le terme du centre est pour le cas particulier des sphères de diamètre a tandis que celle de droite est une forme généralisée qui s'applique à tout type de particule.

En pratique, les forces hydrodynamiques peuvent être exprimées sous la forme généralisée suivante :

$$F^H = R \cdot U, \quad (2.10)$$

où R est la matrice de résistance [17].

Les forces non-hydrodynamiques sont en fait les forces colloïdales et se retrouvent dans F^p . Parmi celles-ci, on retrouve les forces de répulsion électrostatique, les forces d'attraction de van der Waals et la force de déplétion.

Cette méthode a pour avantage d'être fidèle à la physique des écoulements de particules dans une phase liquide, puisqu'elle considère l'hydrodynamique du fluide qui entoure les particules, entre autres. De plus, étant donné que la deuxième loi de Newton est utilisée pour calculer le mouvement des particules, le temps réel est considéré et peut même être évalué. Il est par ailleurs possible d'employer des particules ellipsoïdales [15]. Par contre, le calcul des forces devra être adapté pour cette géométrie particulière. Finalement, comme elle inclut les forces colloïdales, elle semble particulièrement adéquate pour représenter les suspensions à haute teneur en solides, comme c'est le cas dans les sauces de couchage.

En revanche, les contacts entre les particules ne sont pas permis. De plus, étant donné que cette méthode requiert la solution d'un système matriciel à matrice pleine, seul un petit nombre de particules peut être considéré lors de la simulation (de l'ordre de 400 particules).

Bref, la dynamique stokesienne est une méthode adaptée pour les écoulements granulaires où les interactions entre les particules sont plutôt de nature colloïdale et où les collisions ne jouent pas un rôle important.

2.2.4 La méthode des éléments discrets

La méthode des éléments discrets est un autre modèle déterministe. Elle a été amplement utilisée pour la simulation d'écoulements granulaires tels les écoulements de poudres. Elle a été implantée à l'URPEI dans le cadre du couchage de papier par Gange [18] et Bertrand *et al.* [19]. Précisons toutefois qu'il s'agit d'une première pour ce domaine.

Dans ce modèle, un bilan de forces est effectué sur chacune des particules. Par la suite, on utilise la deuxième loi de mouvement de Newton pour calculer leur déplacement. Ce dernier est exprimé de façon générale par l'équation suivante :

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = \sum \bar{F} , \quad (2.11)$$

où $\sum \bar{F}$ dépend du problème considéré.

Dans ce modèle, les collisions entre les particules sont permises et elles considèrent la relaxation qui les accompagne. De plus, on pose l'hypothèse que les pigments se

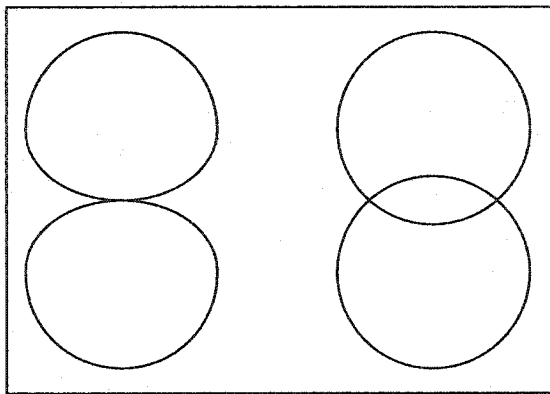


Figure 2.9 – Déformation vs chevauchement

déforment lorsqu'ils sont en contact. Par contre, étant donné qu'une vraie déformation cause des difficultés pour la modélisation, on suppose que ces particules se chevauchent. Ce chevauchement est négligeable par rapport à la taille des particules (de l'ordre de quelques pourcents).

La figure 2.9 illustre la différence entre déformation et chevauchement. Ce dernier a été exagéré dans le but d'en faire une meilleure représentation. Nous pouvons remarquer que les disques déformés ne peuvent plus être exprimés en termes mathématiques simples. C'est pourquoi nous optons plutôt pour un chevauchement.

Étant donné que les contacts sont permis, la force d'interaction entre les particules est un aspect important de la méthode. En 1979, Cundall et Strack [20] ont proposé de la modéliser à l'aide de couples ressort – amortisseur (spring – dashpot, en anglais). Deux couples sont nécessaires pour chaque paire de particules qui sont en contact. L'un représente les forces normales tandis que l'autre correspond aux forces tangentiels. Un tel système peut être illustré à l'aide de la figure 2.10.

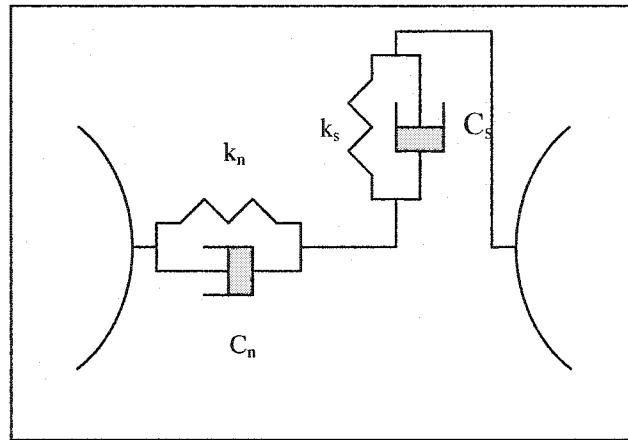


Figure 2.10 – Modèle des amortisseurs et des ressorts pour des sphères

Les forces d'interaction sont calculées à partir du moment où le contact est détecté. La forme la plus générale est :

$$F_{contact,n} = k_n \delta_n^\alpha + C_n \dot{\delta}_n, \quad (2.12)$$

$$F_{contact,s} = k_s \delta_s + C_s \dot{\delta}_s, \quad (2.13)$$

où δ_n et δ_s sont les composantes normale et tangentielle du chevauchement et où k_n , k_s , c_n et c_s sont les constantes de rappel et d'amortissement dans les directions normales et tangentielles.

Le chevauchement détermine la compression du ressort. Par conséquent, le taux de chevauchement est relié à l'élasticité du ressort (k_n , k_s). Les vitesses, pour leur part, établissent la compression de l'amortisseur (c_n , c_s). Ce dernier assure la dissipation de l'énergie.

Les forces tangentielles représentent le cisaillement entre les particules. Dans ce cas, la compression de l'amortisseur est déterminée par la vitesse de rotation des particules tandis que le ressort est comprimé par leur glissement relatif.

Le système amortisseur – ressort fait en sorte que les particules en contact se repoussent lorsqu'elles s'approchent alors qu'elles s'attirent lorsqu'elles s'éloignent. La force de répulsion assure que le chevauchement n'est pas trop important.

Maintenant, supposons le cas bidimensionnel illustré à la figure 2.11.

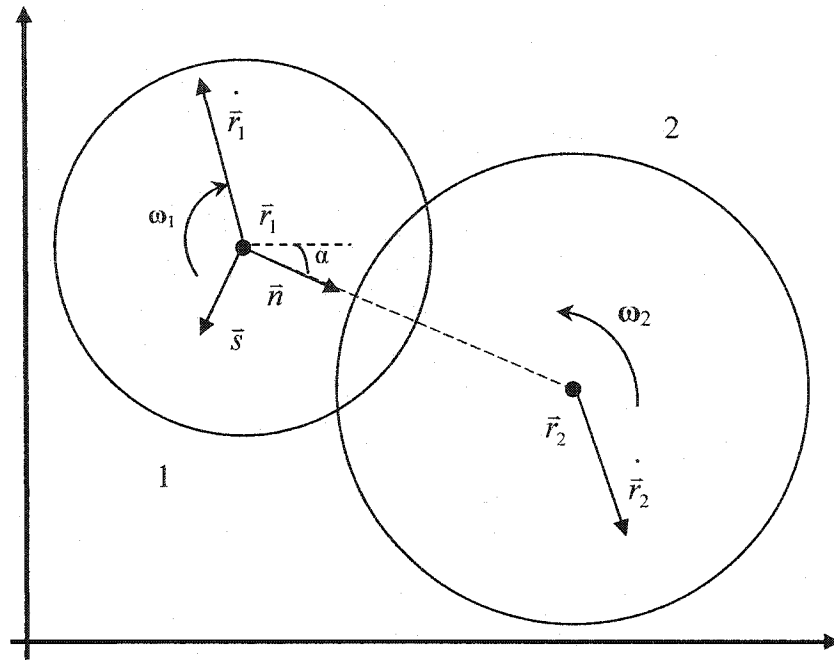


Figure 2.11 – Chevauchement entre deux particules

Soient les disques 1 et 2. Leurs centres de gravité sont situés en $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, respectivement. Leurs vitesses de translation sont de $\dot{\vec{r}}_1$ et $\dot{\vec{r}}_2$ et leurs vitesses de rotation de ω_1 et ω_2 . Ils ont tous deux un rayon R , une masse m et un moment d'inertie I qui peuvent être différents ou non. Finalement, nous avons les vecteurs unitaires $\vec{n}$ et $\vec{s}$, qui sont perpendiculaires l'un par rapport à l'autre et qui servent à décomposer la force au point de contact pour obtenir les composantes normale et tangentielle. Ils sont obtenus à l'aide de l'équation suivante :

$$\vec{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha), \quad (2.14)$$

$$\vec{s} = (\sin \alpha, -\cos \alpha). \quad (2.15)$$

Lorsqu'un contact entre deux particules est détecté, les forces sont calculées. Pour deux disques donnés, on sait qu'il y a contact si :

$$L < R_1 + R_2, \quad (2.16)$$

où L est la distance entre les deux particules. Étant donné la quantité importante de particules, il est important d'optimiser cette étape. Les travaux de Gange [18] suggèrent quatre familles de méthodes de détection de contacts, soient :

1. Les méthodes de subdivision;
2. Les méthodes de balayage du voisinage;
3. La méthode des volumes englobants;
4. La méthode des projections.

Dans les **méthodes de subdivision**, l'espace est fragmenté en plusieurs cellules, de telle sorte qu'une cellule ne puisse être occupée que par une seule particule. Par la suite, un balayage se fait sur les cellules du voisinage de la particule. Le choix du voisinage est particulier à l'algorithme sélectionné (par recherche dans la grille, par liste chaînée ou par niveaux emboîtés).

Dans les **méthodes de balayage du voisinage**, la recherche se fait sur les dix particules les plus près de celle qui est à l'étude. Il est aussi possible d'utiliser la méthode de triangulation de Delaunay [21]. Dans ce cas, seules les particules reliées par un segment sont examinées.

Dans la **méthode des volumes englobants**, les particules sont tout simplement englobées dans une figure plus simple, telles une boîte ou une sphère (un carré ou un disque, en deux dimensions). Elle est utile pour des particules de géométrie complexe.

Dans la **méthode des projections**, la particule est projetée sur trois plans (en trois dimensions). S'il n'y a pas d'intersection sur aucun des trois plans, on considère qu'il

n'y a pas de contact. Cette méthode est encore une fois pratique pour des cas de géométrie complexe.

Après que le contact entre deux particules ait été détecté par l'une ou l'autre de ces méthodes, le bilan de forces peut être effectué. Tout d'abord, on détermine la vitesse relative des disques à l'aide de l'expression suivante :

$$\vec{v} = (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) - (\omega_1 R_1 + \omega_2 R_2) \cdot \vec{s} . \quad (2.17)$$

Celle-ci peut être décomposée en vitesses tangentielle et normale :

$$\begin{aligned} v_N &= (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) \cdot \vec{n} - (\omega_1 R_1 + \omega_2 R_2) \vec{s} \cdot \vec{n} \\ &= (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) \cdot \vec{n} \end{aligned} , \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} v_S &= (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) \cdot \vec{s} - (\omega_1 R_1 + \omega_2 R_2) \vec{s} \cdot \vec{s} \\ &= (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) \cdot \vec{s} - (\omega_1 R_1 + \omega_2 R_2) \end{aligned} . \quad (2.19)$$

Il est alors possible de déterminer les déplacements pour un pas de temps Δt :

$$\Delta_N = v_N \cdot \Delta t , \quad (2.20)$$

$$\Delta_S = v_S \cdot \Delta t . \quad (2.21)$$

On peut par la suite mettre à jour les forces tangentielle et normale :

$$\Delta F_N = k_N \Delta_N + c_N v_N , \quad (2.22)$$

$$\Delta F_S = k_S \Delta_S + c_S v_S , \quad (2.23)$$

$$(F_N)_t = (F_N)_{t-1} + \Delta F_N , \quad (2.24)$$

$$(F_S)_t = (F_S)_{t-1} + \Delta F_S . \quad (2.25)$$

Le frottement peut également être considéré dans le bilan de forces. Pour ce faire, on suppose un coefficient de friction entre les particules 1 et 2, qu'on appellera μ_{12} . On vérifie ensuite l'inégalité suivante :

$$|F_s| \leq \mu_{12} |F_N| . \quad (2.26)$$

Si elle est fausse, on pose alors $F_s := \mu_{12} F_N$, tout en préservant la direction. Après, on calcule le moment résultant pour chacun des disques en considérant les forces de cisaillement. La convention de signe positif est prise comme étant le sens horaire. Ainsi :

$$\sum_i M_i = R \cdot \sum_i F_{S_i} , \quad (2.27)$$

où R est le rayon du disque et i , les points de contacts. Un fois que toutes ces informations ont été obtenues, on détermine le mouvement des disques. Pour commencer, on décompose les forces en terme de x et y et on calcule les accélérations $\ddot{\vec{r}}$ et $\ddot{\omega}$ à l'aide de la seconde loi de Newton, c'est-à-dire :

$$m\ddot{\vec{r}}_i = \sum_i \vec{F}_i , \quad (2.28)$$

$$I\ddot{\omega}_i = \sum_i M_i . \quad (2.29)$$

où I est le moment d'inertie du disque. La nouvelle position et le nouvel angle peuvent être obtenus par intégration numérique. Plusieurs schémas de calcul ont été développés à cette fin. Le lecteur qui voudrait plus d'informations à cet effet est invité à consulter [22].

On peut généraliser le modèle pour un cas en trois dimensions. Dans ces circonstances, la vitesse de rotation devient un vecteur et le vecteur $\vec{s}$ n'est pas connu.

Nous pouvons constater que cette méthode a pour avantage de considérer le temps réel, étant donné que des bilans de forces sont utilisés pour calculer le mouvement des particules. Par ailleurs, les collisions entre les particules sont non seulement permises, mais elles ne sont pas instantanées. Elles sont modélisées de façon à être le plus fidèle possible à la physique.

Par contre, le temps de calcul nécessaire est important. On peut cependant contourner ce problème en parallélisant le programme, c'est-à-dire en effectuant les calculs sur plusieurs processeurs en même temps. De plus, il est possible d'utiliser des particules non sphériques pour modéliser les pigments, bien que ce ne soit pas trivial.

On peut donc conclure que la méthode des éléments discrets est un modèle adapté pour les écoulements granulaires où les contacts entre les particules prédominent. C'est le cas de la sédimentation de pigments. Par contre, le programme doit être parallélisé afin de réduire le temps nécessaire aux calculs.

2.3 Caractérisation d'un entassement de particules

Une fois que nous avons obtenu l'entassement de particules, nous pouvons procéder à l'évaluation de ses caractéristiques microscopiques. Ces dernières, rappelons-le, sont reliées aux propriétés macroscopiques. Dans notre discussion sur des travaux concernant cette caractérisation, nous nous concentrerons sur la porosité et la microrugosité, l'orientation des particules ellipsoïdales et les caractéristiques du réseau poreux à l'intérieur du gâteau de pigments.

2.3.1 La porosité, la microrugosité et la hauteur moyenne

Ces trois notions sont reliées de près. C'est pourquoi leur calcul se fait en parallèle. Pour procéder à cette étape de la caractérisation, le domaine est séparé en plans dans la direction des z , soit la hauteur. Ensuite, on calcule la surface occupée par les particules pour chacun des plans. Sa porosité est calculée à l'aide de l'expression qui suit :

$$\Phi_{plan} = 1 - \frac{\sum surface_{particule}}{surface_{plan}} . \quad (2.30)$$

Pour calculer la surface occupée par une particule, on utilise un algorithme qui sera détaillé dans les sections qui suivent et qui a été développé par Desaulniers [23].

2.3.1.1 Représentation vectorielle d'un ellipsoïde

Tout d'abord, un ellipsoïde est représenté vectoriellement par :

$$(x - x_0)^T A^{-1} (x - x_0) = 1 , \quad (2.31)$$

où x_0 est le centre de masse de l'ellipsoïde et A , la matrice caractérisant ses demi-axes et les angles de rotation. Cette dernière est obtenue en utilisant l'identité qui suit :

$$A = S(\theta_A) \hat{A} S^T(\theta_A) \text{ et } \hat{A} = \begin{bmatrix} R_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & R_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & R_3^2 \end{bmatrix} . \quad (2.32 \text{ a, b})$$

Dans ce cas, les R_i représentent les demi-axes et la matrice $S(\theta_A)$, la matrice de rotation. Celle-ci est composée d'une multiplication de trois matrices, dont la séquence dépend de l'ordre de la rotation. Elles sont exprimées par [24] :

$$R_x(\alpha) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}, \quad (2.33)$$

$$R_y(\beta) = \begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

$$R_z(\gamma) = \begin{bmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.35)$$

où α est l'angle de rotation par rapport à l'axe des x, β par rapport à l'axe des y et γ par rapport à l'axe des z.

2.3.1.2 Détermination de l'intersection de l'ellipsoïde avec un plan

La matrice A représentant l'ellipsoïde sert par la suite à déterminer l'équation de l'ellipse qui résulte de l'intersection de cette ellipsoïde avec le plan de cote z_p . Une ellipse a pour équation générale :

$$Ax^2 + By^2 + Cxy + Dx + Ey + F = 0. \quad (2.36)$$

On peut montrer que les coefficients A , B , C , D , E et F sont donnés par :

$$A = \frac{|A_{22,33}|}{|A|}, \quad (2.37)$$

$$B = \frac{|A_{33,11}|}{|A|}, \quad (2.38)$$

$$C = \frac{|A_{23,31}|}{|A|} + \frac{|A_{32,13}|}{|A|}, \quad (2.39)$$

$$D = -2 \frac{|A_{22,33}|}{|A|} x_0 - \left(\frac{|A_{23,31}|}{|A|} + \frac{|A_{32,13}|}{|A|} \right) y_0 + \left(\frac{|A_{21,32}|}{|A|} + \frac{|A_{12,23}|}{|A|} \right) (z_p - z_0), \quad (2.40)$$

$$E = - \left(\frac{|A_{23,31}|}{|A|} + \frac{|A_{32,13}|}{|A|} \right) x_0 - 2 \frac{|A_{33,11}|}{|A|} y_0 + \left(\frac{|A_{31,12}|}{|A|} + \frac{|A_{12,23}|}{|A|} \right) (z_p - z_0) \text{ et} \quad (2.41)$$

$$F = \frac{|A_{22,33}|}{|A|} x_0^2 + \left(\frac{|A_{23,31}|}{|A|} + \frac{|A_{32,13}|}{|A|} \right) x_0 y_0 - \left(\frac{|A_{21,32}|}{|A|} + \frac{|A_{12,23}|}{|A|} \right) (z_p - z_0) x_0 + \frac{|A_{33,11}|}{|A|} y_0^2 - \left(\frac{|A_{31,12}|}{|A|} + \frac{|A_{13,21}|}{|A|} \right) (z_p - z_0) y_0 + \frac{|A_{11,22}|}{|A|} (z_p - z_0)^2 - 1 \quad (2.42)$$

Les matrices $A_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ sont des sous-matrices de la matrice A. Elles sont définies de la façon suivante :

$$A_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \begin{vmatrix} a_{\alpha\beta} & a_{\alpha\delta} \\ a_{\gamma\beta} & a_{\gamma\delta} \end{vmatrix}, \quad (2.43)$$

où les indices α, β, γ , et δ correspondent à ceux de la matrice A.

On doit par la suite déterminer si le plan coupe l'ellipsoïde. Pour ce faire, on utilise les paramètres Δ et I, qui utilisent les coefficients de l'ellipse définie plus haut. Ils sont exprimés par :

$$\Delta = \begin{vmatrix} A & \frac{1}{2}C & \frac{1}{2}D \\ \frac{1}{2}C & B & \frac{1}{2}E \\ \frac{1}{2}D & \frac{1}{2}E & F \end{vmatrix} \quad (2.44)$$

$$I = A + B \quad (2.45)$$

Par la suite, on évalue si l'ellipsoïde est coupé par le plan en utilisant les critères de décision suivants :

Tableau 2.1 – Critères de décision pour déterminer si l'ellipsoïde est coupé par le plan

Δ	Δ/I	Y a-t-il intersection ?
$\neq 0$	> 0	Oui
$\neq 0$	< 0	Non
0	0	Tangent

Si l'ellipsoïde est coupé par le plan, on procède au calcul de la surface de l'ellipse d'intersection. De façon générale, la surface d'une ellipse est donnée par :

$$S = \pi ab, \quad (2.46)$$

où a et b sont ses demi-axes. Dans le cas où $C \neq 0$, les axes x et y ne sont pas les axes de symétrie. On ne peut donc pas obtenir a et b directement. C'est pourquoi la prochaine étape consiste en la transformation des axes x et y en axes x' et y' , de telle sorte que $C = 0$. La nouvelle équation de l'ellipse devient :

$$A'x'^2 + B'y'^2 + D'x' + E'y' + F' = 0 \quad (2.47)$$

Pour ce faire, on utilise la transformation suivante : $x \rightarrow Gx' + y'$ et $y \rightarrow Gy' - x'$. On peut alors montrer que :

$$G = \sqrt{\left[\left(\frac{B-A}{C}\right)^2 + 1\right]} + \left(\frac{B-A}{C}\right) \quad (2.48)$$

et que :

$$A' = AG^2 + B - CG, \quad (2.49)$$

$$B' = A + BG^2 + CG, \quad (2.50)$$

$$C' = 0, \quad (2.51)$$

$$D' = DG - E, \quad (2.52)$$

$$E' = D + EG, \quad (2.53)$$

$$F' = F. \quad (2.54)$$

On veut réécrire l'équation de l'ellipse sous la forme suivante :

$$\left(\frac{x' - x'_0}{a'}\right)^2 + \left(\frac{y' - y'_0}{b'}\right)^2 = 1, \quad (2.55)$$

où (x'_0, y'_0) est le centre de masse de cette ellipse. On peut montrer qu'on y arrive en posant :

$$\left(\frac{x' + \frac{D'}{2A'}}{\sqrt{\frac{H}{A'}}}\right)^2 + \left(\frac{y' + \frac{E'}{2B'}}{\sqrt{\frac{H}{B'}}}\right)^2 = 1, \quad (2.56)$$

où $H = \frac{D'^2}{4A'} + \frac{E'^2}{4B'} - F'$. On voit donc que $a' = \sqrt{\frac{H}{A'}}$, $b' = \sqrt{\frac{H}{B'}}$, $x'_0 = -\frac{D'}{2A'}$ et $y'_0 = -\frac{E'}{2B'}$.

Puisque cette transformation ne préserve pas la surface, on doit l'appliquer également au centre de masse. On doit de plus modifier la longueur des demi-axes. Ainsi, le centre de masse devient :

$$x_0 = Gx'_0 + y'_0 = -G \frac{D'}{2A'} - \frac{E'}{2B'}, \quad (2.57)$$

$$y_0 = Gy'_0 - x'_0 = -G \frac{E'}{2B'} + \frac{D'}{2A'}. \quad (2.58)$$

En appliquant la même transformation aux couples de points $(x_0 + a, y_0)$; $(x'_0 + a', y'_0)$ et $(x_0, y_0 + b)$; $(x'_0, y'_0 + b')$ et en calculant les distances par rapport au centre de masse, on peut facilement démontrer que :

$$a = \sqrt{(Ga')^2 + (-a')^2} = \sqrt{(G^2 + 1) \frac{H}{A'}}, \quad (2.59)$$

$$b = \sqrt{b'^2 + (Gb')^2} = \sqrt{(G^2 + 1) \frac{H}{B'}}. \quad (2.60)$$

On peut par la suite calculer la surface de l'ellipse en utilisant l'équation mentionnée plus haut.

$$S = \pi ab = \frac{\pi(G^2 + 1)H}{\sqrt{A'B'}}. \quad (2.61)$$

2.3.1.3 Calcul de la porosité, de la hauteur moyenne et de la microrugosité du gâteau de pigments

Une fois que la porosité de chacun des plans a été déterminée à l'aide de la méthode décrite précédemment, on peut calculer la porosité, la hauteur moyenne et la microrugosité de l'entassement de particules. Pour ce faire, le domaine x-y d'un plan donné du gâteau de pigments est divisé en cellules carrées. Leur taille est un paramètre qu'il est possible de faire varier. La microrugosité dépend de la taille des cellules.

La caractérisation s'effectue en faisant un balayage des plans x-y à partir de $z = 0$. Pour chacun des plans, on vérifie si chacune des cellules est occupée par une particule. Si tel est le cas, on note la hauteur du plan. Ainsi, à la fin, seule la hauteur maximale occupée par une particule est gardée en mémoire pour chacune des cellules. Il devient alors facile de calculer la hauteur moyenne du gâteau de pigments :

$$h_{\text{gâteau}} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m h_{i,j}}{n * m} . \quad (2.62)$$

La microrugosité de l'entassement est définie comme étant l'écart type de la hauteur maximale correspondant à chacun des cellules :

$$\text{rugosité} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m (h_{\text{gâteau}} - h_{i,j})^2}{(n * m - 1)^2}} . \quad (2.63)$$

La porosité moyenne, pour sa part, est définie comme étant la moyenne des porosités par plan pour tous les plans jusqu'à celui dont la position correspond à la hauteur moyenne :

$$\Phi_{\text{gâteau}} = \frac{\sum_{z=1}^p \Phi_z}{p}, \quad (2.64)$$

où p est l'indice du plan situé à la hauteur moyenne.

2.3.2 L'orientation des particules ellipsoïdales

Les particules ellipsoïdales n'étant pas isomorphes, leur orientation devient un paramètre important à déterminer. On peut par ailleurs distinguer l'orientation des particules par rapport au substrat et l'orientation des particules entre elles.

En deux dimensions, on peut définir le facteur de forme α d'une ellipse comme étant :

$$\alpha \equiv \frac{\text{longueur du grand axe}}{\text{longueur du petit axe}} \quad (2.65)$$

Par ailleurs, l'orientation des particules peut être calculé à l'aide de la relation suivante [25] :

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos(2\theta_i), \quad (2.66)$$

où θ_i est l'angle entre le grand axe et l'axe des x pour la particule i . Si la distribution des angles est uniforme, nous aurons alors $Q = 0$ tandis que si toutes les particules sont parallèles au substrat, nous aurons $Q = 1$.

La situation tridimensionnelle, quant à elle, requiert un niveau de distinction plus élevé. En effet, on peut classer les ellipsoïdes selon qu'il y ait un ou deux grands axes. Nous désignons les ellipsoïdes de la première catégorie, qui sont plutôt allongés, comme des « aiguilles ». Ceux de la deuxième classe, qui sont aplatis, sont appelés des « plaquettes ». L'orientation par rapport au substrat de ces deux types de particule ne sera pas calculée de la même façon. Ainsi, pour le cas des ellipsoïdes allongés, on a [26-27] :

$$Q_a = -\frac{3}{2} \left\{ \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos[2 \cos^{-1}(\hat{n} \cdot \hat{g})] \right) + \frac{1}{3} \right\}, \quad (2.67)$$

alors que cette valeur se calcule de la façon suivante dans le cas des ellipsoïdes aplatis :

$$Q_p = \frac{3}{4} \left\{ \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos[2 \cos^{-1}(\hat{n} \cdot \hat{g})] \right) + \frac{1}{3} \right\}. \quad (2.68)$$

Dans les deux cas, $\hat{g}$ est le vecteur unitaire perpendiculaire au substrat et $\hat{n}$, le vecteur axial de la particule i . Par ailleurs, l'orientation des particules entre elles peut être calculée à l'aide de la relation suivante :

$$M = \frac{3}{4} \left\{ \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N (\cos[2 \cos^{-1}(\hat{n}_i \cdot \hat{n}_j)]) + \frac{1}{3} \right\}. \quad (2.69)$$

Ainsi, pour $M = 0$, l'orientation des particules est distribuée uniformément, tandis que si $M = 1$, les particules ont toutes la même orientation.

Bien entendu, il existe également des ellipsoïdes ayant trois demi-axes de longueurs différentes. Nous nous concentrerons cependant sur ceux ayant au moins deux demi-

axes de même longueur, puisque ce sont surtout ceux qu'on utilise dans la modélisation de la déposition des pigments.

2.3.3 La segmentation de l'espace poreux

La dernière tâche consiste en la segmentation de l'espace poreux en plusieurs pores. Celle-ci nous donne des informations sur la taille moyenne des pores, la distribution de la taille des pores, la distribution de la taille des cols, la distribution de la surface interne des pores, la distribution du ratio taille des cols / surface interne ainsi que sur la distribution de la connectivité des pores (ou encore, leur nombre de voisins).

Pour effectuer cette tâche, plusieurs méthodes ont été développées [28]. Nous allons en exposer quelques unes, avec leurs avantages et leurs inconvénients.

Nous pouvons diviser les méthodes de segmentation en deux familles, soient les méthodes géométriques (ou analytiques) et les méthodes d'analyse d'image. Celles de la première catégorie s'appliquent facilement à des géométries simples comme des entassements de sphères tandis que celles de la deuxième classe sont beaucoup plus générales.

2.3.3.1 Les méthodes géométriques

La méthode des tétraèdres

Cette méthode, proposée par Eksi en 1995 [8], segmente le gâteau de pigments en pores tétraédriques. Les sommets de chacun des tétraèdres correspondent aux centres de quatre des particules. Le volume de chaque tétraèdre est calculé, de même que celui des particules à l'intérieur du tétraèdre. Le volume du pore est finalement obtenu en soustrayant le volume des particules du volume de la pyramide.

Le domaine est balayé en entier. Les particules sont étudiées une à une. Les trois plus proches voisins de chacune des sphères sont déterminés. Nous avons alors une configuration comme celle-ci :

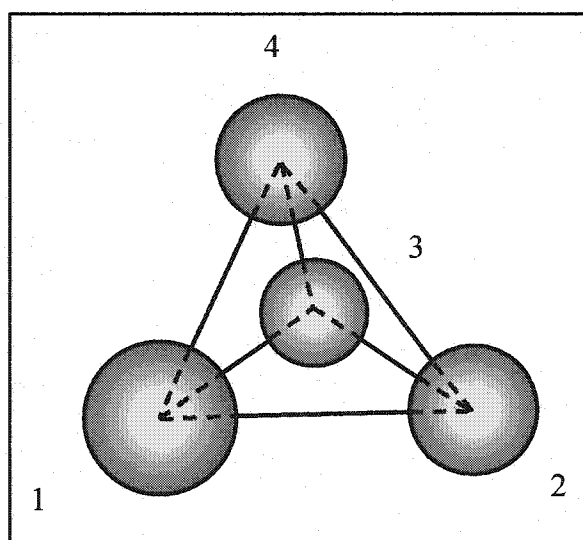


Figure 2.12 – Tétraèdre formé par quatre particules

On détermine tout d'abord le volume V du tétraèdre formé par les quatre sphères. On estime par la suite le volume de chacune des sphères à l'intérieur du tétraèdre (V_i , $i = 1, 2, 3, 4$) en considérant qu'elles forment un tétraèdre. On peut finalement évaluer le volume du pore, c'est-à-dire : $V_p = V - V_1 - V_2 - V_3 - V_4$.

Cette méthode est simple et exige peu de calculs. Elle peut être utilisée aussi bien pour des distributions monodispersées, bidispersées ou polydispersées. Par contre, elle entraîne une erreur assez importante sur le volume du pore, puisqu'elle néglige la courbure de la sphère à l'intérieur du tétraèdre. Ainsi, le volume des pores est surévalué.

Par ailleurs, les pores de très grande taille sont scindés en plusieurs pores de plus petite taille. C'est pourquoi elle n'est pas recommandée pour les entassements de particules obtenus par des modèles qui favorisent la formation de ponts. De plus, vu la géométrie utilisée, la connectivité de chacun des pores est fixée à quatre, puisque la pyramide a quatre faces. Finalement, elle est difficilement applicable pour un empilement d'ellipsoïdes.

La méthode des polyèdres de Voronoi

La méthode des polyèdres de Voronoi a été utilisée par Sastry *et al.* [29] pour caractériser des entassement de particules sphériques. Elle segmente l'espace poreux en cavités plutôt qu'en pores. Une cavité est une partie de l'espace vide qui est indépendante des autres parties de l'espace vide.

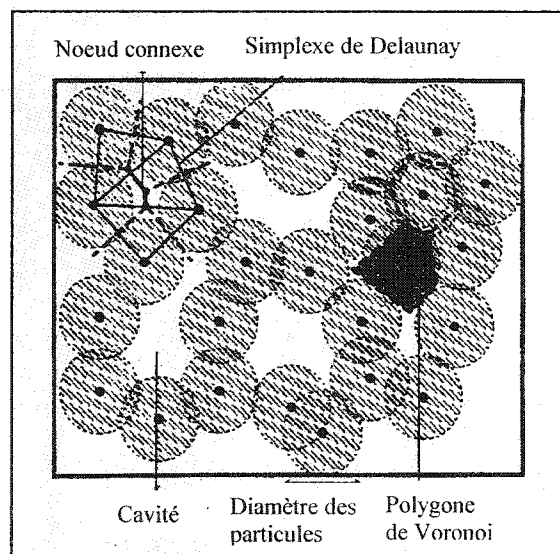


Figure 2.13 – Polygone de Voronoi et simplexe de Delaunay

Tout d'abord, l'espace poreux est séparé en régions à l'aide des méthodes de Voronoi [29] et de Delaunay [21]. La segmentation de Voronoi se fait en déterminant des régions autour des sphères telles que :

$$VP_i = \{x \mid d(x, x_i) < d(x, x_j), \forall j \neq i\} \quad (2.70)$$

Autrement dit, le polyèdre de Voronoi d'une particule est composé de tous les points de l'espace qui sont plus près de la particule en question que des autres. En trois dimensions, on appelle cet ensemble le polygone de Voronoi. Par ailleurs, on définit les arêtes de Voronoi comme étant la rencontre de trois faces des polygones et les sommets, la rencontre de quatre.

La triangulation de Delaunay, quant à elle, sépare l'espace poreux en tétraèdres, les sommets étant les centres des sphères. Ces notions sont illustrées pour un cas bidimensionnel à la figure 2.13.

L'algorithme de segmentation peut être séparé en trois grandes étapes :

1. **L'identification des cavités.** Tout d'abord, les arêtes et les sommets de Voronoi appartenant à la phase vide sont déterminés en générant les polyèdres de Voronoi et en appliquant les règles mentionnées plus haut. Tous les sommets qui sont reliés font partie d'une même cavité.
2. **L'identification du polyèdre qui englobe la cavité.** Le polyèdre qui englobe la cavité est déterminé à partir des sommets de Voronoi et des simplexes de Delaunay. En effet, lorsqu'un des sommets de Voronoi est à l'intérieur du simplexe de Delaunay, celui-ci est ajouté au polyèdre.

3. **La détermination du volume la cavité.** Finalement, on peut calculer le volume de la cavité à l'aide du polyèdre qui a été déterminé à l'étape précédente. Il s'agit tout simplement du volume de tous les simplexes de Delaunay qui le composent moins le volume des particules à l'intérieur de ces simplexes.

La méthode des polyèdres de Voronoi s'applique aussi bien à une distribution de taille de particules monodispersée, bidispersée ou polydispersée. Par contre, elle est difficilement applicable à un entassement d'ellipsoïdes. De plus, pour être applicable au problème qui nous intéresse, cette méthode devrait être modifiée, puisqu'elle ne détermine que le volume des cavités du réseau de pores.

2.3.3.2 Les méthodes d'analyse d'image

Les méthodes d'analyse d'image sont amplement utilisées dans l'étude des milieux poreux. Elles ont surtout été employées dans le cadre de la géologie. Elles ont également eu droit à leurs lettres de noblesse à quelques reprises dans des travaux de recherche sur les pâtes et papiers. Par exemple, Toivakka et Nyfors [28] s'en sont servis pour calculer la distribution de la taille des pores d'entassements de particules obtenus par simulation.

Les méthodes d'analyse d'image permettent une segmentation précise de l'espace poreux. Par contre, de nombreuses opérations mathématiques sont nécessaires, ce qui les rend laborieuses.

Trois de ces méthodes seront ici exposées, c'est-à-dire la squelettisation, la segmentation par bassin versant et lignes d'eau et l'érosion / dilatation. Les deux dernières méthodes font partie de la même famille et elles requièrent toutes deux l'érosion.

La première étape : la numérisation de l'entassement de particules

Bien que les trois méthodes aient des fonctionnements différents, elles nécessitent toutes les trois une numérisation de l'entassement de particules. Pour ce faire, on le divise en petites cellules cubiques, appelées « voxel », qui sont comme des pixels, mais en trois dimensions. La taille de celles-ci dépend de la résolution choisie.

Ensuite, on détermine si le voxel fait partie de la phase solide ou de l'espace poreux. On lui attribue une valeur de 0 ou 1, selon le cas. Pour effectuer cette étape, on vérifie tout simplement si le centre de masse du voxel fait partie d'une particule. On peut par la suite procéder à la segmentation.

La segmentation par la méthode d'érosion / dilatation

L'érosion et la dilatation, éléments de base de la morphologie mathématique, font appel à la théorie des ensembles [30]. C'est pourquoi nous allons faire un bref rappel de ses rudiments. Pour de plus amples informations, le lecteur pourra consulter les ouvrages de Serra [31, 32] et de Gonzalez et Woods [33].

Supposons un ensemble $E = \{x \in \mathcal{R}^n\}$, n étant le nombre de dimensions de l'espace. Nous pouvons définir son **complémentaire** comme étant l'ensemble des éléments ne faisant pas partie de l'ensemble E , soit : $E^c = \{y \in \mathcal{R}^n | y \notin E\}$.

Chaque ensemble possède un ensemble qui lui est **symétrique** par rapport à l'origine. On le définit par la relation suivante : $\hat{E} = \{-x, \forall x \in E\}$.

Un ensemble peut être **translaté** par un vecteur $\vec{t}$, c'est-à-dire qu'il est déplacé dans l'espace par une distance et dans une direction qui correspondent au vecteur de translation $\vec{t}$. Autrement dit, nous avons : $E_t = \{x + \vec{t}, \forall x \in E\}$.

Nous pouvons également définir un ensemble **homothétique**. En effet, tous les éléments d'un ensemble peuvent être multipliés par un scalaire. Ainsi, pour l'homothétie γ , nous calculons : $E^\gamma = \{x^\gamma, x \in E | x^\gamma = \gamma x\}$.

Finalement, nous pouvons définir l'addition de Minkowski. Supposons l'ensemble E et un nouvel ensemble $S = \{s \in \mathbb{R}^n\}$, que nous appellerons **ensemble structurant**. L'addition de Minkowski se définit par :

$$E \oplus S = \{x + s, \forall x \in E, s \in S\}. \quad (2.71)$$

La dilatation est l'addition de Minkowski du translaté sur E du symétrique de S par rapport à l'origine, ou encore [32] :

$$Dil_S(E) = \{x \in \mathbb{R}^n | S_x \cap E \neq \emptyset\}, \quad (2.72)$$

Autrement dit, l'ensemble structurant S est translaté le long de l'ensemble E , à l'extérieur de ce dernier. On ajoute alors la portion qui est tracée par l'origine de l'ensemble structurant. Nous pouvons illustrer une telle opération ainsi :

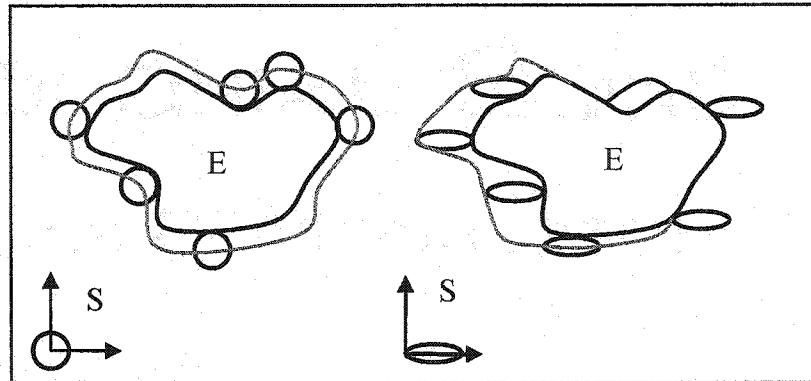


Figure 2.14 – Dilatation

On peut par la suite définir l'érosion comme étant :

$$Erd_s(E) = \{x | S_x \subseteq E\} = [Dil_s(E^c)]^c, \quad (2.73)$$

Autrement dit, on enlève à l'ensemble E la portion qui est à l'extérieur de la ligne tracée par l'origine de l'ensemble structurant lorsque ce dernier est translaté sur le contour de l'ensemble E, vers l'intérieur de celui-ci. Ceci est équivalent à prendre le complément de la dilatation du complément de l'ensemble E. Encore une fois, nous pouvons illustrer une telle opération :

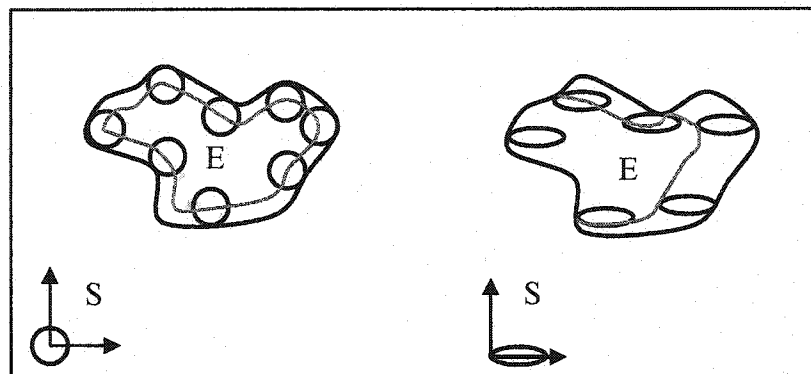


Figure 2.15 – Érosion

La dilatation ou l'érosion peuvent se faire de façon itérative. Par exemple, supposons que nous effectuons n itérations de la dilatation de l'ensemble E par l'ensemble S . Nous aurions alors :

$$Dil_S^n(E) = \left\{ x \left| \overbrace{\left((\hat{S})_x \cap ((\hat{S})_x \cap (\dots \cap (\hat{S})_x)) \right)}^n \cap E \neq \Phi \right. \right\}. \quad (2.74)$$

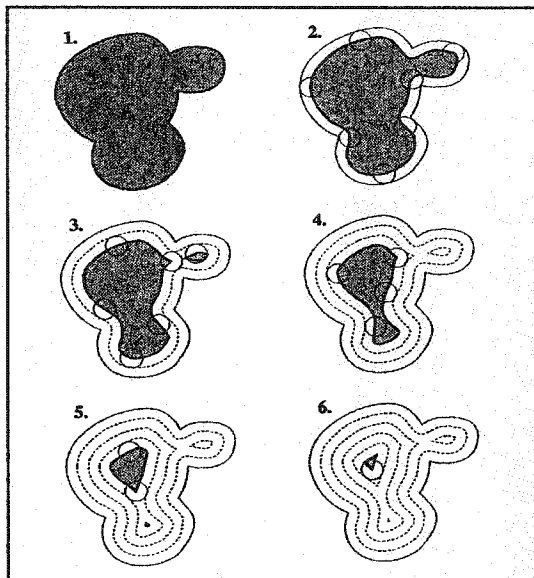


Figure 2.16 – Érosion itérative pour obtenir les marqueurs [34]

La notion d'érosion itérative est illustrée sur la figure 2.16. Soit l'objet initial en 1. Les étapes 2 et 3 montrent les premières itérations de l'érosion. Aux étapes 4 à 6, l'érosion se poursuit dans les régions où c'est encore possible, c'est-à-dire là où l'objet est encore existant.

Dans le cas qui nous intéresse, le but de l'érosion est de déterminer les **marqueurs** [34]. Ces derniers servent à identifier les centres des pores d'un entassement de particules. Ils sont définis comme étant

l'**érosion ultime** de l'ensemble représenté par les voxels de l'espace poreux. L'érosion ultime est la dernière érosion qu'on peut effectuer avant d'obtenir l'ensemble vide.

Nous pouvons exprimer l'érosion ultime de façon plus formelle. Tout d'abord, définissons l'opérateur $\rho_A(B)$ pour les ensembles A et B tels que $B \subseteq A$. L'opérateur $\rho_A(B)$ détermine l'union des éléments de A qui sont reliés et dont l'intersection avec l'ensemble B n'est pas vide. Nous pouvons ainsi définir l'érosion ultime de cette façon :

$$UltErd_S(E) = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \left[(Erd_S^n(E)) \setminus \rho_{Erd_S^n(E)}(Erd_S^{n-1}(E)) \right]. \quad (2.75)$$

L'érosion ultime d'un ensemble est illustrée à la figure 2.17.

Comme nous pouvons le voir dans la figure 2.17, le niveau d'érosion d'une partie de l'ensemble est directement relié à sa distance par rapport aux limites de l'objet. Nous pouvons par conséquent nous servir de la fonction de distance pour effectuer l'érosion.

Considérons encore l'ensemble E avec l'ensemble structurant S . Maintenant, supposons qu'ils soient composés de voxels v . La fonction de distance $dist_E(v)$ peut être exprimée de façon formelle :

$$\forall v \in E, dist_E(v) = \min \{ n \in \mathbb{N} \mid v \notin Erd_S^n(E) \}. \quad (2.76)$$

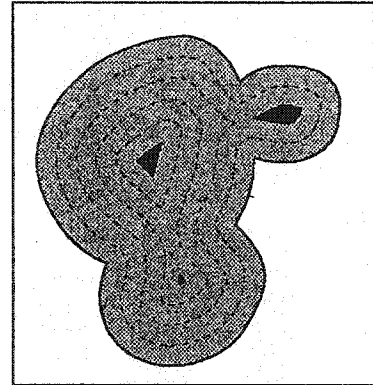


Figure 2.17 – Érosion ultime
[34]

Comme nous pouvons le voir sur la figure 2.17, les marqueurs correspondent aux maximums de la fonction de distance. Il faut par ailleurs distinguer les maximums globaux des maximums locaux. Dans le cas d'un **maximum global** R faisant partie d'une région M et ayant pour valeur h , tous les voxels dans la région M ont une valeur qui est inférieure ou égale à h . Dans le cas d'un **maximum local** L , seuls ses voisins ont une valeur qui lui est inférieure ou égale. Un maximum local est inclus dans la région M d'un maximum global. Les marqueurs sont définis comme étant l'ensemble des maximums globaux.

Une fois que tous les marqueurs ont été extraits, on peut passer à la deuxième étape, c'est-à-dire à la segmentation proprement dite. Encore une fois, deux options s'offrent à nous, soient la dilatation ou la séparation par bassins versants et lignes d'eau.

La dilatation

Étant donné la nature du problème, le milieu à l'étude n'est pas euclidien. En effet, la plus courte distance entre deux points à l'intérieur du milieu n'est pas nécessairement la longueur de la ligne droite qui les relie. C'est pourquoi nous ferons appel à la notion de distance et d'opérations morphologiques géodésiques.

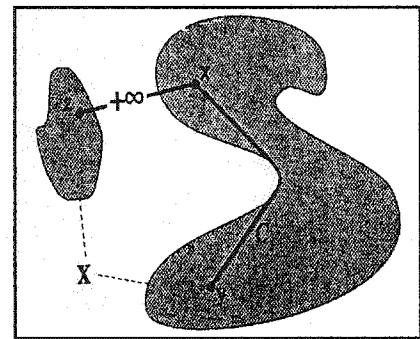


Figure 2.18 – Distance géodésique entre deux points [34]

Tout d'abord, la **distance géodésique**, tel qu'illustré à la figure 2.18, est la longueur du plus court chemin qui relie deux points à l'intérieur d'un objet, si ce chemin existe. Par exemple, pour deux points x et y à l'intérieur d'un objet X , nous pouvons exprimer la distance géodésique par :

$$d_X(x, y) = \min \{ l(C_{x,y}) \mid C_{x,y} \text{ est un chemin entre } x \text{ et } y \text{ inclus dans } X \}. \quad (2.77)$$

Si le chemin n'existe pas, on alors que $d_X(x, y) = +\infty$.

La notion de distance géodésique s'applique également à la dilatation. Soit le cas illustré sur la figure 2.19. Nous avons les ensembles X et Y , tels que $Y \subset X$. La dilatation s'effectue à l'aide d'une boule de rayon ϵ . La dilatation géodésique peut s'exprimer par :

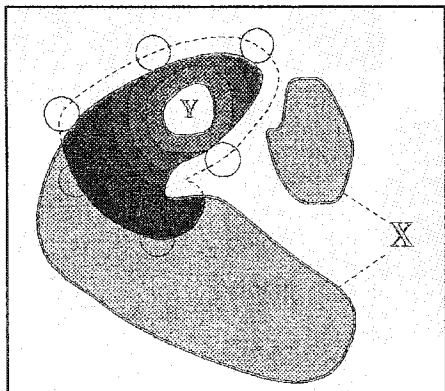


Figure 2.19 – Dilatation géodésique [34]

$$Dil_{\varepsilon, X}(Y) = \{x \in X \mid d_X(x, Y) \leq \varepsilon\}. \quad (2.78)$$

Il est possible de faire la segmentation des pores à l'aide de l'algorithme de dilatation. Pour ce faire, on utilise n itérations de la dilatation géodésique en partant des marqueurs, n étant le nombre d'itérations nécessaire pour attribuer chacun des voxels à l'un ou l'autre des pores.

Un problème se pose cependant si la dilatation débute en même temps pour tous les marqueurs, indépendamment de leur niveau d'érosion. Comme on peut le voir sur la figure 2.20, la limite ainsi déterminée se trouve à mi-chemin entre les deux marqueurs. Par conséquent, la segmentation est incorrecte. C'est pourquoi la dilatation doit d'abord débiter par les marqueurs ayant les plus hauts niveaux d'érosion. La segmentation obtenue est finalement correcte, comme l'illustre la figure 2.21.

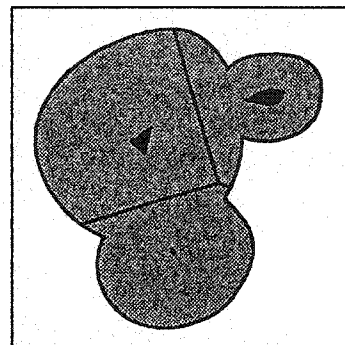


Figure 2.20 – Mauvaise segmentation [34]

La segmentation par bassins versants et lignes d'eau

La segmentation peut également s'obtenir par le biais de l'algorithme des bassins versants et des lignes d'eau. Cette façon de faire est plus intuitive que la première. Elle fait appel à la fonction de distance.

Soit la fonction $-dist_E$, la négative de la fonction de distance, et un minimum global m . On peut définir le bassin versant $B(m)$ associé à un minimum global m comme étant

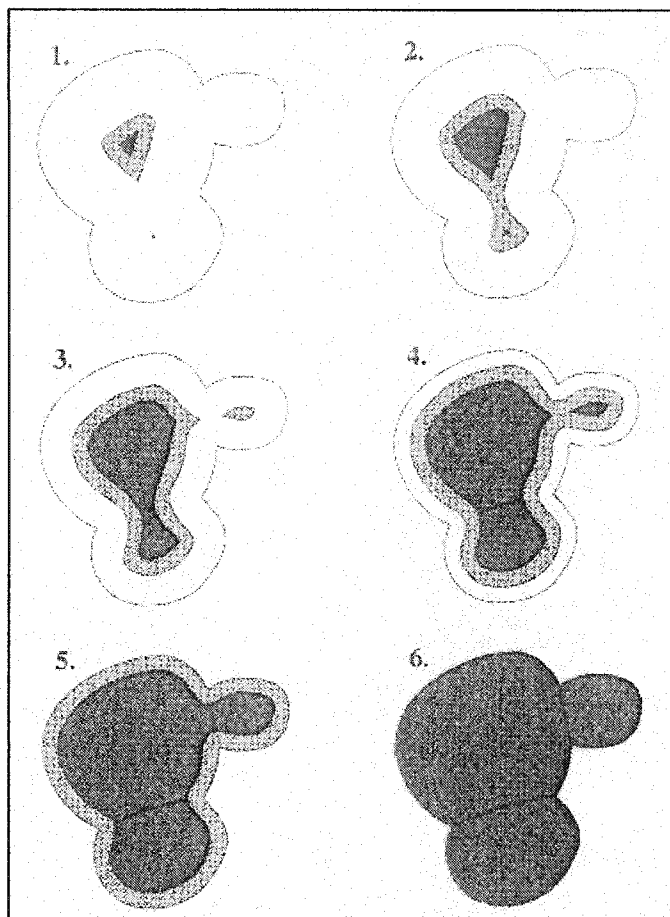


Figure 2.21 – Segmentation correcte [34]

l'ensemble des points p tels qu'une goutte d'eau tombant de p atteindra m lors de sa chute. Par ailleurs, une ligne d'eau est la ligne qui sépare deux bassins versants.

Ces lignes sont obtenues à l'aide d'une simulation d'immersion [35] qui consiste à percer un trou au bas de chacun des bassins et à immerger progressivement la surface. Les minimums de plus basse altitude se remplissent les premiers. Quand l'eau des différents bassins versants fusionne, on construit un barrage.

À la fin de l'immersion, les

bassins versants sont complètement séparés par des barrages. Ces derniers représentent les lignes d'eau. Ces notions sont illustrées à la figure 2.22.

En terme d'analyse d'image, la surface immergée correspond au domaine de l'image D_I . Nous pouvons définir le seuil de l'image I au niveau h comme étant :

$$S_h(I) = \{v \in D_I, I(v) \leq h\} . \quad (2.79)$$

Par ailleurs, pour un bassin-versant associé à un minimum global m , soit $B(m)$, nous pouvons définir un sous-ensemble $B_h(M)$ contenant les points ayant une altitude inférieure ou égale à h , c'est-à-dire :

$$B_h(M) = \{v \in B(M), I(v) \leq h\} = B(M) \cap S_h(I). \quad (2.80)$$

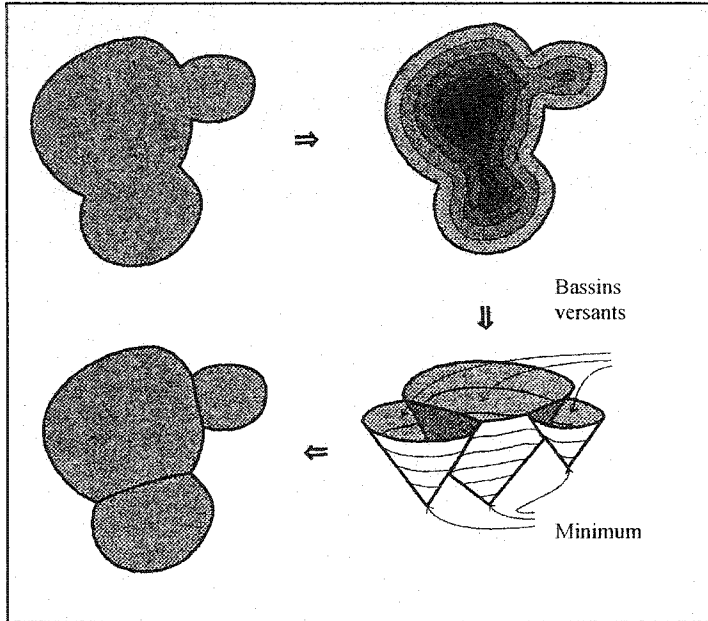


Figure 2.22 – Bassins versants et barrages [34]

Pour commencer l'immersion, on doit d'abord déterminer l'altitude minimale, c'est-à-dire le point le plus éloigné de la phase solide. On identifie ensuite l'ensemble $S_{h_{\min}}(I)$, qui est composé des points de l'image I ayant l'altitude minimale. Nous appellerons cet ensemble $X_{h_{\min}}$. Considérons Y , un sous-ensemble connexe de $S_{h_{\min}+1}(I)$. Il y a alors trois

possibilités pour $Y \cap X_{h_{\min}}$. Elles sont illustrées sur la figure 2.23.

Premier cas: $Y \cap X_{h_{\min}} = \Phi$.

Autrement dit, les voxels dans l'entourage de Y ne font pas partie de l'ensemble $X_{h_{\min}}$, puisqu'ils ont tous une valeur

plus élevée ou égale à $h_{\min} + 1$. Y est par conséquent un nouveau minimum. Le bassin versant correspondant peut donc être percé et inondé.

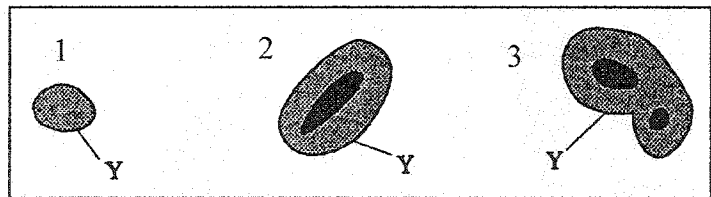


Figure 2.23 – Relations possible entre Y et $Y \cap X_{h_{\min}}$ [34]

Deuxième cas : $Y \cap X_{h_{\min}} \neq \Phi$ et est connexe. On voit sur la figure 2.23 que le sous-ensemble Y contient un des minimums globaux faisant partie de $X_{h_{\min}}$, c'est-à-dire

$Y \cap X_{h_{\min}}$ (en noir). On peut donc dire que l'ensemble Y correspond au bassin versant de $Y \cap X_{h_{\min}}$, ou encore $Y = B_{h_{\min}+1}(Y \cap X_{h_{\min}})$.

Troisième cas : $Y \cap X_{h_{\min}} \neq \Phi$ et n'est pas connexe. L'ensemble Y contient donc deux marqueurs différents. Nous appellerons ces marqueurs $C_1, C_2, \dots, C_n$. Nous attribuons à $B_{h_{\min}+1}(C_i)$ la zone d'influence géodésique de C_i dans Y , ou encore :

$$B_{h_{\min}+1}(C_i) = zi_Y(C_i), \quad (2.81)$$

où la zone d'influence zi d'un marqueur C_i est la zone à l'intérieur d'un objet Y qui est plus près de ce marqueur que de tout autre.

On obtient finalement les bassins versants et les barrages en appliquant l'algorithme récursif suivant :

$$a) X_{h_{\min}} = S_{h_{\min}}(I); \quad (2.82)$$

$$b) \forall h \in [h_{\min}, h_{\max} - 1], X_{h+1} = \min_{h+1} \cup zi_{S_{h+1}(I)}(X_h); \quad (2.83)$$

Les lignes d'eau correspondent aux points de l'image qui n'appartiennent à aucun bassin versant.

Ces méthodes de segmentation par érosion / dilatation ou par bassins versants sont des méthodes simples à implanter et intuitives. Les résultats obtenus sont précis. Par contre, le temps de calcul nécessaire pour obtenir des résultats est important. De plus, la mémoire nécessaire pour obtenir une bonne précision est importante et est une des limitations de ces méthodes.

La segmentation par le squelette

Le squelette morphologique est un graphe connexe qui représente un objet [36]. Pour un entassement de particules, il s'agit d'un diagramme global du réseau de l'espace poreux. C'est par ailleurs une méthode très efficace pour connaître la connexité et la longueur des pores ainsi que les culs-de-sac et les cavités. Les culs-de-sac sont des branches du squelette qui n'aboutissent pas à l'extérieur du réseau poreux. Les cavités sont des boucles de pores qui ne sont pas connectées au reste du réseau.

La détermination d'un squelette fait appel à la notion de boule maximale. Pour un objet O , on dit qu'une boule est maximale lorsqu'aucune boule de plus grande taille ne peut entrer à l'intérieur de l'objet, pour une position donnée. Une boule de rayon r en position x peut être exprimée par :

$$B(x, r) = \{y \in O \mid d_E(x, y) \leq r\}. \quad (2.84)$$

Si $B(x, r)$ est une boule maximale, il n'existe aucune boule $B(x', r')$ incluse dans O telle que $B(x, r) \subset B(x', r')$. Les notions de boule et de boule maximales sont illustrées à la figure 2.24.

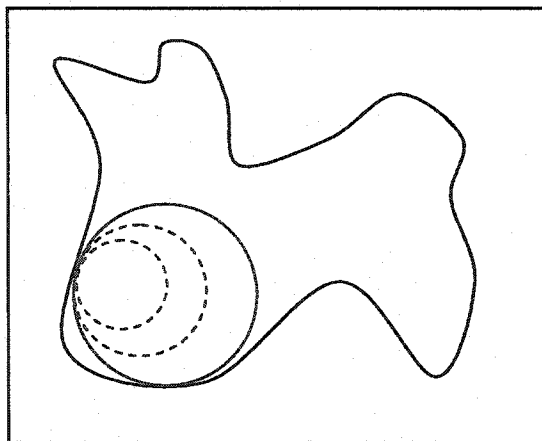


Figure 2.24 – Exemple de boules et de boules maximales

Finalement, le squelette $Sq(O)$ d'un objet est défini comme étant l'ensemble des centres des boules maximales à l'intérieur de l'objet O . Quelques exemples de squelettes sont illustrés à la figure 2.25.

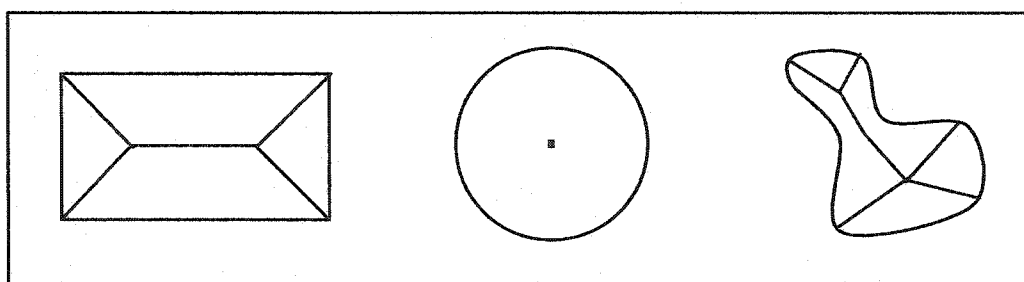


Figure 2.25 – Squelette de trois objets différents

En trois dimensions, il faut faire la distinction entre l'axe médial et la surface médiale [35-36]. La **surface médiale** est l'ensemble des centres des boules maximales inscrites à l'intérieur d'un objet. Par ailleurs, l'**axe médial** est défini comme étant les points de la surface médiale lui étant médial, c'est-à-dire qui passe par son centre. Ces notions sont illustrées à la figure 2.26, où nous avons la surface médiale et l'axe médial formés par des boules sphériques pour un cylindre elliptique :

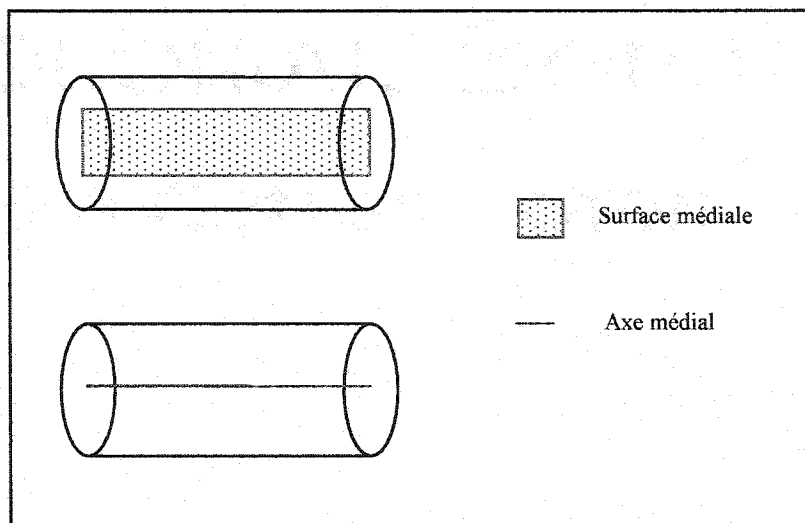


Figure 2.26 – Surface médiale et axe médial pour un cylindre elliptique

Le squelette du réseau poreux est obtenu par un algorithme d'amincissement (thinning) [39]. Une fois qu'il a été obtenu, il doit être nettoyé. En effet, il contient des culs-de-sac et des cavités. Étant donné que ces éléments ne contribuent pas à l'écoulement de fluide à l'intérieur du réseau, ils doivent être éliminés.

Une fois le squelette obtenu, il est possible d'en extraire plusieurs informations. Ses arcs représentent les canaux tandis que ses nœuds correspondent aux centres de pores. Par contre, cette correspondance n'est pas parfaite, puisque certains des nœuds doivent être fusionnés.

Deux nœuds doivent fusionner si la distance entre eux est inférieure à la distance entre le nœud et la phase solide du plus éloigné des deux. Cette opération est itérative, c'est-à-dire que si un nœud a et un nœud b doivent fusionner et que le nœud b et un nœud c doivent fusionner, alors l'ensemble des trois nœuds doit fusionner.

Lorsque l'opération de fusion est terminée, le nouveau squelette correspond exactement au graphe du réseau de l'espace poreux. Ainsi, la connexité devient facile à trouver,

puisque'elle est égale, pour chacun des nœuds (centre de pores), au nombre d'arcs qui en sort. On peut également mesurer la longueur des canaux en déterminant tout simplement celle des arcs.

Il est aussi possible de déterminer la localisation et la taille des cols. Le col étant par définition le goulot d'étranglement du chemin qui lie deux pores, il est situé au niveau d'érosion minimum sur le squelette. Pour déterminer son diamètre, on fait la dilatation du squelette. On obtient ainsi un cylindre dont la taille s'accroît à chaque itération de dilatation. Au fur et à mesure qu'il progresse, le cylindre entre en contact avec la phase solide. À chaque fois que c'est le cas, la dilatation est suspendue et on note le voxel en contact dans une liste L, pour chacun des cols. Cette opération se poursuit jusqu'à ce qu'une boucle de voxels soit formée. Il s'agit des voxels entourant le col.

On peut par la suite déterminer la surface du col. Pour ce faire, on sépare la boucle de voxels en triangles qui se joignent en un seul et même point puis on calcule la surface de chacun d'eux.

Finalement, on peut calculer le volume des pores. On attribue à chacun d'eux les voxels qui sont situés entre les cols formés par les surfaces. Si l'une d'elles traverse le voxel, le volume de celui-ci est alors divisé en deux et séparé entre les deux pores voisins.

La segmentation par le squelette est une méthode qui est précise, bien qu'elle soit moins intuitive que celle des bassins versants. Les avantages et les inconvénients de la squelettisation sont très semblables à ceux évoqués pour les deux autres méthodes d'analyse d'image. En outre, cette méthode est plus sensible au bruit que les deux autres.

2.4 Entassements de particules sphériques

Dans le but de comparer nos résultats numériques, nous avons étudié les entassements de particules sphériques obtenus dans le cadre d'autres travaux. La valeur théorique minimale pour la porosité d'entassements de sphères monodisperses est de 25,95 %. C'est la porosité d'un entassement ordonné de type rhomboédrique cubique à face centrée.

Les entassements expérimentaux ont des porosités variant d'une moyenne entre 35,9 % et 37,5 % pour les entassements serrés à 44 % pour les entassements espacés. Leskinen [40] a obtenu une porosité de 36,5 % en utilisant une technique d'imbibition à l'huile. Cet écart dans les valeurs peut être expliqué par le fait que les diverses manipulations ont été effectuées avec différents matériaux, qui ont diverses caractéristiques physiques.

Alinec et Lepoutre [41] ont étudié le cas d'entassements bidisperses à l'aide de particules de polystyrène. Ils ont effectué leurs expériences en utilisant des particules sphériques de diamètres de 0,1 μm , 0,2 μm et 0,5 μm en faisant varier la composition et le rapport de tailles. À l'aide d'une méthode de porosimétrie, ils ont mesuré la porosité de leurs entassements, qui varie entre 24 % et 33 %.

CHAPITRE 3

3- Méthodologie

Le chapitre précédent nous a permis de voir comment on peut obtenir des entassements de particules et comment on peut calculer ses caractéristiques microscopiques. Nous allons maintenant regarder plus en détail les méthodes particulières que nous allons utiliser.

Premièrement, nous aborderons l'algorithme de caractérisation. Nous verrons comment l'extraction des centres de pores a été implantée et comment nous avons fait pour éliminer les faux centres de pores en appliquant un filtre. Nous développerons par la suite la méthode particulière que nous utiliserons pour effectuer la segmentation de l'espace poreux. Enfin, nous décrirons la manière dont nous allons valider les résultats obtenus par notre algorithme de segmentation.

Ensuite, nous discuterons des méthodes de déposition de pigments que nous allons comparer, c'est-à-dire la méthode des éléments discrets, la méthode de Monte Carlo et la méthode de la descente la plus rapide. Dans le cas de la méthode des éléments discrets, nous développerons le calcul des forces d'interaction entre les particules. Dans le cas des deux autres méthodes, nous verrons la méthodologie utilisée pour l'étude d'entassements bidisperses.

3.1 Élaboration de l'algorithme de caractérisation

Parmi tous les algorithmes décrits dans le chapitre 3, nous avons choisi d'implanter la méthode des bassins versants et des lignes d'eau. Nous avons choisi celle-ci parce qu'elle est intuitive et semble mieux adaptée au problème que nous traitons. En effet, la technique des tétraèdres est difficilement utilisable dans le cas des ellipsoïdes. La méthode des polyèdres de Voronoi, quant à elle, ne fait que déterminer les cavités et ne segmente pas l'espace poreux en pores distincts. Finalement, la méthode du squelette semble particulièrement sensible au bruit.

3.1.1 Les centres de pores

Comme nous l'avons mentionné, les marqueurs que nous cherchons correspondent aux maximums régionaux. Contrairement à Toivakka et Nyfors [28] qui ont utilisé des vecteurs pour déterminer le niveau d'érosion, nous avons exploité cette propriété des centres de pores. En effet, comme notre entassement est constitué de particules sphériques ou ellipsoïdales, il est possible de calculer la distance par rapport à la phase solide de façon exacte.

Il est trivial d'obtenir la distance entre un point et la surface d'une sphère. Par contre, nous devons utiliser une méthode numérique pour calculer la distance par rapport à un ellipsoïde [42].

Considérons un ellipsoïde centré à l'origine et n'ayant subi aucune rotation. Les longueurs de ses trois demi-axes sont de a , b et c respectivement. Nous savons que cet ellipsoïde a pour équation : $\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 = 1$. Nous connaissons par ailleurs les

coordonnées du point (u,v,w) dont nous voulons évaluer la distance par rapport à l'ellipsoïde.

Soit le point de l'ellipsoïde (x,y,z) qui est le plus près du point (u,v,w) . La droite $(x-u, y-v, z-w)$ qui passe par ces deux points est normale à la surface de l'ellipsoïde.

La normale d'un ellipsoïde est donné par son gradient, c'est-à-dire :

$\nabla\left(\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2\right) = (x/a^2, y/b^2, z/c^2)$. La condition d'orthogonalité implique que :

$$u - x = t * x / a^2, \quad (3.1)$$

$$v - y = t * y / b^2, \quad (3.2)$$

$$w - z = t * z / c^2, \quad (3.3)$$

pour un t quelconque, ou encore :

$$x = \frac{a^2 u}{t + a^2}, \quad (3.4)$$

$$y = \frac{b^2 v}{t + b^2}, \quad (3.5)$$

$$z = \frac{c^2 w}{t + c^2}. \quad (3.6)$$

Nous pouvons alors substituer le point inconnu dans l'équation de l'ellipsoïde pour avoir comme seule inconnue t . Ainsi, nous obtenons :

$$\left(\frac{au}{t + a^2}\right)^2 + \left(\frac{bv}{t + b^2}\right)^2 + \left(\frac{cw}{t + c^2}\right)^2 = 1 \quad (3.7)$$

Finalement, nous multiplions par les dénominateurs et nous obtenons une équation de degré 6 que nous résolvons à l'aide de la méthode de Newton. Le critère de convergence utilisé est une erreur relative de 0,1 %. Le polynôme à résoudre est :

$$F(t) = (t+a^2)^2(t+b^2)^2(t+c^2)^2 - a^2u^2(t+b^2)^2(t+c^2)^2 - b^2v^2(t+a^2)^2(t+c^2)^2 - c^2w^2(t+a^2)^2(t+b^2)^2 = 0 \quad (3.8)$$

La plus grande valeur de t ainsi obtenue correspond à la racine recherchée et est la plus courte distance entre le point (u,v,w) et l'ellipsoïde. L'estimé initial pour la méthode de Newton est donné par :

$$t_0 = \max\{a,b,c\}\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \quad (3.9)$$

Dans le cas qui nous intéresse, nous avons un ellipsoïde dont les demi-axes ne sont pas nécessairement parallèles aux axes de référence. Par ailleurs, son centre de masse n'est pas situé à l'origine. Par conséquent, nous devons effectuer une transformation sur l'équation de l'ellipsoïde de façon à ce qu'elle respecte ces conditions.

Une fois que la distance par rapport à la phase solide de tous les voxels a été calculée, nous pouvons déterminer les maximums. Étant donné que plusieurs maximums locaux sont présents, nous devons appliquer un filtre efficace pour en éliminer le plus possible sans éliminer les maximums globaux. Pour ce faire, nous explorons une région sphérique autour du centre de pore à vérifier. Si on retrouve à l'intérieur de la région un voxel dont la valeur d'érosion est supérieure à celle du marqueur que nous voulons valider, ce dernier est éliminé.

La taille de la région explorée a été déterminée en validant les résultats sur des entassements réguliers connus, qui sont décrits plus loin. De plus, une analyse de sensibilité sur le nombre de centres de pore en fonction de la taille de la région et une

validation visuelle de la forme des pores obtenus ont été effectuées sur un entassement aléatoire. La région explorée a un rayon de deux voxels si la distance du centre de pore par rapport à la phase solide est inférieure ou égale à deux fois le côté d'un voxel. Autrement, son rayon est égal à trois fois le côté d'un voxel.

Une fois que tous les marqueurs ont été validés, nous pouvons passer à l'étape de segmentation.

3.1.2 La segmentation

Lors de l'étape d'érosion, nous avons utilisé une fonction de distance à l'intérieur du vide formé par les particules. Cette fonction est de nature continue. La méthode des bassins versants semble plus stable avec une fonction de distance de nature discrète. C'est pour cette raison que nous avons attribué à chacun des voxels une valeur d'érosion entière avant de procéder à l'étape d'inondation telle que décrite dans [35].

Les voxels sont tout d'abord classés en ordre décroissant selon leur distance par rapport à la phase solide, c'est-à-dire du plus éloigné au plus près. Lors de l'inondation, pour une même hauteur h , tous les voxels sont soit attribués à un centre de pore, soit qu'ils font partie d'un barrage. Ils sont attribués à un barrage si deux voisins ne sont pas attribués au même pore. Les voxels appartenant à un barrage sont alloués à un pore une fois que tous les autres voxels ont été attribués.

Finalement, un nettoyage est effectué pour éliminer le plus possible les cols en dents de scie, tel qu'illustré en rouge à la figure 3.1. Pour ce faire, pour chacun des voxels, nous vérifions le centre de pore auquel sont associés ses voisins ayant une face commune. Si le centre de pore associé au voxel pour lequel on fait la vérification est différent pour au moins quatre voisins, ce voxel est alors attribué au centre de pore voisin.

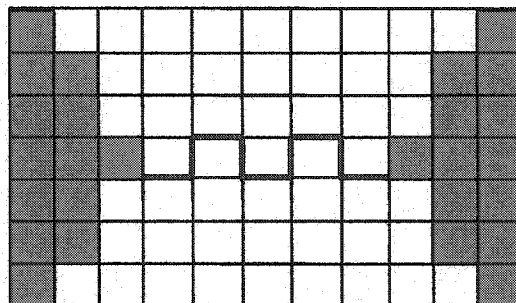


Figure 3.1 – Col en dents de scie

3.1.3 Les statistiques du réseau de pores

Une fois l'espace poreux segmenté adéquatement, plusieurs caractéristiques peuvent être obtenues, à savoir :

- ◆ La distribution de taille de pores, en nombre ou en volume;
- ◆ La distribution de la surface interne des pores, en nombre ou en volume;
- ◆ La distribution de la taille des cols, en nombre ou en volume;
- ◆ La distribution de la connexité des pores, en nombre ou en volume;
- ◆ La distribution du ratio taille des cols / surface interne des pore, nombre ou en volume;
- ◆ La taille moyenne des pores;
- ◆ La distribution de la taille moyenne des pores en fonction de la position en z dans l'entassement.

Toutes ces statistiques requièrent le calcul du volume, de la surface interne, de la taille des cols et de la connexité des pores. Étant donné que les méthodes d'analyse d'image attribuent chacun des voxels à un pore, il est facile de les obtenir. Par exemple, le volume se calcule en multipliant le nombre de voxels à l'intérieur d'un pore par le volume d'un voxel.

Le calcul des surfaces requiert une attention particulière. En effet, si on attribue l'équivalent d'une seule face à chacun des voxels, la surface est sous-estimée, car plus d'une face peuvent être en contact avec la phase solide ou un autre pore. Par ailleurs, de par la nature du problème, elle sera surestimée si on compte toutes les faces. C'est pourquoi un traitement spécial est nécessaire.

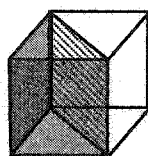


Figure 3.2 – Illustration de la surface à calculer dans le cas où elle est en contact avec deux faces d'un voxel

Comme nous pouvons le voir dans la figure 3.2, lorsque deux faces d'un voxel sont en contact avec la surface à calculer, nous pouvons estimer sa valeur par la surface d'un plan qui passe les arêtes qui joignent les faces en contact et celles qui ne sont pas en contact. Ses côtés ont alors pour valeur le côté d'un voxel ainsi que le côté d'un voxel multiplié par $\sqrt{2}$. Par conséquent, sa surface sera égale à la surface d'une face d'un voxel multiplié par $\sqrt{2}$.

Dans le cas où trois faces d'un voxel sont en contact avec la surface à calculer, nous utiliserons un coefficient égal à $\sqrt{3}$. Nous utiliserons ce même facteur pour des voxels

ayant un plus grand nombre de faces, étant donné qu'au-delà de trois faces, il s'agit d'une incertitude.

3.1.4 Validation des résultats

Nous allons utiliser des entassements réguliers dans le but de valider l'algorithme de caractérisation. Nous allons étudier l'entassement cubique [43] et l'entassement hexagonal [44], qui sont illustrés aux figures 3.3 et 3.4.

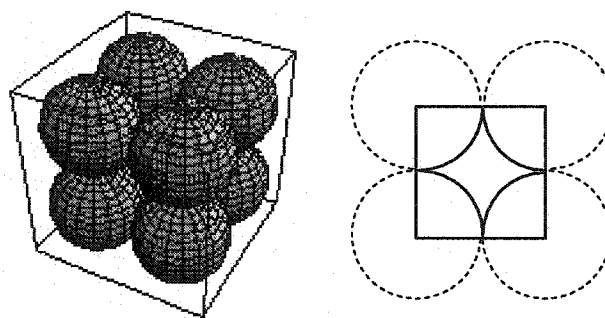


Figure 3.3 – Entassement cubique [43]

Étant donné que ce sont des entassements réguliers, leurs caractéristiques peuvent être calculées de façon analytique.

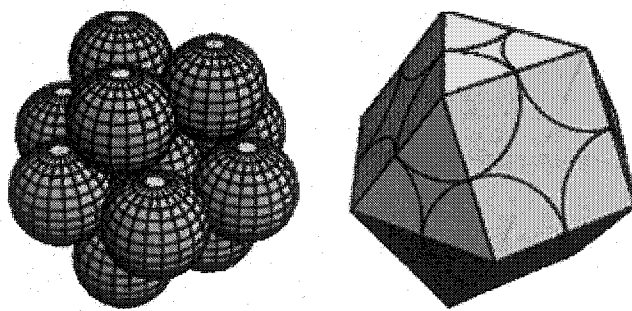


Figure 3.4 – Entassement hexagonal [44]

Dans le cas de l'entassement cubique, les pores sont tous identiques et ils sont formés de huit sphères. Le col est délimité par le plan qui passe par le centre de masse de chaque sphère. C'est à cet endroit que le passage est le plus étroit.

Nous pouvons ainsi calculer le volume du pore. Celui-ci est égal au volume du cube formé par les sphères, ayant un côté égal au diamètre de celle-ci, moins le volume occupé par les sections de sphères. Les sommets du cube correspondant tous au centre

de masse d'une sphère, il y a huit octants, c'est-à-dire l'équivalent d'une sphère, à l'intérieur du cube.

Le col, quant à lui, est illustré dans la partie de droite de la figure 3.3. Sa surface est simplement égale à la surface du carré formé par le centre de masse des sphères moins la surface des quatre quarts de cercle. Par ailleurs, un cube ayant six faces, les pores de l'entassement cubique ont six voisins. Finalement, la surface interne du pore est égale à la surface d'une sphère.

Nous voulons obtenir les résultats numériques pour un entassement cubique de sphères ayant $1\text{ }\mu\text{m}$ pour rayon. L'entassement utilisé est formé de 125 sphères, soit un cube ayant cinq sphères de côté. Nous avons utilisé des conditions périodiques. Les résultats espérés, qui ont été obtenus à l'aide de calculs analytiques, sont les suivants :

Tableau 3.1 – Valeurs théoriques pour l'entassement cubique

Statistique	Valeur
Volume	$3,81\text{ }\mu\text{m}^3$
Surface interne	$12,57\text{ }\mu\text{m}^2$
Cols	$5,15\text{ }\mu\text{m}^2$
Connexité	6
Nombre de pores	150

Dans le cas de l'entassement hexagonal, les pores sont formés par des groupes de treize sphères, tel qu'illustré à la figure 3.4. Dans ce cas, il y a deux formes de pores. Le premier est formé par un tétraèdre passant par le centre de quatre sphères. Le col est encore une fois situé sur le plan formé par les sommets. L'autre pore quant à lui est de forme octaédrique. Par ailleurs, on retrouve deux petits pores pour chacun des gros pores.

Nous utilisons encore une fois un entassement de sphères de $1\text{ }\mu\text{m}$ de rayon. Cette fois, il est composé de 64 sphères. Les conditions périodiques sont toujours de mise. Toutes ces informations nous mènent aux données suivantes :

Tableau 3.2 – Valeurs théoriques pour l'entassement hexagonal

Statistique	Petit pore	Gros pore
Volume	$0,21\text{ }\mu\text{m}^3$	$1,04\text{ }\mu\text{m}^3$
Surface interne	$2,20\text{ }\mu\text{m}^2$	$8,16\text{ }\mu\text{m}^2$
Cols	$0,65\text{ }\mu\text{m}^2$	$1,29\text{ }\mu\text{m}^2$
Connexité	4	8
Nombre de pores	208	

Les volumes ont été obtenus à l'aide d'une méthode de Monte Carlo (génération de nombres aléatoires à l'intérieur du volume correspondant au tétraèdre du petit pore) et de calculs analytiques. La surface et la taille des cols ont été obtenues à l'aide de calculs analytiques.

Finalement, un entassement aléatoire de 40 particules de $1,5\text{ }\mu\text{m}$ de diamètre a aussi été utilisé pour la validation des résultats. Il a été obtenu à l'aide de la méthode de Monte Carlo de Vidal *et al.* [11].

3.2 Comparaison de Monte Carlo, de la méthode de la descente la plus rapide et de la méthode des éléments discrets

Maintenant que nous avons vu comment nous caractériserons les entassements de particules obtenus, nous pouvons discuter de la deuxième partie de ce travail, c'est-à-

dire la comparaison des trois algorithmes d'intérêt, à savoir la méthode de Monte Carlo, la méthode de la descente la plus rapide et la méthode des éléments discrets.

De fait, nous allons utiliser la méthode des éléments discrets développée à l'URPEI pour prédire la porosité d'entassements monodisperses et bidisperses. Ces résultats seront par la suite comparés à ceux obtenus par Eksi et Bousfield [45] par la méthode de la descente la plus rapide et ceux obtenus par Vidal *et al.* [11] à l'aide de la méthode de Monte Carlo. Finalement, tous ces résultats de porosité seront comparés à des données expérimentales.

3.2.1 La méthode des éléments discrets

Nous allons utiliser la méthode des éléments discrets afin de simuler la déposition d'entassements monodisperses et bidisperses. Nous avons décrit de façon générale la méthode des éléments discrets dans le chapitre 2. Regardons maintenant d'un peu plus près les forces en présence dans le cas d'un entassement de particules. Celles-ci incluent la force gravitationnelle, la poussée d'Archimède, la force de traînée et la force de contact. Le bilan sur une particule peut être exprimé de la façon suivante :

$$\begin{aligned} F_{total,i} &= F_{gravité,i} + F_{Archimède,i} + F_{traînée,i} + F_{contact,i} \\ &= \rho V_i \vec{g} - \rho_f V_i \vec{g} - 6\pi\mu R_i \vec{v}_f + \sum_{i \neq j} F_{contact\ i,j} \end{aligned} \quad (3.10)$$

où ρ_f est la densité du fluide, μ sa viscosité, v_f la vitesse relative et R_i , le rayon de la particule. La force de contact entre les particules est calculée à l'aide d'une généralisation du modèle de Cundall et Strack [20] s'inspirant de la loi de Hertz. La loi de Hertz implique un contact élastique non dissipatif, ce qui implique que $\alpha = 3/2$ et où

$c_n = c_s = 0$ (dans les équations 14 et 15). Étant donné que le contact n'est pas non dissipatif, nous ne pouvons pas considérer $c_n = c_s = 0$. Nous aurons alors recours à un modèle intermédiaire, à savoir :

$$F_{contact,n,ij} = k_n \delta_n^{3/2} + c_n \dot{\delta}_n, \quad (3.11)$$

$$F_{contact,s,ij} = k_s \delta_s + c_s \dot{\delta}_s. \quad (3.12)$$

Dans ce cas, les forces normale et tangentielle sont calculées de façon différente. Les expressions pour k_n , c_n , k_s et c_s sont celles utilisées par Zhou *et al.* [46]. Nous nous contenterons de dire que k_n et c_n dépendent du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν et que k_s et c_s font intervenir le coefficient de frottement dynamique μ_{dyn} et le coefficient de frottement statique μ_{sta} .

Une méthode de subdivision a été implantée pour déterminer rapidement les contacts entre les particules.

Par ailleurs, nous avons intégré une phase de relaxation au modèle présenté dans le but de réduire l'erreur sur les résultats. Durant cette étape, les forces extérieures sont tout simplement enlevées.

Une fois que l'entassement a été généré, nous calculons sa porosité. Deux méthodes peuvent être utilisées. La première est celle du calcul de porosité par surface tel que décrit dans le chapitre 2. La deuxième utilise les voxels de l'entassement de particules numérisé. Il s'agit tout simplement du nombre de voxels de la phase poreuse sur le nombre de voxels total. La méthode de calcul par surface donne toujours une valeur inférieure à celle de la méthode par voxels en raison du faible chevauchement des particules.

3.2.2 La méthode de Monte Carlo

Dans leurs travaux, Vidal *et al.* [11] ont utilisé la méthode de Monte Carlo afin d'étudier l'influence de la composition de l'entassement original sur la porosité, la microrugosité et la taille de pore moyenne. La première étape de ces travaux était l'étude d'entassements bidisperses.

Trois différents rapports entre les diamètres ont été testés pour huit compositions différentes. Dans tous les cas, la plus grande particule avait un diamètre de 1 μm . Les différentes compositions utilisées sont résumées dans les tableaux suivants :

Tableau 3.3 – Pourcentages de petites sphères utilisés pour l'étude des entassements bidisperses

Pourcentage de petites sphères	0 %	5 %	10 %	20 %	30 %	50 %	75 %	100 %
--------------------------------	-----	-----	------	------	------	------	------	-------

Tableau 3.4 – Ratios et diamètres des petites sphères utilisés pour l'étude des entassements bidisperses

Ratio	Diamètre des petites sphères
1,25	0,8 μm
2,5	0,4 μm
5	0,2 μm

Un total de 20 simulations ont été effectuées. La porosité a été obtenue pour chacun des entassements et la moyenne a été calculée. Il n'a pas été nécessaire d'en faire autant pour le diamètre de pore moyen, puisque la valeur obtenue pour une simulation est statistiquement significative vu le nombre de pores élevé.

3.2.3 La méthode de la descente la plus rapide

Eksi et Bousfield [45] ont utilisé la méthode de la descente la plus rapide afin d'étudier l'influence de la composition d'entassements bidisperses sur leur porosité. Dans leur cas, les grosses particules avaient un diamètre de 0,5 μm . Ils ont utilisé des rapports de tailles de 1,25, 1,7, 2,5 et 5. Ils ont calculé la porosité pour des pourcentages de petites sphères variant de 0 % à 100 %, à tous les 20 %.

3.2.4 Données expérimentales

Les valeurs calculées seront ensuite comparées aux données expérimentales obtenues par Leskinen [40] et par Alince et Lepoutre [41]. Bien que les diamètres que ces auteurs ont utilisés pour leurs expérimentations ne soient pas les mêmes que ceux que nous prenons pour nos simulations, nous pouvons les utiliser pour comparer nos résultats, puisque nous pouvons supposer que la porosité n'est pas fonction du diamètre des particules, mais bien du ratio des tailles et de la composition. En effet, il s'agit d'une caractéristique adimensionnelle.

CHAPITRE 4

4- Résultats et discussion

Maintenant que nous avons bien établi la démarche que nous allons suivre, nous pouvons passer à l'étape suivante, c'est-à-dire l'obtention et l'analyse des résultats.

Nous allons tout d'abord valider notre algorithme de caractérisation en vérifiant l'efficacité du filtre utilisé pour éliminer les faux centres de pores. Nous allons par la suite comparer les statistiques du réseau de pores de deux entassements connus. Ensuite, nous calculerons les caractéristiques d'un entassement aléatoire, que nous comparerons à l'entassement aléatoire obtenu par Toivakka et Nyfors [28].

Finalement, nous comparerons trois modèles de déposition des particules, à savoir la méthode de Monte Carlo, la méthode de la descente la plus rapide et la méthode des éléments discrets. Cette comparaison se basera sur la porosité des entassements obtenus par les trois méthodes. Dans un premier temps, nous analyserons des entassements monodisperses. Enfin, nous comparerons des entassements bidisperses et ce, pour différentes compositions de particules.

4.1 Validation de l'algorithme de caractérisation

L'une des étapes les plus importantes du développement de l'algorithme de caractérisation d'un entassement de particules est, bien entendu, la validation des résultats. Nous allons tout d'abord vérifier l'efficacité du filtre que nous utilisons pour

éliminer les faux centres de pores, c'est-à-dire les maximums locaux. Ensuite, nous allons comparer les caractéristiques obtenues aux valeurs théoriques. Nous ferons également une analyse de sensibilité sur les caractéristiques en fonction de la résolution pour les entassements réguliers.

4.1.1 Effet du filtre

L'entassement cubique

Le nombre de centre de pores de l'entassement cubique est toujours exact, même avant l'application du filtre. Ce résultat était prévisible, puisque l'entassement cubique est orthogonal. Par conséquent, la fonction de distance à l'intérieur des pores est monotone croissante jusqu'au maximum, ce qui rend improbable l'apparition de faux centres de pores.

L'entassement hexagonal

Comme nous pouvons le voir à la figure 4.1, le nombre de centre de pores pour l'entassement hexagonal est presque toujours exact, à condition d'avoir une résolution minimale (plus de 7 voxels / μm). Par ailleurs, le nombre de maximums locaux qui n'ont pas été éliminés est peu important (entre 1 et 4, ce qui représente moins de 2% du nombre total). De plus, nous pouvons observer sur la figure 4.2 que le nombre de centres de pores avant le filtre est important – entre 244 et 1267, selon la résolution. L'efficacité est donc très près de 100 %. Il est cependant difficile d'obtenir un filtre qui

élimine la totalité des faux centres de pores. En effet, la détermination des faux marqueurs est un problème complexe pour lequel il n'existe pas de solution triviale [34]. Nous pouvons par conséquent conclure que le nombre de voxels éliminés est satisfaisant.

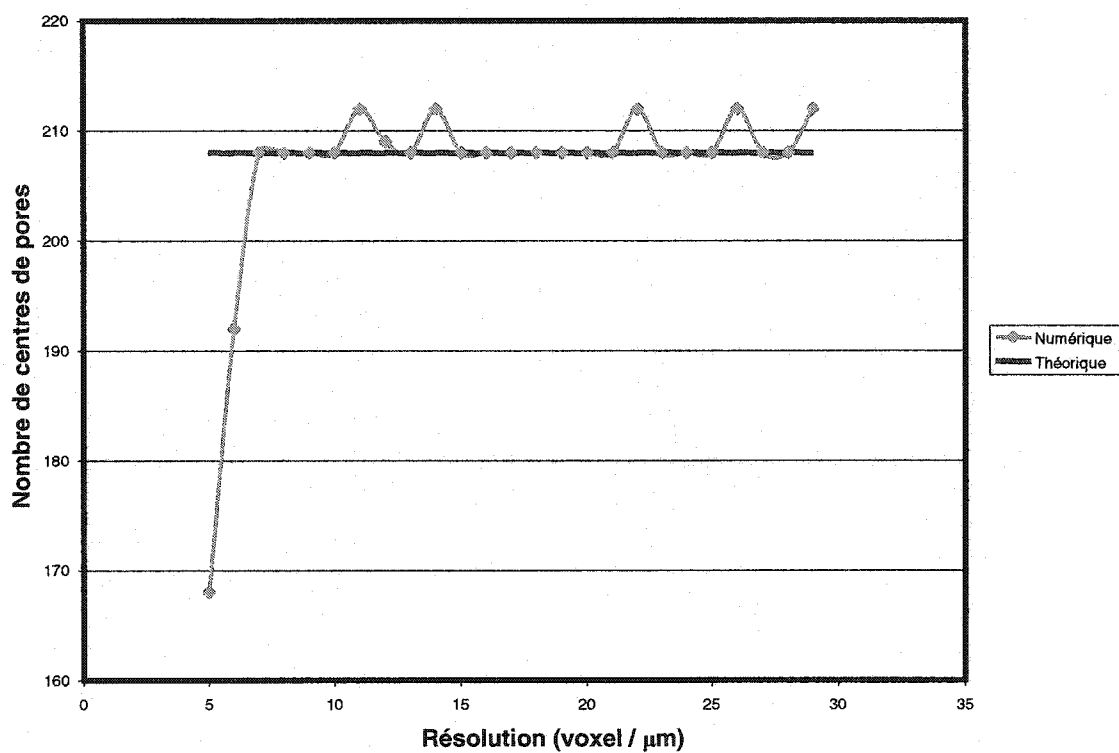


Figure 4.1 – Nombre de centres de pores en fonction de la résolution pour un entassement hexagonal

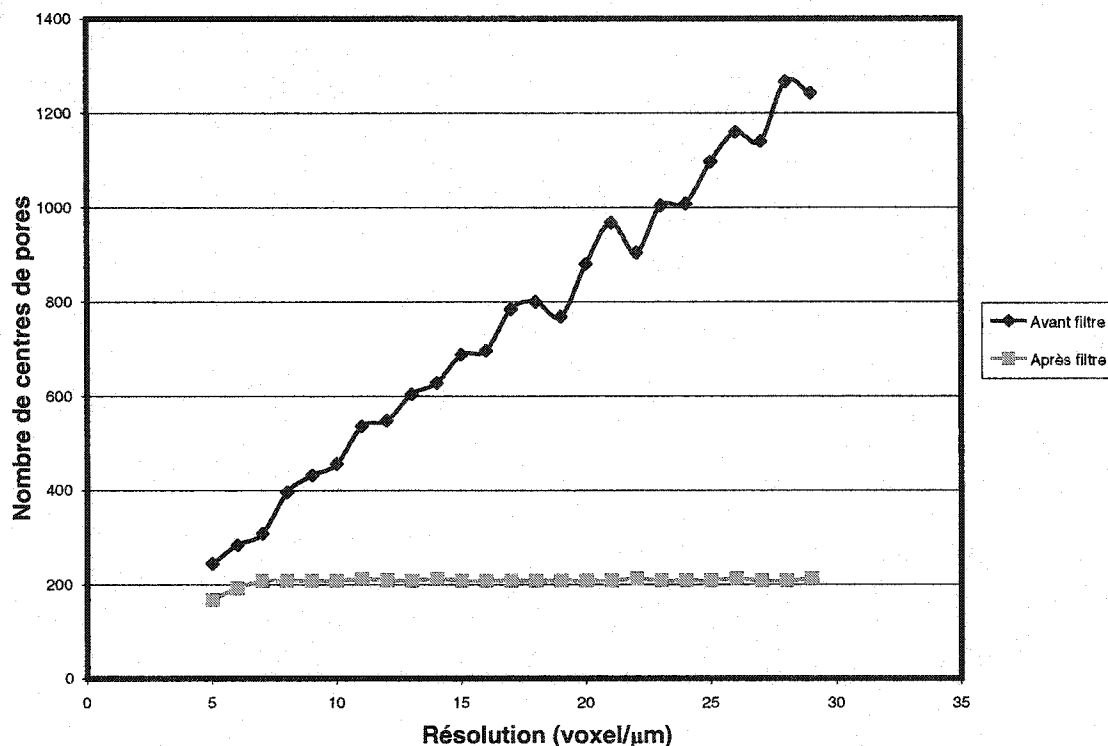


Figure 4.2 – Nombre de centres de pores en fonction de la résolution pour un entassement hexagonal avant et après le filtre

L'entassement aléatoire

Nous pouvons voir sur la figure 4.3 que le nombre de centres de pores après le filtre pour l'entassement aléatoire augmente avec la résolution. Deux explications peuvent être à l'origine de cette particularité. Tout d'abord, le filtre n'est peut-être pas assez efficace. En effet, la segmentation est un problème complexe de l'analyse d'image. Toutes les méthodes génèrent un trop grand nombre de régions et discriminer les fausses des vraies est encore plus laborieux [34].

Ensuite, la nature fractale des entassements aléatoires fait que le nombre de centres de pores dépend de la résolution contrairement au cas des entassements réguliers [47].

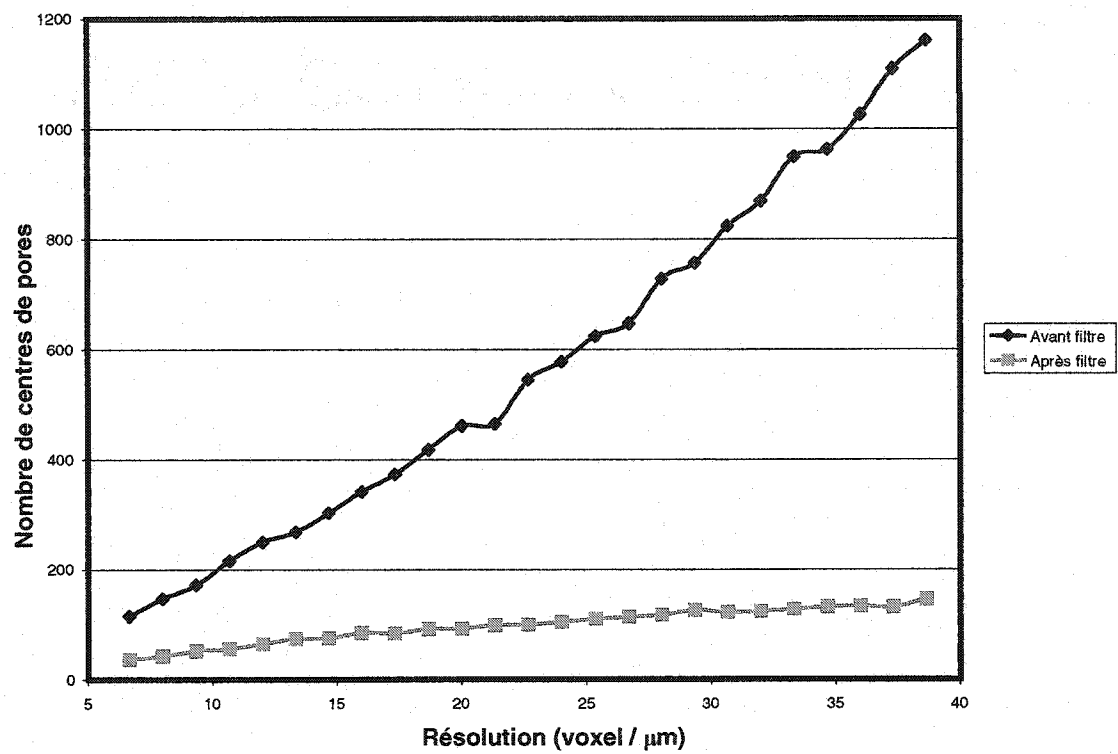


Figure 4.3 – Nombre de centre de pores en fonction de la résolution pour un entassement aléatoire

L'image des cinq pores de l'entassement présentés à la figure 4.4 nous montre qu'ils ont une forme satisfaisante. Nous pouvons donc supposer que le filtre que nous utilisons est adéquat.

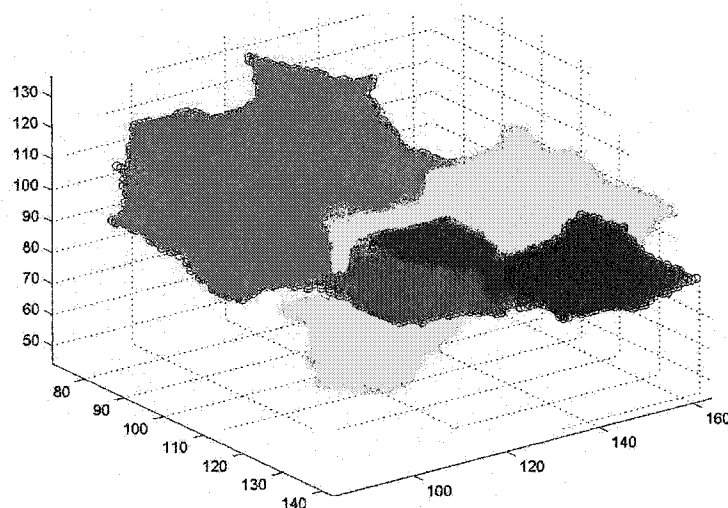


Figure 4.4 – Illustration de cinq pores pour un entassement aléatoire

4.1.2 Le calcul des statistiques

L'entassement cubique

Nous avons obtenu pour l'entassement cubique les statistiques suivantes : le volume des pores, la surface occupée par les cols ainsi que la surface interne des pores. Étant donné que nous avons utilisé un entassement cubique composé de 125 sphères, le réseau comptait 100 pores. Ainsi, nous avons calculé la moyenne ces statistiques considérant tous les pores à l'intérieur de l'entassement et ce, pour plusieurs résolutions et nous les avons comparé aux valeurs théoriques.

Nous avons obtenu, pour le volume des pores, le graphique à la figure 4.5. L'écart type sur le volume, la taille du col et la surface étant négligeable (de l'ordre de 10^{-12}), nous n'avons pas indiqué l'erreur.

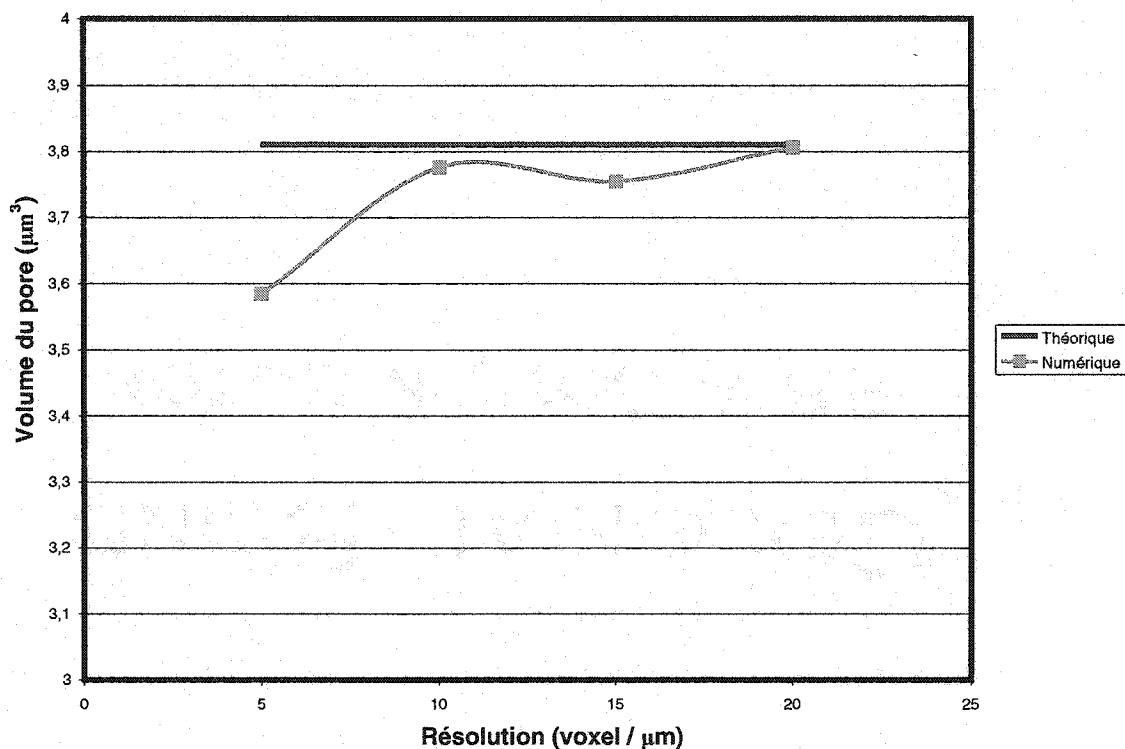


Figure 4.5 – Effet de la résolution sur le volume des pores pour un entassement cubique

Bien que la courbe ne soit pas monotone croissante, sa tendance nous indique que plus nous augmentons la résolution, plus le volume du pore s'approche de la valeur théorique. En effet, nous avons une erreur d'environ $0,25 \mu\text{m}^3$, soit 6,56 %, pour la plus basse résolution. Cette erreur est pratiquement nulle pour une résolution élevée. Nous obtenons un volume de $3,81 \mu\text{m}^3$ pour une résolution de 20 voxel / μm , tout comme Toivakka et Nyfors [28], ce qui est aussi la valeur théorique.

Par ailleurs, le volume des pores est toujours sous-estimé par rapport à la valeur théorique. Cette particularité est due au fait qu'un voxel est considéré comme faisant partie de la phase solide si son centre de masse fait partie de cette même phase. Étant donné la courbure des particules, ce critère de sélection favorise les voxels de la phase solide en terme de volume, puisque le fait que son centre de masse fasse partie de la

phase solide n'implique pas nécessairement que tout le volume est occupé par une section de la particule. Le voxel peut en effet être vide à plus de 50 %, mais être attribué à la phase solide. Plus la résolution est élevée, moins la proportion de volume faussement attribués à la phase solide est importante, ce qui explique la diminution de l'erreur.

De plus, nous avons un minimum local dans la courbe pour une résolution d'environ 15 voxel / μm . Ce minimum pourrait être dû à une nature faiblement oscillatoire du phénomène de surévaluation du volume.

Par la suite, la taille moyenne des cols en fonction de la résolution a été obtenue, ce qui nous a donné la courbe suivante :

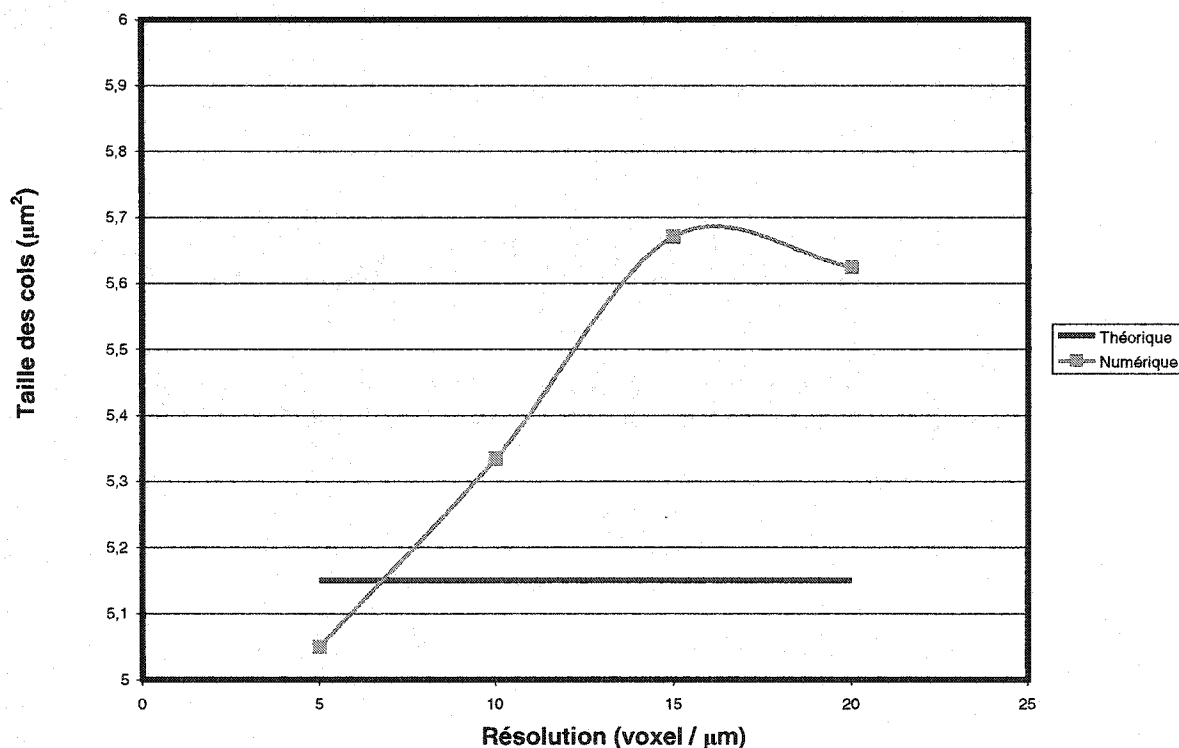


Figure 4.6 – Effet de la résolution sur la taille des cols pour un entassement cubique

La courbe nous indique que l'algorithme de caractérisation a une tendance à surestimer la surface du col. Il y a également un maximum local pour une résolution d'environ 15 voxels / μm . À la plus haute résolution, nous avons une erreur d'environ $0,5 \mu\text{m}^2$, soit près de 10 %. Pour une résolution de 20 voxels / μm , Toivakka et Nyfors [28] obtiennent une taille de col de $5,04 \mu\text{m}^2$, ce qui est inférieur à la valeur théorique et à celle que nous calculons, qui sont de $5,15 \mu\text{m}^2$ et de $5,67 \mu\text{m}^2$, respectivement.

L'erreur que nous obtenons peut avoir plusieurs origines. Tout d'abord, une surestimation de la méthode de calcul des surfaces est peu probable, étant donné que la surface du col est soit parallèle ou soit perpendiculaire au substrat : une seule face du voxel fait partie du col. Une explication possible serait que le col peut ne pas être situé exactement au rayon hydraulique minimal. De plus, la surface est peut-être en dents de scie, tel qu'illustré à la figure 3.1, ce expliquerait l'erreur. Nous croyons que cette explication est la plus probable, bien que la segmentation subit un nettoyage pour réduire ce genre de problème.

Voyons maintenant ce qui se passe avec la surface interne des pores.

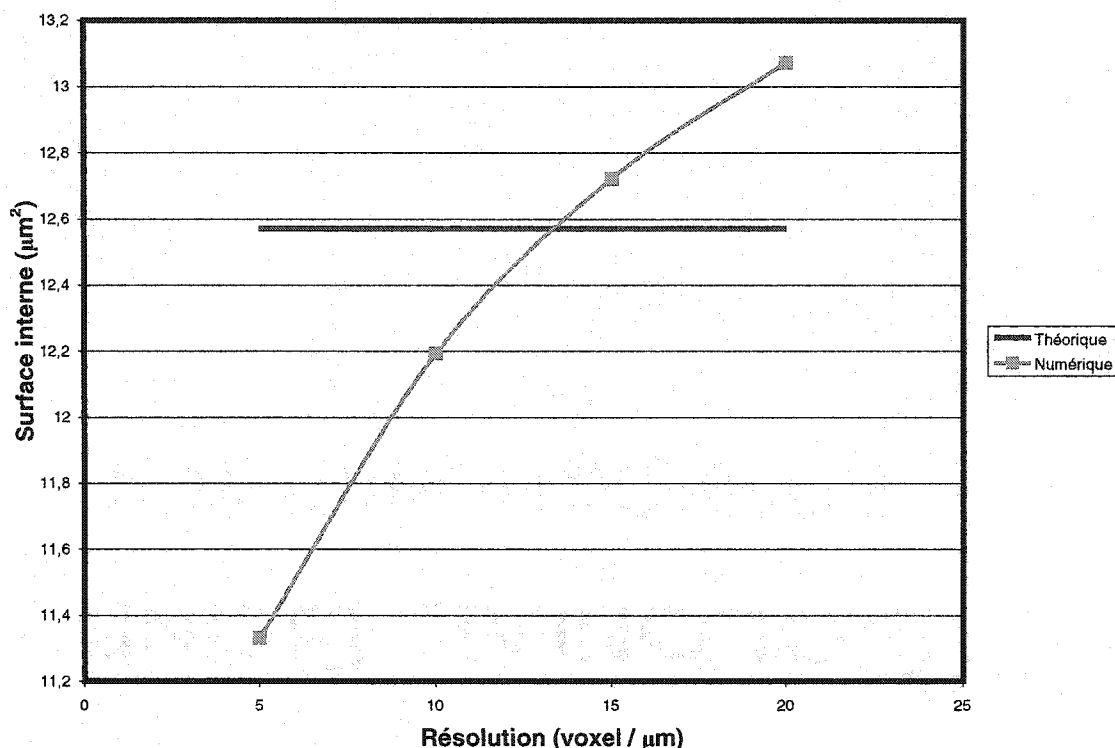


Figure 4.7 – Effet de la résolution sur la surface interne des pores pour un entassement cubique

Nous avons ici une courbe monotone croissante avec la résolution, sans minimum ou maximum local. La surface interne tend également à être surestimée à haute résolution. Pour la plus haute résolution, nous obtenons une surface interne de $13,07 \mu\text{m}^2$, tout comme Toivakka et Nyfors [28]. Ceci représente une erreur de près de 4 %.

L'erreur est due à la méthode utilisée pour le calcul. En effet, le calcul se fait en proportion du nombre de faces qui sont en contact avec la phase solide. La courbure des sphères tend à fausser la valeur obtenue, soit en la sous-estimant ou en la surestimant, selon de la résolution.

En ce qui concerne la connectivité, une valeur de 6 a toujours été obtenue, ce qui est le résultat théorique.

L'entassement hexagonal

Passons maintenant à l'analyse des résultats obtenus pour l'entassement hexagonal. Nous avons calculé les mêmes statistiques que dans le cas de l'entassement cubique. Encore une fois, nous avons calculé la moyenne et l'écart type pour l'ensemble des pores. La figure qui suit représente l'effet de la résolution sur la taille des pores.

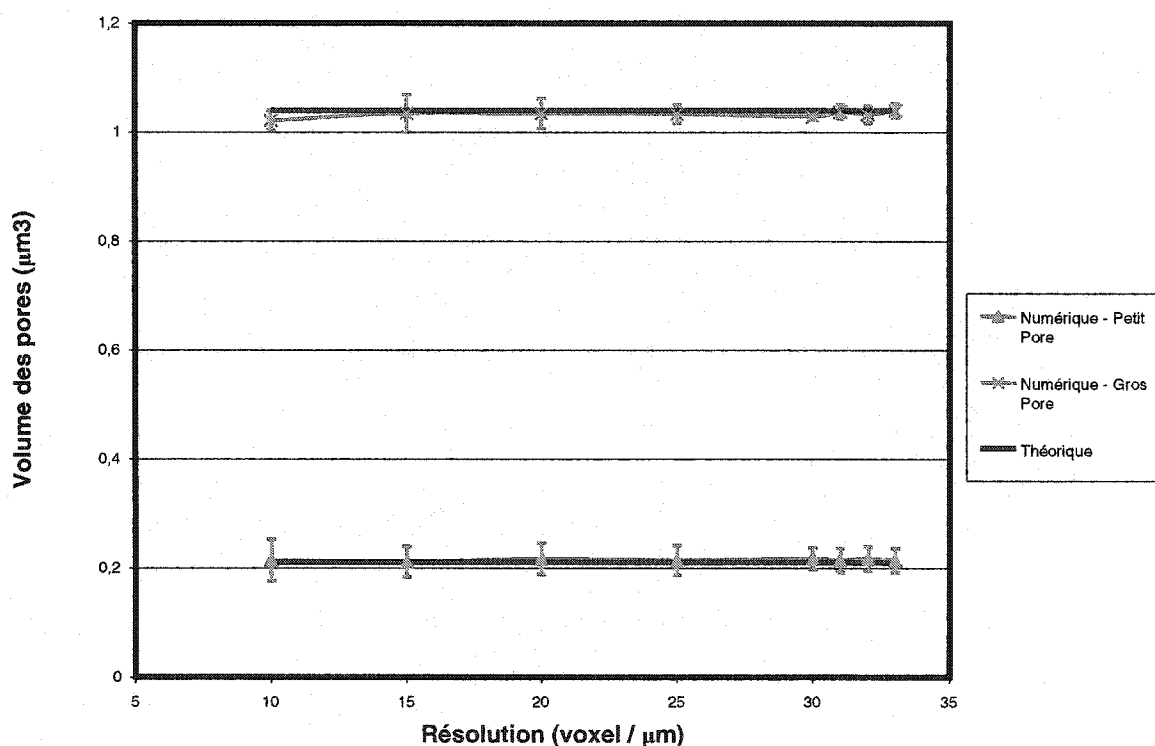


Figure 4.8 – Effet de la résolution sur le volume des pores pour un entassement hexagonal

Comme nous pouvons le voir, les résultats obtenus sont très près des valeurs espérées. L'erreur relative varie entre 0,6 et 4 %. Par ailleurs, la plage de valeurs couverte par l'incertitude, c'est-à-dire deux fois l'écart type, inclut toujours la valeur théorique. De plus, pour une résolution de 20 voxels / μm , nous avons des volumes de $1,03 \mu\text{m}^3$ et de

$0,22 \mu\text{m}^3$, alors que Toivakka et Nyfors [28] obtiennent des volumes de $1,04 \mu\text{m}^3$ et de $0,20 \mu\text{m}^3$. Ces résultats sont comparables.

Nous pouvons donc conclure que l'algorithme de segmentation donne des résultats satisfaisants pour déterminer la taille des pores, même pour un milieu qui n'est pas orthogonal.

Regardons maintenant l'effet de la résolution sur la taille des cols.

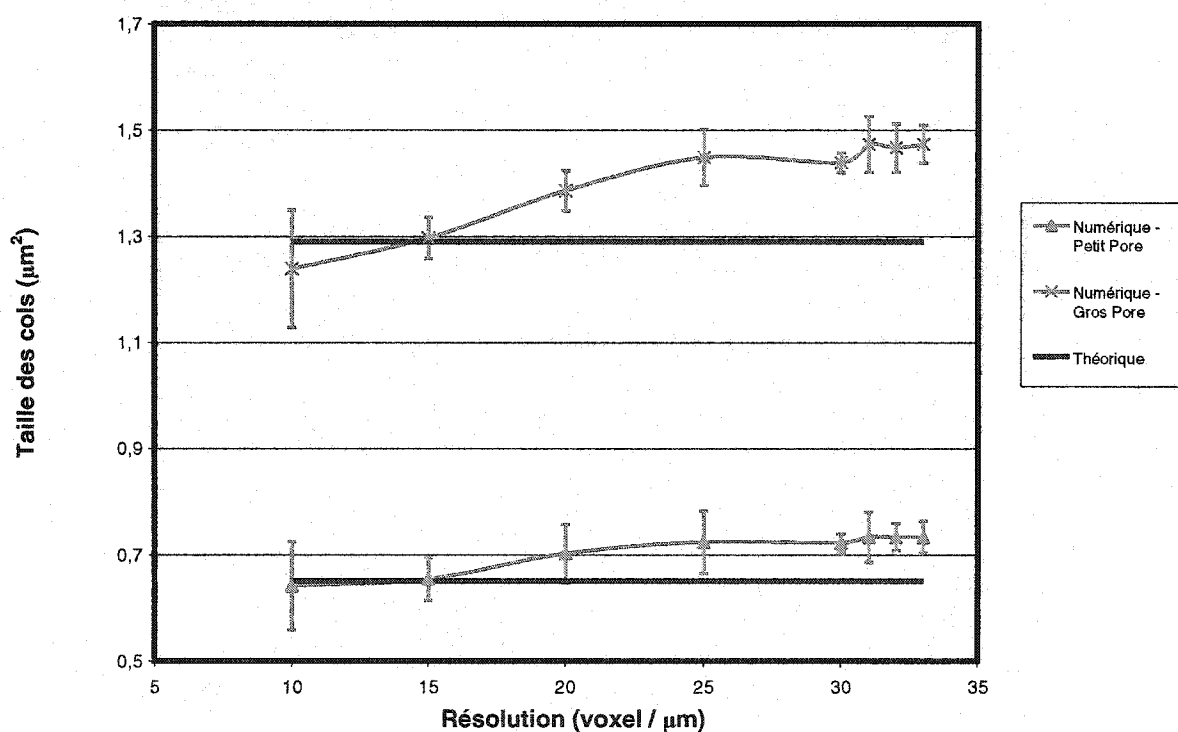


Figure 4.9 – Effet de la résolution sur la taille des cols pour un entassement hexagonal

Les courbes nous indiquent que la taille des cols est surestimée. La plage de valeurs couverte par l'erreur numérique n'inclut pas la valeur théorique et elle est d'autant moins étendue que la résolution est élevée.

L'erreur relative par rapport à la valeur théorique peut s'élever jusqu'à près de 15 %. L'explication de l'erreur est la même que pour l'entassement cubique. En effet, elle peut encore être expliquée par une surface en dents de scie conjuguée à l'erreur de la méthode d'évaluation de la surface. Dans ce cas-ci, l'erreur relative est plus importante que dans le cas de l'entassement cubique. Puisque les pores ne sont pas perpendiculaires les uns aux autres, le col forme un angle par rapport au substrat. Les « escaliers » que forment les cols peuvent faire en sorte que la surface est surestimée. De plus, la présence de faux pores contribue à l'erreur. En effet, ces faux pores ont un rayon hydraulique relativement grand, ce qui augmente la taille des cols.

Pour une résolution de 20 voxels / μm , nous avons obtenu des tailles de col de $0,70 \mu\text{m}^2$ et de $1,39 \mu\text{m}^2$, tandis que Toivakka et Nyfors [28] obtiennent des valeurs de $0,66 \mu\text{m}^2$ et de $1,43 \mu\text{m}^2$. Nous constatons que Toivakka et Nyfors [28] sont plus près du résultat théorique de $0,65 \mu\text{m}^2$ pour le petit pore alors que nous sommes plus près du résultat théorique de $1,29 \mu\text{m}^2$ pour le gros pore. Nos résultats concordent avec le fait que, théoriquement, la taille des cols pour les gros pores doit être égale à deux fois celles des petits pores (connectivité de 4 contre connectivité de 8 pour la même forme de cols), ce qui n'est pas le cas avec les résultats de Toivakka et Nyfors [28].

Regardons maintenant ce qui se passe du côté de la surface interne des pores (figure 4.10).

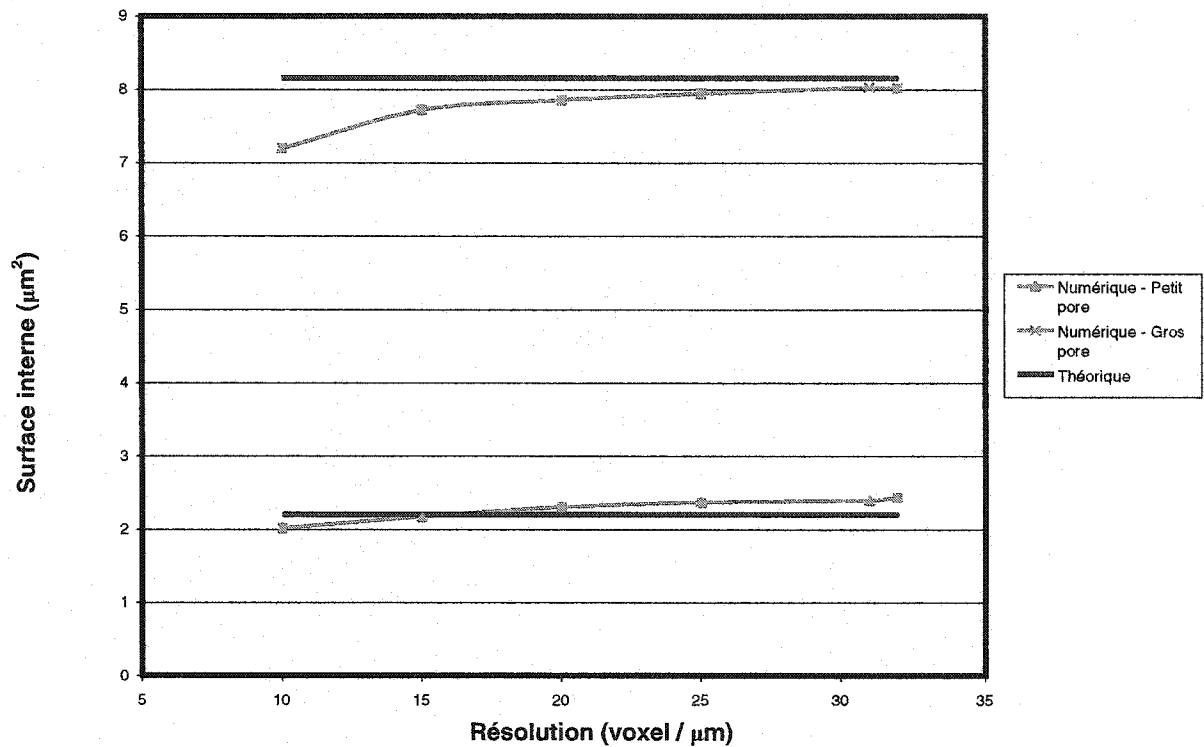


Figure 4.10 – Effet de la résolution sur la surface interne des pores pour un entassement hexagonal

Encore une fois, nous pouvons noter une légère différence entre la valeur théorique et la valeur obtenue par le modèle. La plage de valeurs couverte par l'erreur numérique n'inclut pas la valeur théorique. De plus, pour une résolution de 20 voxels / μm , nous avons calculé des surfaces internes de $2,31 \mu\text{m}^2$ et de $7,86 \mu\text{m}^2$, alors que Toivakka et Nyfors [28] ont obtenu des valeurs de $2,30 \mu\text{m}^2$ et de $8,53 \mu\text{m}^2$. Les valeurs théoriques sont de $2,20 \mu\text{m}^2$ et de $8,16 \mu\text{m}^2$. Nous pouvons par ailleurs constater que dans le cas du petit pore, l'algorithme de caractérisation a tendance à surestimer la valeur de la surface alors que c'est l'inverse dans le cas du gros pore. Les surfaces sont surestimées dans les deux cas pour Toivakka et Nyfors [28].

Ceci nous porte à croire que l'erreur sur l'évaluation de la surface interne de notre méthode de calcul dépend du volume du pore.

Dans tous les cas, la connectivité des pores prédite est correcte. Nous pouvons donc conclure que notre algorithme de segmentation de l'espace poreux nous donne des résultats satisfaisants dans le cas d'entassements réguliers. Dans le cas des cols, nous obtenons ainsi de bons résultats, mais dans le cas des surfaces internes, le signe de l'erreur par rapport à la valeur théorique dépend du volume du pore. Nous croyons que l'erreur de la surface des cols est due à une représentation « en escalier » inhérente à l'utilisation de voxels.

4.2 Caractéristiques d'un entassement monodisperse

Nous avons par la suite calculé les caractéristiques d'un entassement monodisperse de 239 sphères, ayant comme rayon $0,5 \mu\text{m}$. Cet entassement a été obtenu à l'aide d'une simulation utilisant la méthode des éléments discrets. Le choix des paramètres dans cette méthode a une répercussion sur les caractéristiques des entassements prédits, comme il sera discuté dans la troisième partie de ce chapitre.

Nous avons déterminé les caractéristiques du réseau de pores de cet entassement en utilisant une résolution de 15 voxels / μm . Des données expérimentales complètes ne sont pas disponibles, mais nous pouvons comparer nos résultats à ceux obtenus par Toivakka et Nyfors [28] pour un entassement monodisperse de particules sphériques de $0,25 \mu\text{m}$ de rayon obtenu à l'aide de la méthode de la descente la plus rapide de Eksi et Bousfield [45].

La distribution de la taille de pores a été obtenue en calculant le rayon équivalent des pores, c'est-à-dire le rayon d'une sphère qui a le même volume. Cette distribution est représentée sur les figures 4.11 et 4.12.

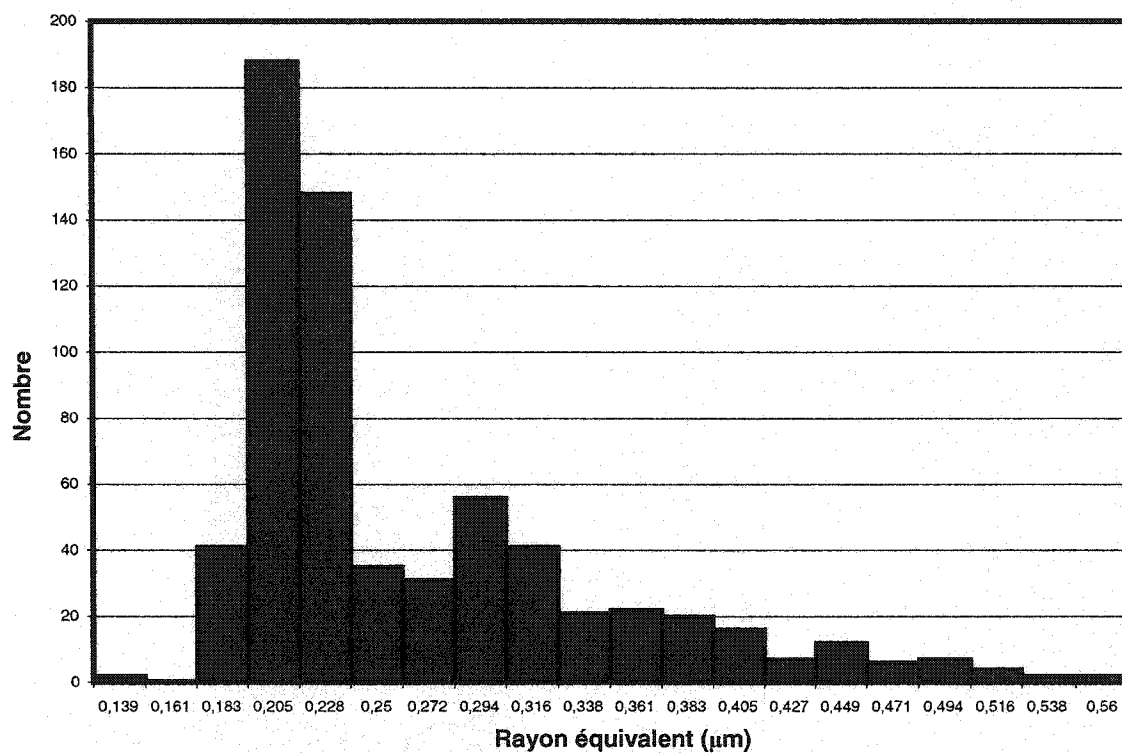


Figure 4.11 – Distribution de la taille des pores en nombre

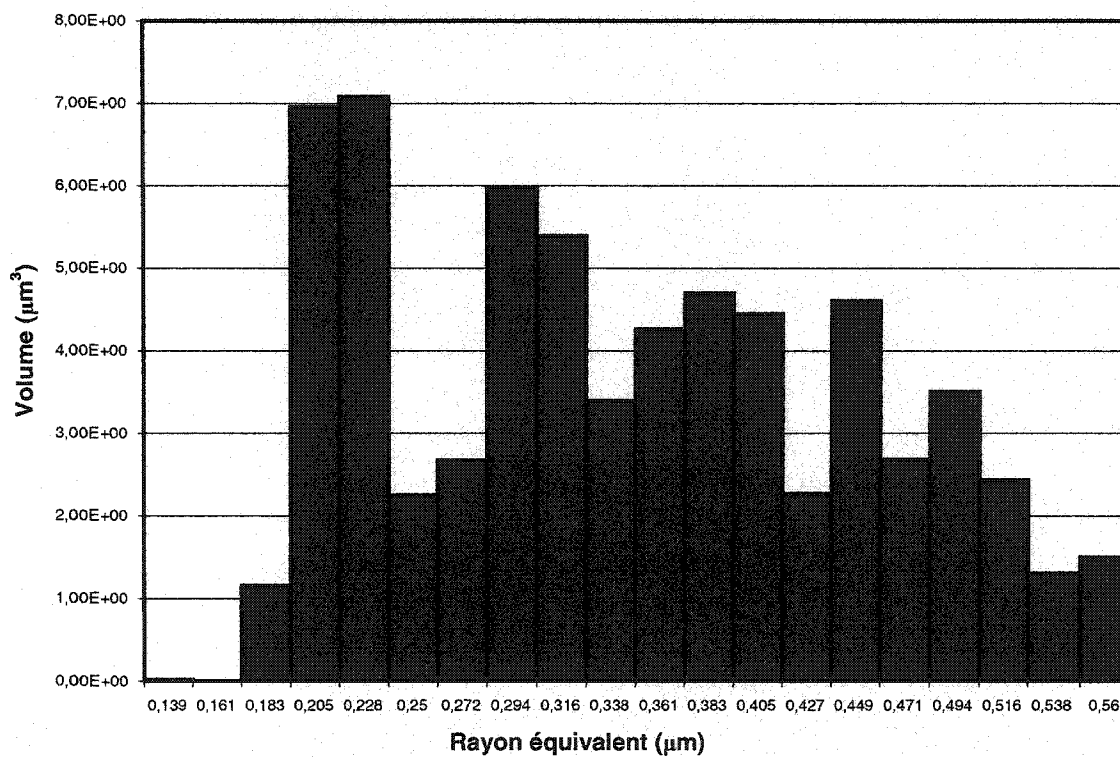


Figure 4.12 – Distribution de la taille des pores en volume

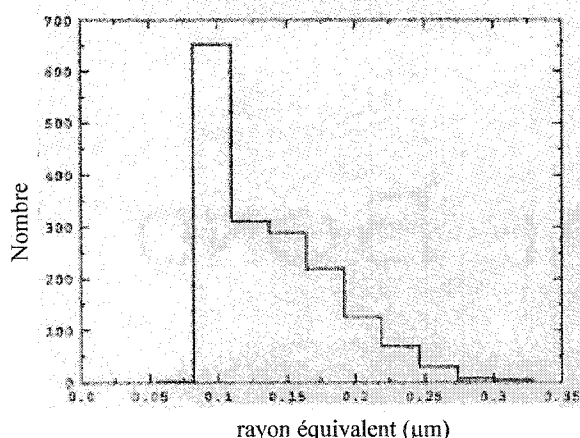


Figure 4.13 – Distribution de la taille des pores en nombre obtenue par Toivakka et Nyfors [28]

La figure 4.13 nous montre la distribution de taille de pores en nombre que Toivakka et Nyfors [28] ont calculée. Comme nous pouvons le constater, nous obtenons une distribution de taille des pores en nombre de type lognormale, tout comme ces auteurs.

Le pic de notre distribution de taille des pores en fréquence se situe à un rayon équivalent d'environ 0,2 μm, soit deux

fois celui de Toivakka et Nyfors [28]. Les sphères utilisées par ces auteurs ayant un rayon deux fois plus petit, ce résultat est normal. Nous avons pour seuil un rayon équivalent de 0,17 μm, puisqu'un nombre négligeable de pores se trouve en deçà de cette valeur. Par ailleurs, plus de la moitié des pores (soit 336 sur 661) ont un rayon équivalent situé entre 0,19 μm et 0,24 μm. La distribution de la taille des pores en volume présente une grande concentration de pores de faible rayon, alors que Toivakka et Nyfors [28] obtiennent plutôt une distribution normale (figure 4.14). On remarque cependant un pic de petits pores en volume dans notre distribution. Si on néglige ce pic, la distribution deviendrait alors de type normale. Ceci nous porte à croire que notre filtre est moins restrictif pour les pores de petite taille que celui utilisé par Toivakka et Nyfors [28]. Ces résultats démontrent en outre que la distribution de la taille de pores est fortement reliée au type de filtre utilisé.

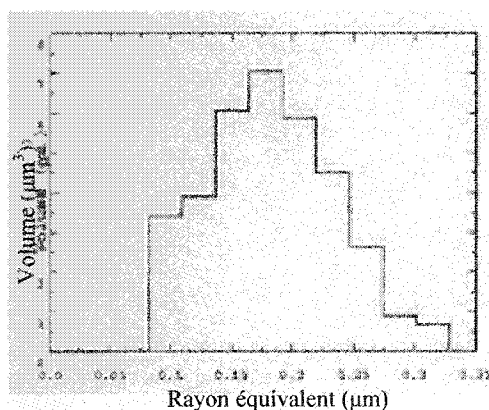


Figure 4.14 – Distribution de la taille des pores en volume obtenue par Toivakka et Nyfors [28]

Regardons maintenant la distribution de la taille moyenne de pores en fonction de la hauteur dans l'entassement. Nous avons choisi arbitrairement de diviser le gâteau en dix tranches.

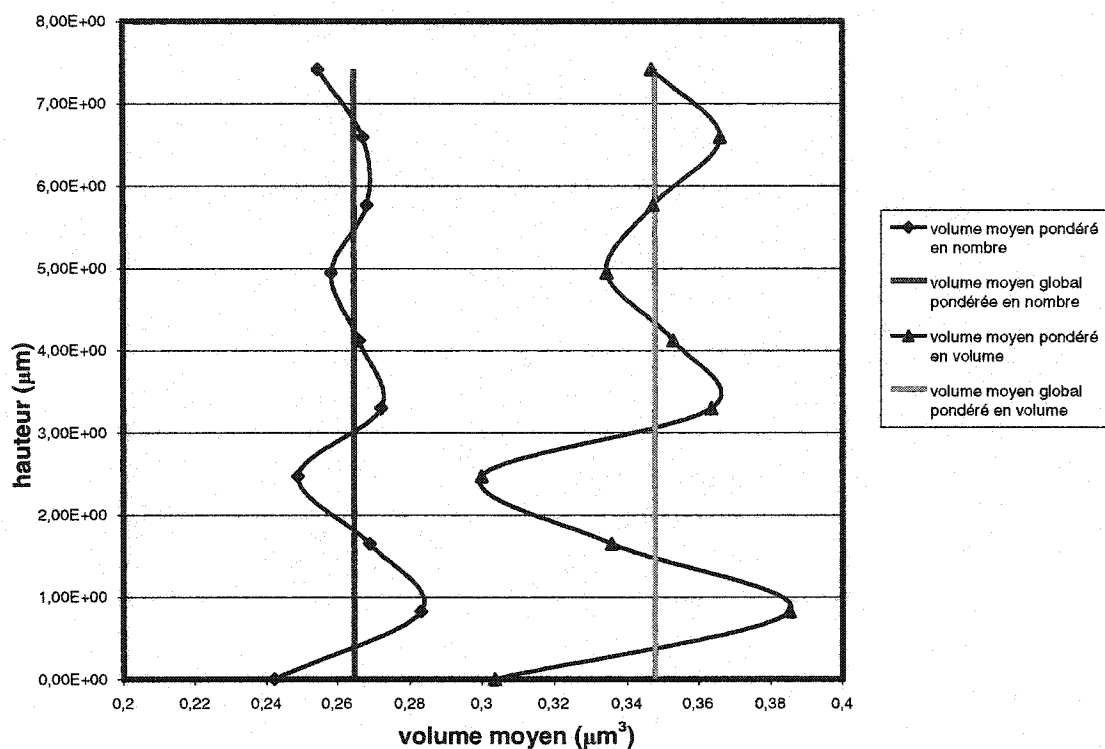


Figure 4.15 – Distribution de la taille moyenne des pores en fonction de la hauteur

La distribution du volume moyen des pores en fonction de la hauteur dans l'entassement de particules nous démontre qu'ils sont répartis uniformément. Cette distribution est normale pour un entassement monodisperse, puisqu'il n'y a pas de particules de petites tailles pour percoler dans l'entassement.

Observons maintenant les distributions que nous obtenons concernant la taille des cols.

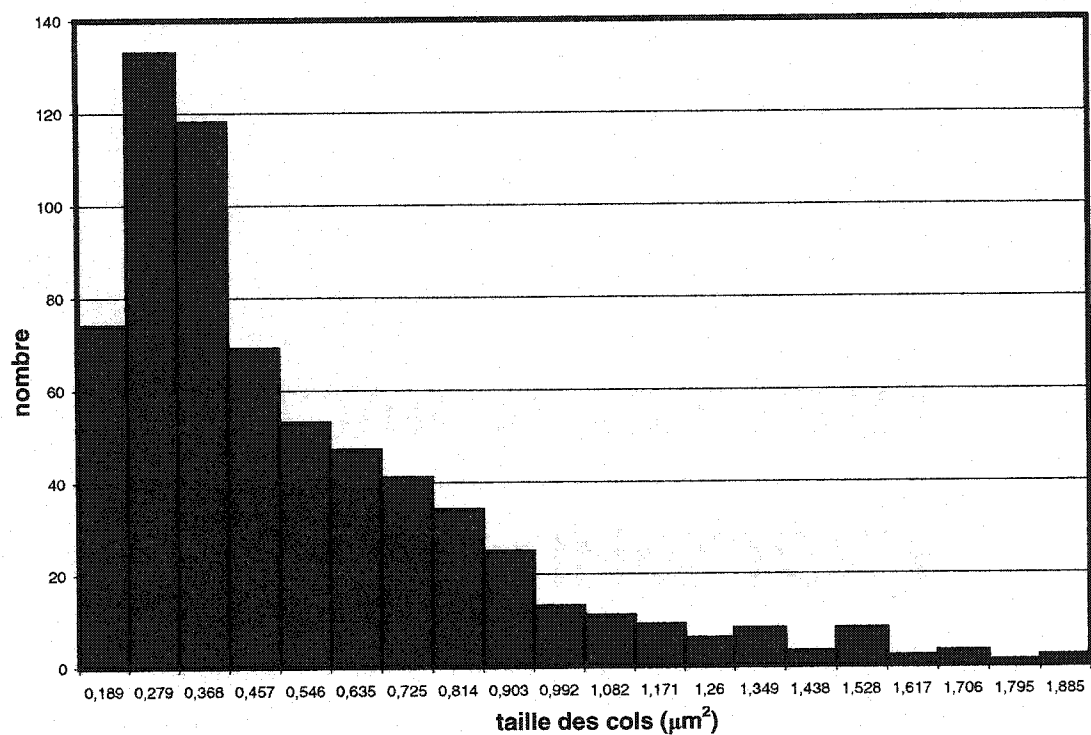


Figure 4.16 – Distribution de la taille des cols en nombre

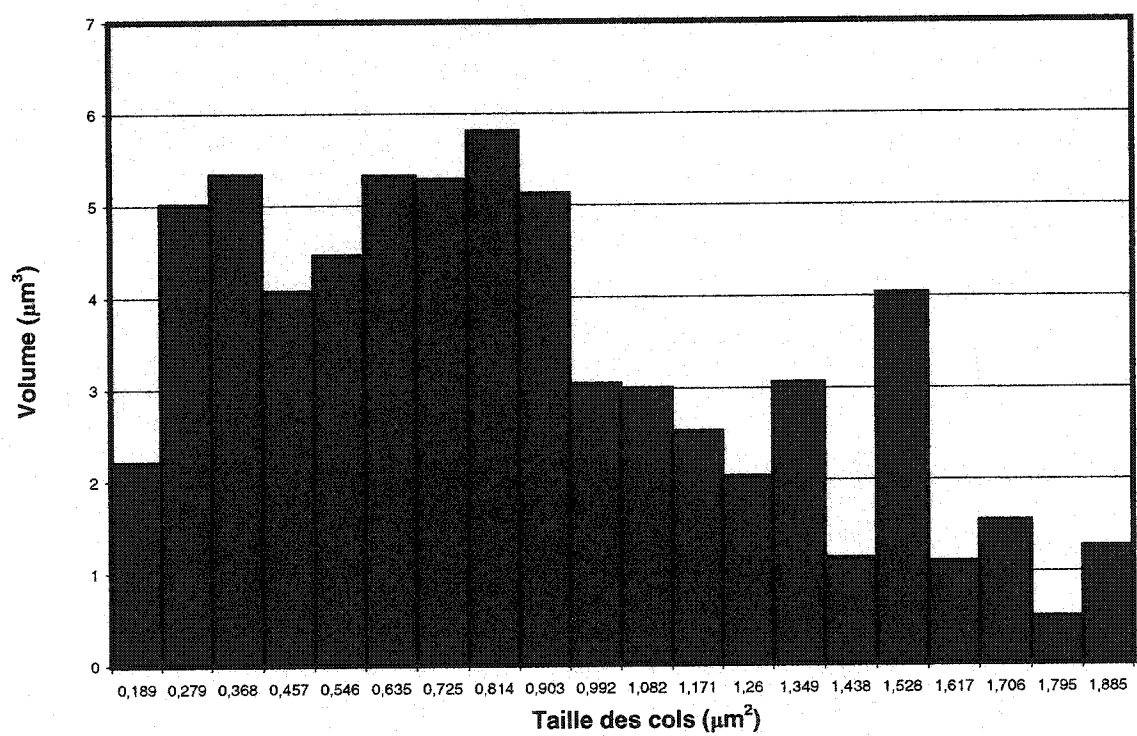


Figure 4.17 – Distribution de la taille des cols en volume

La distribution de la taille des cols est similaire à la distribution de la taille des pores. En effet, nous avons une distribution de forme lognormale accompagnée d'une grande concentration de petites valeurs. Les deux catégories qui regroupent le plus grand nombre de pores en contiennent environ 38 % et elles se situent entre $0,23 \mu\text{m}^2$ et $0,37 \mu\text{m}^2$. Il est raisonnable de penser qu'il existe une corrélation entre la taille des pores et la taille des cols.

Par ailleurs, l'écart entre le nombre de pores des catégories les plus importantes et leurs voisines est de moindre envergure que dans le cas de la taille des pores. Cette observation est également valable pour la distribution en volume. La forme de cette dernière est un peu plus près celle d'une distribution normale.

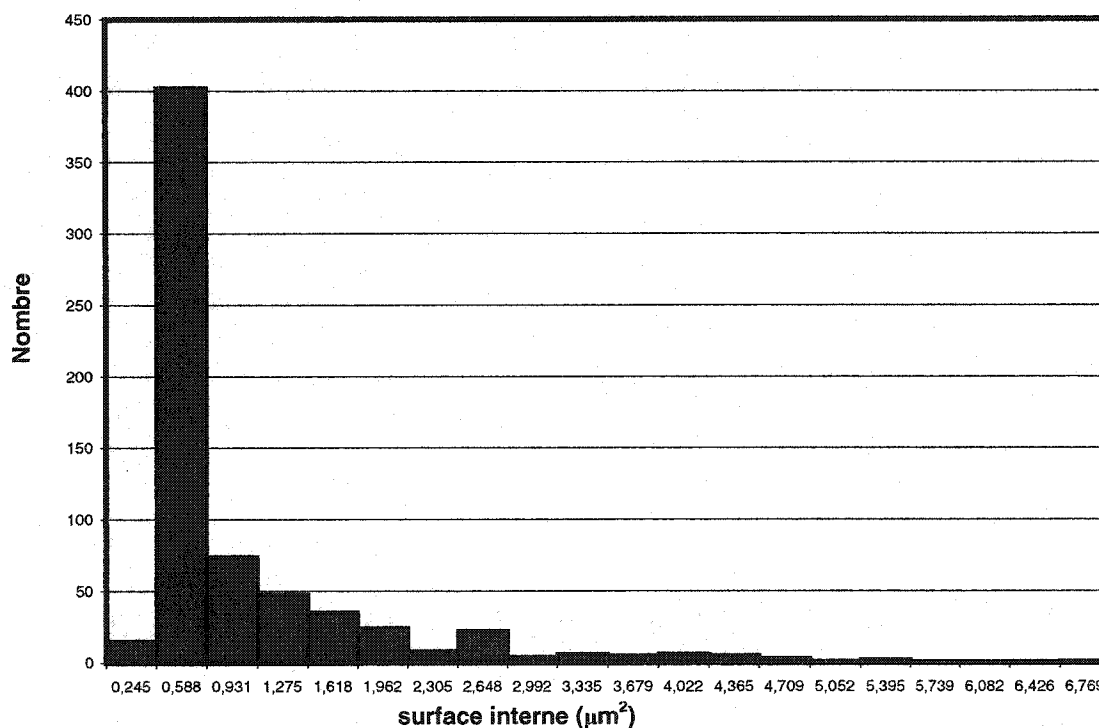


Figure 4.18 – Distribution de la surface interne des pores en nombre

La concentration des petites valeurs est plus importante que dans les autres distributions. En effet, plus de 72 % des pores ont leur surface interne située entre $0,41 \mu\text{m}^2$ et $0,76 \mu\text{m}^2$, soit une seule des 20 tranches.

Examinons à présent la distribution du ratio taille de col / surface interne présentée aux figures 4.21 et 4.22.

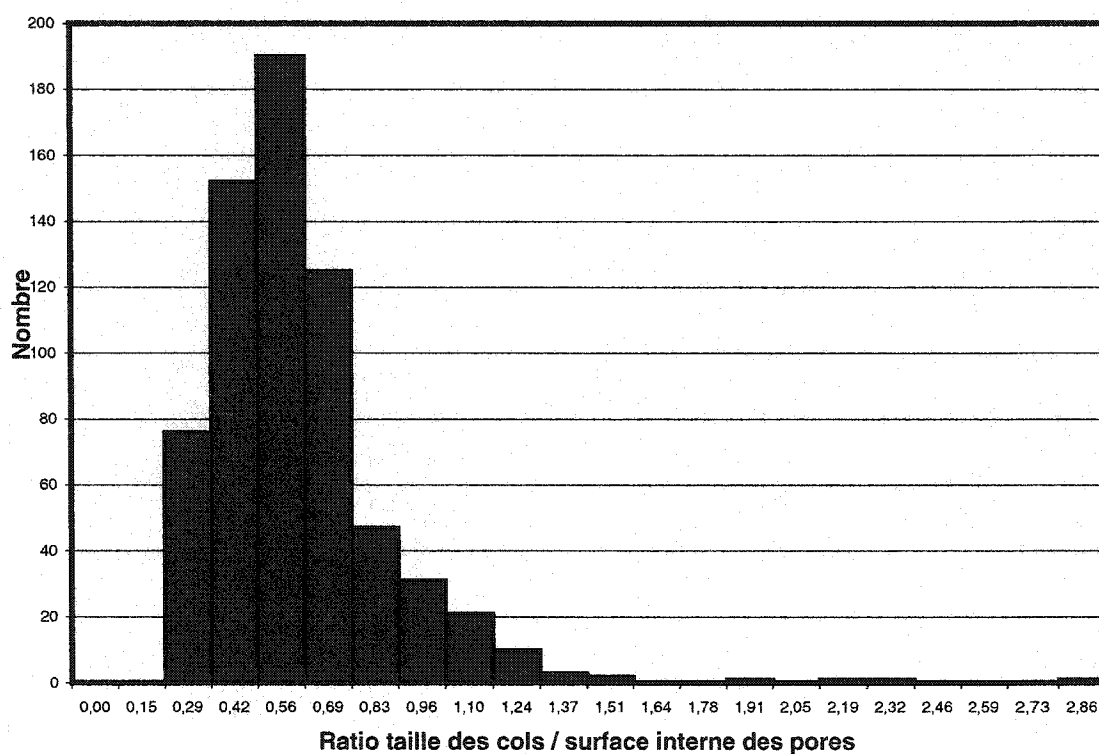


Figure 4.21 – Distribution du ratio taille des cols / surface interne des pores en nombre

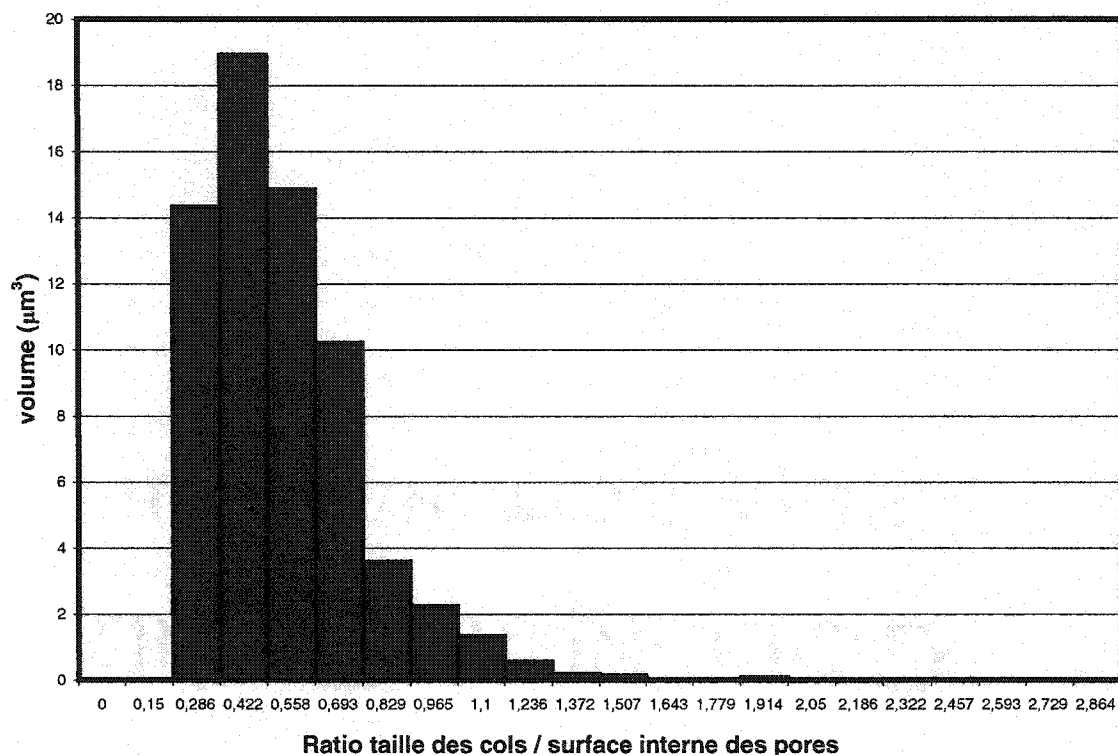


Figure 4.22 – Distribution du ratio taille des cols / surface interne des pores en volume

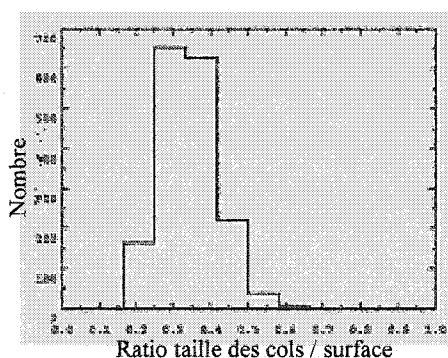


Figure 4.23 – Distribution du ratio taille des cols / surface en nombre obtenue par Toivakka et Nyfors [28]

La distribution du ratio tailles des cols / surface interne en nombre obtenue par Toivakka et Nyfors [28] a une limite inférieure d'environ 0,15 et une limite supérieure d'environ 0,65. La nôtre varie entre 0,22 et 2,87. Une quantité importante de pores, soit près de 37 %, ont un ratio au-delà de la limite supérieure obtenue par ces auteurs. Par ailleurs, cette grande quantité en nombre compte pour seulement 28 % en volume. En outre, plus le ratio est élevé moins le volume est important.

Nous avons ici une autre confirmation que le filtre que nous utilisons ne favorise pas autant l'élimination des pores de petite taille que celui utilisé par Toivakka et Nyfors [28]. Un filtre qui agit après la segmentation pourrait être une solution envisageable. Le

critère de sélection pourrait se baser sur la valeur du ratio taille des cols / surface interne des pores.

Discutons finalement de la distribution de la connectivité des pores, illustrée en 4.24 et 4.25.

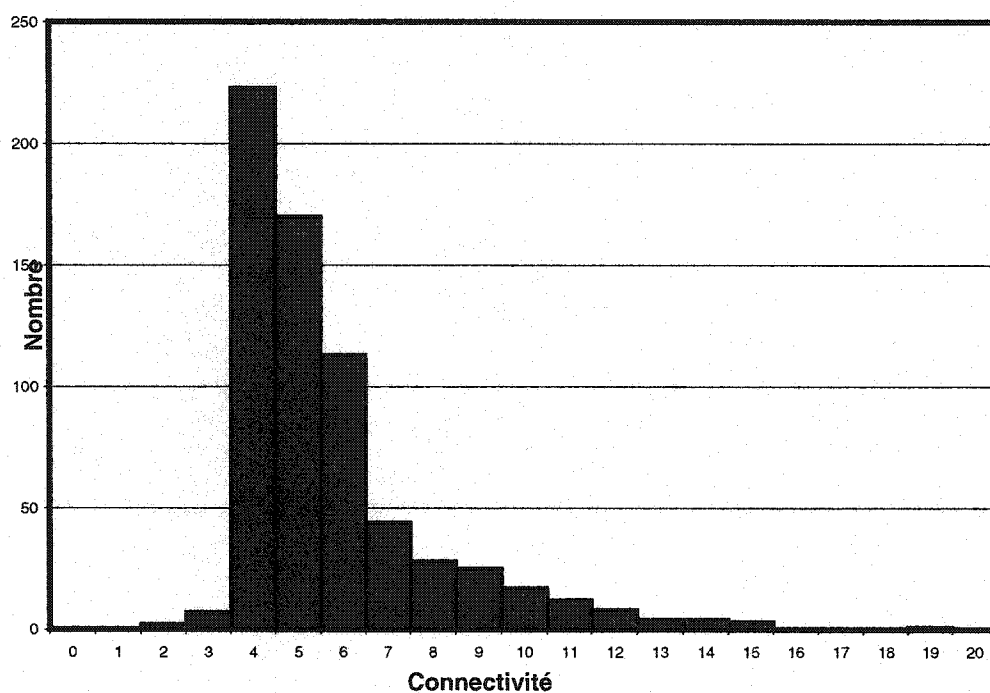


Figure 4.24 – Distribution de la connectivité des pores en nombre

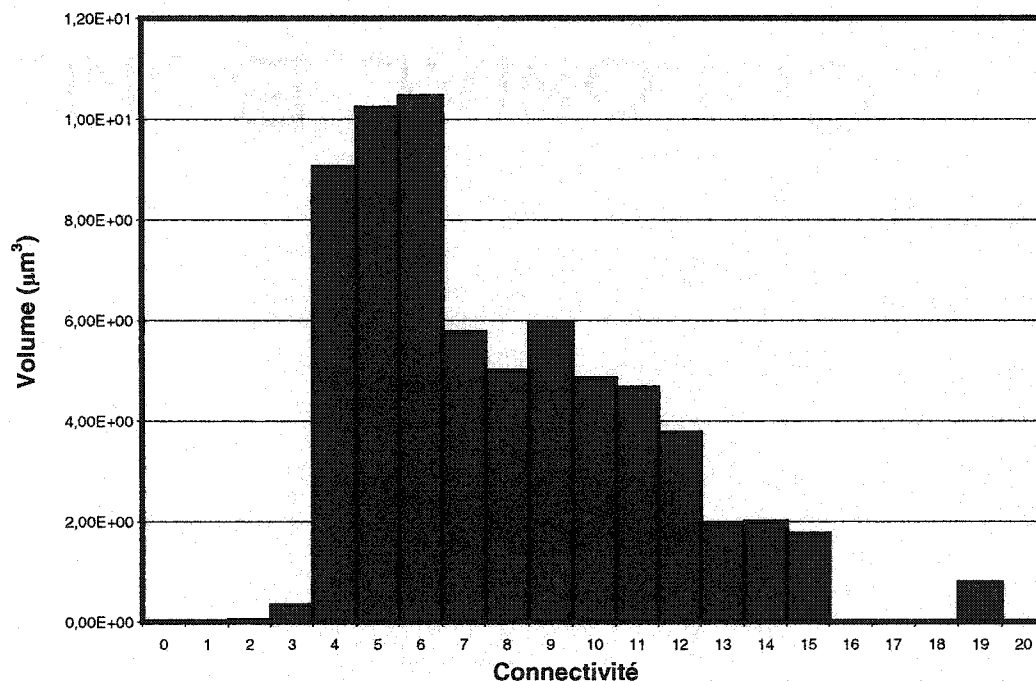


Figure 4.25 – Distribution de la connectivité en volume

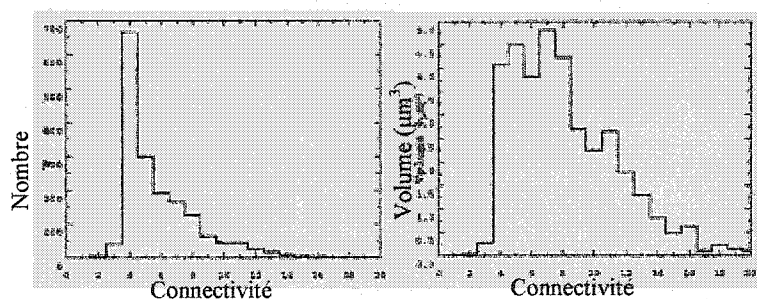


Figure 4.26 – Distribution de la connectivité des pores en nombre (à gauche) et en volume (à droite) obtenue par Toivakka et Nyfors [28]

Les deux distributions de connectivité ont la même allure que celles obtenues par Toivakka et Nyfors [28]. Dans les deux cas, la connectivité la plus importante est de quatre. Par contre, la distribution de

la connectivité en volume est un peu plus tassée à gauche dans notre cas.

La distribution de la connectivité nous indique qu'il n'y a pas de cavité ou de cul-de-sac. En effet, aucun pore n'a une connectivité inférieure à 2.

Tous les critères que nous venons de présenter sont liés aux caractéristiques macroscopiques de la feuille de papier couché. En particulier, elles nous donnent des indices sur la manière dont l'écoulement de l'encre s'effectuera à l'intérieur de la couche et ce, sur toute son épaisseur.

Par exemple, une couche de pigments dont une quantité importante de pores ont un faible ratio taille des cols / surface interne avec des cols de faible taille aura une faible perméabilité. Une faible connectivité est également un indice de faible perméabilité. Finalement, les données en nombre et en volume sont complémentaires. En effet, pour un même nombre de pores, la perméabilité sera d'autant plus grande si le volume occupé par des pores ayant un faible rapport taille des cols / surface interne des pores est plus faible.

Dans le cas que nous avons étudié, on peut croire à un réseau de faible perméabilité en raison de la très grande concentration de pores de petite taille ayant de petits cols, de petits ratios taille des cols / surface interne et de faibles connectivité. Par contre, le filtre utilisé pour déterminer les faux centres de pores a une influence sur les résultats, comme nous avons pu le constater.

Plusieurs améliorations peuvent être apportés à l'algorithme de segmentation actuel, notamment en ce qui concerne le filtre et la technique d'évaluation des surfaces. Il serait aussi intéressant d'étudier la caractérisation d'entassement polydisperses de particules sphériques et ellipsoïdales.

4.3 Comparaison des méthodes de la descente la plus rapide, de Monte Carlo et des éléments discrets

Nous pouvons à présent passer à la prochaine étape de notre analyse, c'est-à-dire la comparaison des résultats obtenus par trois différents modèles de déposition de pigments. Commençons tout d'abord par étudier plus en profondeur la méthode des éléments discrets en observant l'influence des certains paramètres de cette méthode sur les résultats de porosité sur des entassements monodisperses.

4.3.1 La méthode des éléments discrets – les entassements monodisperses

Nous allons tout d'abord comparer la porosité d'entassements monodisperses générés par la méthode des éléments discrets à celles obtenues à l'aide de la méthode de la descente la plus rapide par Eksi et Bousfield [45] et de la méthode de Monte Carlo par Vidal *et al.* [11]. Par ailleurs, tous ces résultats seront comparés aux valeurs expérimentales de Leskinen [40] et de Alince et Lepoutre [41].

L'entassement monodisperse généré par la méthode des éléments discrets a été obtenu à l'aide de 239 particules sphériques de 1 μm de diamètre. Des conditions périodiques ont été utilisées pour éliminer les effets de paroi. Un coefficient de frottement dynamique μ_{dyn} de 0,1 a été employé. Par ailleurs, une relaxation de 10000 itérations a été effectuée à la fin de la sédimentation pour permettre à l'entassement de se relaxer. Quelques heures de simulation ont été nécessaires pour obtenir le gâteau de particules.

La figure 4.27 illustre un entassement de particules monodisperse typique qui a été obtenu à l'aide de la méthode des éléments discrets. Dans le cas illustré, 1883 particules ont été utilisées.

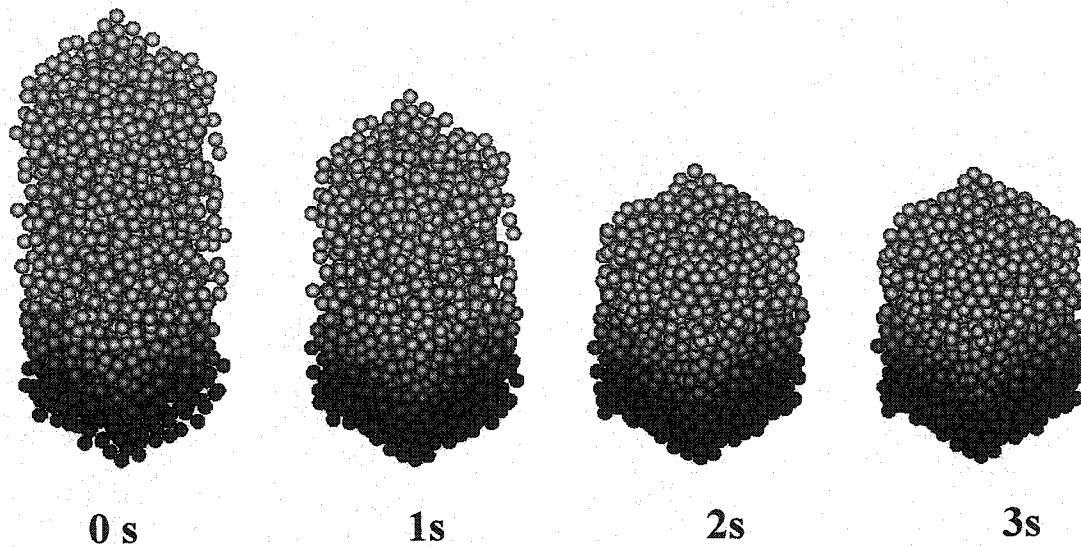


Figure 4.27 – Consolidation d'un entassement de particules monodisperse obtenu à l'aide de la méthode des éléments discrets

Nous pouvons résumer les résultats de porosité dans le tableau suivant :

Tableau 4.1 – Porosité d'entassements monodisperses obtenues par les différentes méthodes

Méthode	Porosité
Méthode des éléments discrets	39,4 %
Méthode de la descente la plus rapide (Eksi et Bousfield [45])	40 %
Méthode de Monte Carlo (Vidal <i>et al.</i> [11])	46 %
Expérimental (Leskinen [40])	36,5 %
Expérimental (Alinec et Lepoutre [41])	33 %

La méthode des éléments discrets donne la valeur de porosité la plus faible, suivie de près par la méthode de la descente la plus rapide. Elles sont supérieures aux valeurs expérimentales obtenues par Leskinen [40] et Alinec et Lepoutre [41]. Elles sont plus près des valeurs de porosité d'entassements serrés qui varie entre 35,9 % et 37,5 %. La méthode de Monte Carlo, quant à elle, donne des entassements plutôt espacés. En effet, sa porosité est supérieure à 44 %, la valeur espérée pour ce type d'entassement.

Pour la simulation avec la méthode des éléments discrets, nous avons utilisé une faible valeur de μ_D , le coefficient de frottement dynamique. Ceci explique que nous obtenions une faible valeur de porosité. Nous avons effectué une analyse de variance sur la porosité à l'aide du logiciel Statistica. Elle nous a indiqué que ce paramètre est un des plus significatifs quant à la variabilité de la porosité. En effet, une augmentation de ce coefficient de frottement entraîne une augmentation de la porosité. Nous pouvons expliquer cette tendance par la formation de ponts, tel qu'illustré à la figure 4.28.

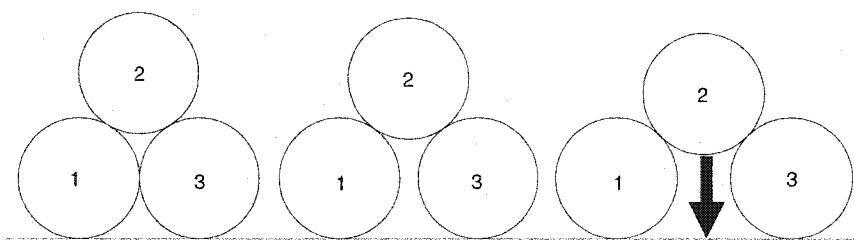


Figure 4.28 – Phénomène de pont

La configuration de gauche et celle du centre sont stables si les forces de friction sont suffisantes pour supporter le poids de la particule 2. La configuration de droite est instable, car l'angle critique entre les particules 1 et 2 et les particules 2 et 3 a été dépassé. Ainsi, la composante horizontale du poids sur les particules du bas est plus importante que les forces de friction, ce qui fait que la particule 2 pousse les deux autres particules latéralement pour s'insérer dans l'espace ainsi créé. L'angle critique dépend des coefficients de friction utilisés. Plus la valeur du coefficient de frottement est importante, plus l'angle critique est grand, ce qui augmente l'espace créé par la formation de ponts et, par le fait même, la porosité. Des simulations pour différentes valeurs de μ_{dyn} ont donné des porosités entre 35 % et 41 % [19].

Nous discuterons plus en profondeur des deux autres méthodes dans la deuxième partie de cette sous-section.

4.3.2 Porosité d'entassements bidisperses en fonction du pourcentage de petites sphères

Nous avons étudié le comportement de la méthode des éléments discrets pour un entassement monodisperse. Nous avons comparé les résultats obtenus à ceux d'autres

méthodes ainsi qu'à des résultats expérimentaux. Considérons maintenant le cas d'entassements bidisperses.

Nous présentons à la figure 4.29 les résultats de porosité obtenus dans ce travail par la méthode des éléments discrets ainsi que ceux obtenus par Eksi et Bousfield [45] par la méthode de la descente la plus rapide et par Vidal *et al.* [11] à l'aide de la méthode de Monte Carlo. On retrouve aussi sur ce graphique des valeurs de porosité pour des particules de polystyrène obtenues expérimentalement par Alince et Lepoutre [41] à l'aide d'une technique de porosimétrie.

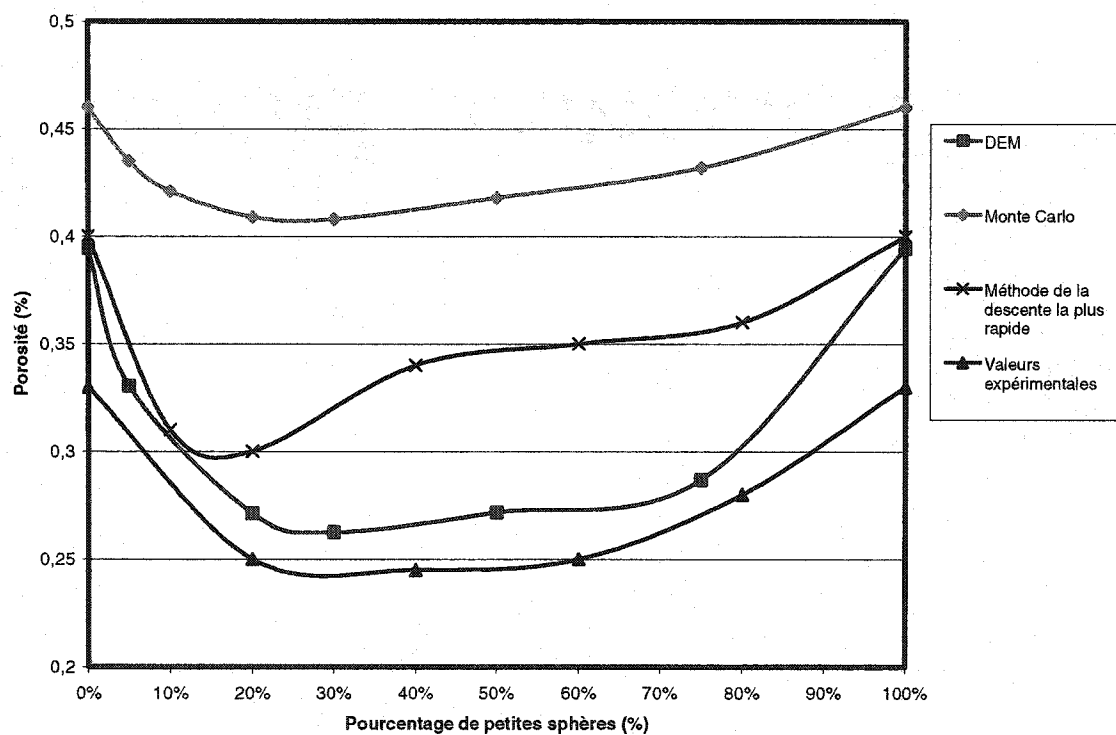


Figure 4.29 – Porosité en fonction du pourcentage de petites sphères pour des entassements bidisperses avec un ratio de taille de 5

Toutes les courbes présentées ont en commun de diminuer pour atteindre un minimum puis d'augmenter lorsque le pourcentage de petites sphères augmente. Comme on peut le constater, la courbe obtenue par la méthode des éléments discrets est de loin celle qui s'approche le mieux de la courbe expérimentale. On remarque de plus que le minimum prédit est semblable à celui des valeurs expérimentales. Elle varie entre son minimum (26 %) situé à 25 % - 30 % de petites sphères et son maximum (39 %) obtenu pour un entassement monodisperse.

La méthode de Monte Carlo, quant à elle, donne toujours des valeurs qui sont de beaucoup supérieures aux données expérimentales. Son minimum est toutefois situé à un contenu de petites sphères de près de 30 %, comme pour la méthode des éléments discrets.

Finalement, la méthode de la descente la plus rapide nous donne une courbe située entre celles des deux autres méthodes. Par ailleurs, les valeurs de porosités sont près de celles de la méthode des éléments discrets jusqu'à un contenu de petites sphères de 15 %.

Ainsi, nous pouvons conclure que les valeurs obtenues par la méthode des éléments discrets sont satisfaisantes puisqu'elles tombent près des valeurs expérimentales. Comme nous l'avons déjà mentionné, ces valeurs peuvent être modifiées en changeant par exemple le coefficient de frottement, ce qui est un des avantages de la méthode. Elle peut ainsi considérer le type de matériau utilisé dans la composition de la sauce de couchage.

Par ailleurs, les différences dans les porosités calculées par les modèles peuvent être expliquées. La méthode des éléments discrets est la seule qui permet un contact entre les particules qui ne soit pas instantané. Ce contact favorise entre autres la percolation des petites particules, ce qui explique que les résultats obtenus par cette méthode soient excellents.

Le contact instantané permis dans le modèle de la descente la plus rapide permet également aux particules de s'approcher un peu plus que dans le cas de la méthode de Monte Carlo, où les contacts ne sont pas du tout permis. Les phénomènes de ponts stables, tels qu'illustrés à la figure 4.28, inhérents aux deux méthodes stochastiques sont plus importants que dans la méthode des éléments discrets (sauf si une grande valeur du coefficient de frottement est utilisée).

Bref, les méthodes de Monte Carlo et des éléments discrets sont aux deux extrémités du spectre concernant le type d'entassement obtenu, alors que la méthode de la descente la plus rapide est entre les deux. Par ailleurs, la méthode des éléments discrets est un modèle versatile, puisque les paramètres peuvent être ajustés selon le type de matériau. La prochaine étape serait de comparer les résultats obtenus par les trois méthodes pour des entassements polydisperses. Une étude plus approfondie du réseau de pores formé par les entassements bidisperses serait également souhaitable. De plus, les tendances des résultats expérimentaux des caractéristiques macroscopiques du papier couché devraient être comparées aux tendances des résultats numériques des caractéristiques microscopiques afin d'établir des relations entre eux.

CHAPITRE 5

5. Conclusions et recommandations

Le présent travail nous a permis de développer des méthodes de caractérisations d'entassements de particules obtenus par divers modèles simulant la déposition de pigments de forme sphérique et ellipsoïdale lors du procédé de couchage du papier. Ces méthodes nous permettent le calcul de la porosité, la microrugosité et la hauteur moyenne du gâteau de pigments. Elles permettent de plus de déterminer l'orientation des particules dans le cas d'ellipsoïdes.

L'algorithme de segmentation des pores a été validé à l'aide d'entassements réguliers (cubique et hexagonal) et d'un entassement aléatoire. Cette étape nous a permis de vérifier que, bien qu'il soit imparfait, notre outil nous permet d'obtenir diverses caractéristiques du réseau poreux. En effet, il segmente l'espace poreux en unités spécifiques, à savoir les pores. Il calcule par la suite la taille des cols, le volume, la surface interne et la connectivité des pores ainsi que les diverses distributions qui leur sont associées. Il détermine de plus la distribution de la taille des pores en fonction de la hauteur dans l'entassement de particules.

Nous avons constaté que les surfaces ont tendance à être surestimées et ce à cause de la nature même de l'algorithme de calcul et de la représentation des cols en dents de scie. Par ailleurs, l'erreur sur la surface interne semble être fonction du volume du pore. De plus, le nombre de centres de pores semble être surestimé, ce qui augmente la concentration de pores de petite taille à l'intérieur de l'entassement. C'est une erreur qui est difficile à contrôler, étant donné que la segmentation d'images est un problème

complexe. Il est par conséquent ardu de trouver un critère de sélection qui élimine les faux centres de pores tout en conservant les vrais.

Les futurs travaux concernant l'algorithme de segmentation et de calcul des caractéristiques du réseau poreux devraient se pencher sur la problématique de l'évaluation des surfaces, car celles-ci sont surévaluées.

Par ailleurs, le nombre de centres de pores est surestimé, ce qui cause une erreur dans les statistiques de distributions. La prochaine étape concernant cet aspect serait de trouver un meilleur critère de sélection pour les centres de pores. L'une des voies à explorer est le ratio taille des cols / surfaces une fois que la segmentation a été complétée.

Finalement, les algorithmes développés au cours de ce travail pourront être utilisés pour caractériser des entassements polydisperses simulés par des modèles de déposition de pigments telle la méthode des éléments discrets. Une étape supplémentaire de validation sera nécessaire pour le cas d'entassements d'ellipsoïdes.

Concernant les modèles de déposition des pigments, nous avons constaté que la méthode des éléments discrets est versatile puisque les divers paramètres peuvent servir à contrôler les caractéristiques de l'entassement final, notamment la porosité. Le coefficient de frottement intervenant dans le modèle est en fait un paramètre physique qui dépend du matériau.

Les résultats de porosité sur des entassements bidisperses obtenus par la méthode des éléments discrets sont très satisfaisants. En effet, ils sont près des résultats expérimentaux obtenus par Alince et Lepoutre [41].

Avec la valeur du coefficient de frottement dynamique utilisée, ce modèle fournit des entassements plutôt serrés, tandis que la méthode de Monte Carlo est à l'autre bout du

spectre avec des entassements espacés. La méthode de la descente la plus rapide, elle, donne des résultats entre les deux. La différence est expliquée par le fait que la méthode des éléments discrets permet un contact non instantané entre les particules, ce qui est beaucoup plus réaliste et qui permet aux petites particules de percoler entre les plus grosses. Une autre explication vient du fait qu'avec les méthodes stochastiques, tous les ponts qui sont formés en cours de simulation sont stables, alors qu'avec la méthode des éléments discrets, cela dépend de la valeur du coefficient de frottement.

Les prochaines étapes concernant le développement de la méthode des éléments discrets devraient se pencher sur l'étude plus approfondie de l'influence de ces paramètres sur les caractéristiques des entassements bidisperses et polydisperses. L'ajout de nouvelles forces telles les forces colloïdales qui peuvent jouer un rôle pour des particules de petite taille et l'utilisation de particules ellipsoïdales devrait également être envisagés.

CHAPITRE 6

6- Références

- 1- L'ASSOCIATION DES INDUSTRIES FORESTIÈRES DU QUÉBEC. AIFQ – Statistiques – Pâtes et Papiers – Production. In Site de l'AIFQ. [En ligne].
<http://www.aifq.qc.ca/francais/stats/pates01.html>
(Page consultée le 10 mars 2003)
- 2- FOREST PRODUCTS ASSOCIATION OF CANADA. *2001 Annual Review*. [En ligne]. Ottawa : The Forest Products Association of Canada. 22 p.
http://www.cppa.org/cgi-bin/view_pdf.cgi/FPAC2001.PDF
(Page consultée le 10 mars 2003)
- 3- GORNIK, M., NOVAK, G., GOVERNAK, E. 1997. « Modelling coated paper properties : application of neural networks ». *International Journal of Systems Science*. 28:9. 865-870.
- 4- ORR, Genevieve, SCHRAUDOLPH, Nici, CUMMINS, Fred. 1999. CS-449 – Neural Networks (Lecture Notes). In *Willamette* (site web de l'Université Willamette, Salem, Oregon). [En ligne].
<http://www.willamette.edu/~gorr/classes/cs449/intro.html>
(Page consultée le 7 avril 2003)
- 5- DOLMATOVA, Ludmilla, RUCKBUSCH, Cyril, DUPUY, Nathalie, HUVENNE, Jean-Pierre, LEGRAND, Pierre. 1997. « Quantitative analysis of paper coating

- using artificial neural network ». *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 36. 125-140.
- 6- SMOOK, Gary A. 1998. *Manuel du technicien et de la technicienne en pâtes et papiers, deuxième édition*. Montréal : Centre collégial de développement de matériel didactique (CCDMD). 456p
- 7- JULLIEN, R. 1987. « Simple Three-Dimensional Models for Ballistic Deposition with Restructuring ». *Europhysics Letters*. 4:12. 1385-1390.
- 8- EKSI, Guner. 1995. *Modeling of Coating Structure Development*. 127p. Mémoire de maîtrise en génie chimique, University of Maine.
- 9- BERTRAND, F., DESAULNIERS, E. LECLAIRE, L.-A., VIDAL, D. 2002.
« Deterministic and Probabilistic Numerical Models for the Packing of Spherical Pigments in Paper Coating ». *CSGCh Annual Meeting 2002*. Vancouver, Canada.
- 10- ROSATO, A., PRINZ, F., STANDBURG, K.J., SWENDSEN, R. 1986. « Monte Carlo Simulation of Particulate Matter Segregation ». *Powder Technology*. 49:59.
- 11- VIDAL, David, ZOU, Xuejun, UESAKA, Tetsu. 2000. « Modelling Coating Structure Development Using a Monte-Carlo Deposition Method. » *TAPPI Advanced Coating Fundamentals Symposium Proceedings*. San Diego. 329.
- 12- VIDAL, David, ZOU, Xuejun, UESAKA, Tetsu. 2003. « Modelling Coating Structure Development: Monte-Carlo Deposition of Particles with Irregular Shapes » *TAPPI Advanced Coating Fundamentals Symposium Proceedings*. Chicago.

- 13- BRADY, J.F., BOSSIS, G. 1985. « The rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation ». *Journal of Fluid Mechanics*. 155. 105-115.

- 14- BARBESTA, Fabio, BOUSFIELD, Douglas W., RIGDAHL, Mikael. 2001. « Modeling of rheological properties of coating colors ». *Journal of Rheology*. 45:1. 139-160.

- 15- ROMAGNOLI, Aldo, BOUSFIELD, Douglas W. 1999. "Particle motion modeling of oblate spheroids in complex flow geometries". *TAPPI Journal*. 82:11. 135-141.

- 16- TOIVAKKA, Martti. 2001. "A simulation model to predict coating coverage". *Paperi ja Puu – Paper and Timber*. 83 : 1. 34-41.

- 17- BARBESTA, Fabio. 2000. *Modelling of Rheological Properties of Coating Colours*. [En ligne]. 39p. Thèse pour le diplôme de licencié en Chimie et Technologie des Pâtes et Papiers, Kungl Tekniska Högskolan, Stockholm, Suède.
http://www.pmt.kth.se/fpirc/Download/Fabio_Barbesta_00.pdf
 (Page consultée le 25 mars 2003)

- 18- GANGE, Timothy. 2002. *Discrete element simulations of pigment packings and a blade mixer*. 76p. Rapport d'un projet de recherche effectué dans le cadre d'un échange entre l'École Polytechnique de Montréal et l'Université de Bath, en Angleterre.

- 19- BERTRAND, F., GANGE, T., DESAULNIERS, E., VIDAL, D., HAYES, R.E. « Simulation of the Consolidation of Paper Coating Structures : Should One Use Probabilistic or Deterministic Models? ». Soumis à *Computers and Chemical Engineering*.

- 20- CUNDALL, P. A., STRACK, O. D. L. 1979. « A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies ». *Géotechnique*. 29:1. 47-65.
- 21- MÜLLER, Didier. 1997. *Techniques informatiques efficaces pour la simulation de milieux granulaires par des méthodes d'éléments distincts*. 186p. Thèse de doctorat en mathématiques, École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- 22- RAJAMANI, R.K., MISHRA, B.K, VENUGOPAL, R., DATTA, A. 2000. « Discrete Element Analysis of Tumbling Mills ». *Powder Technology*. 109. 105-112.
- 23- DESAULNIERS, Evelyne. 2001. *Modélisation de l'entassement des pigments lors du couchage du papier : analyse et caractérisation*. 24p. Projet de Fins d'Études en Génie Chimique, École Polytechnique de Montréal
- 24- WEISSTEIN, Eric. 2003. Rotation Matrix. In *Eric Weisstein's World of Mathematics*. [En ligne]. <http://mathworld.wolfram.com/RotationMatrix.html>
(Page consultée le 15 avril 2003)
- 25- BUCHALTER, B. J., BRADLEY, R. M. 1992. « Orientational order in random packings of ellipses ». *Physical Review A*. 46:6. 3046-3056.
- 26- BUCHALTER, B. J., BRADLEY, R. M. 1994. « Orientational Order in Amorphous Packings of Ellipsoids ». *Europhysics Letters*. 26:3. 159-164.
- 27- COEHLER, D., THOVERT, J.-F., ADLER, P. M. 1997. « Geometrical and transport properties of random packings of spheres and aspherical particles ». *Physical Review E*. 55:2. 1959-1978.

- 28- TOIVAKKA, M., NYFORS, K. 2001. « Pore Space Characterization of Coating Layers ». *TAPPI Journal*. 84:3. 1-16.

- 29- SASTRY, Srikanth, CORTI, David S., DEBENEDETTI, Pablo G., STILLINGER, Frank H. 1997. « Statistical geometry of particle packings. I. Algorithm for exact determination of connectivity, volume, and surface areas of void space in monodisperse and polydisperse sphere packings ». *Physical review E*. 56:5. 5524-5532.

- 30- GARCIA, David. 2002. *Contribution à l'élaboration de modèles pour l'optimisation du procédé d'injection de polymères*. 232p. Thèse de doctorat en Informatique, Analyse et Traitement d'images, Université de Saint-Étienne

- 31- SERRA, J. 1969. *Introduction à la morphologie mathématique*. Paris : Ecole nationale supérieure des mines de Paris. 160p.

- 32- SERRA, Jean. 2000. Cours de morphologie mathématique. In *Centre de Morphologie Mathématique de l'École des Mines de Paris*. [En ligne].
http://cmm.ensmp.fr/~serra/cours/nav_chplst_fr.htm
 (Page consultée le 7 mai 2003)

- 33- GONZALEZ, Rafael C., WOODS, Richard E. 2002. *Digital Image Processing*. Second Edition. New Jersey : Prentice Hall. 793p.

- 34- VINCENT, Luc, DOUGHERTY, Edward R. 1994. « Morphological Segmentation for Textures and Particles ». *Digital Image Processing Methods*. New York : Marcel Dekker, Inc. P. 43-102.

- 35- VINCENT, Luc, SOILLE, Pierre. 1991. « Watersheds in Digital Space : An Efficient Algorithm Based on Immersion Simulations ». *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 13 : 6. 583-597.
- 36- BALDWIN, Christopher A., SEDERMAN, Andrew, J., MANTEL, Michael D., ALEXANDER, Paul, GLADDEN, Lynn F. 1996. « Determination and Characterization of the Structure of a Pore Space from 3D Volume Images » *Journal of Colloid and Interface Science*. 181. 79-92.
- 37- VENKATARANGAN, Arun Bhaskar. 2000. *Geometric and Statistical Analysis of Porous Media*. 113p. Thèse de doctorat en Mathématiques appliquées et statistiques, State University of New York at Stony Brook
- 38- THOVERT, J. F., SALLES, J., ALDER, P. M. 1993. « Computerized characterization of the geometry of real porous media: their discretization, analysis and interpretation ». *Journal of Microscopy*. 170:1. 65-79.
- 39- LEE, Ta-Chih, KASHYAP, Rangasami L. 1994. « Building Skeleton Models via 3-D Medial Surface/Axis Thinning Algorithm ». *CVGIP: Graphical Models and Image Processing*. 56:6. 462-478.
- 40- LESKINEN, Anna Maija. 1987. « Layer structure in model coatings ». *TAPPI Journal*. 70:12. 101-106.
- 41- ALINCE, B., LEPOUTRE, P. 1983. « Flow behavior of pigment blends ». *TAPPI Journal*. 66:11. 57-60.
- 42- EBERLY, David H. 2001. *3D Game Engine Design, A Practical Approach to Real-Time Computer Graphics*. San Francisco : Morgan Kaufmann Publishers. 561p.

- 43- FRIEDMAN, Erich. Spheres in cube. In *Stetson University*. [En ligne].
<http://www.stetson.edu/~efriedma/sphincub/>
(Page consultée le 28 mai 2003)
- 44- WEISSTEIN, Eric. 2003. Hexagonal Close Packing. In *Eric Weisstein's World of Mathematics*. [En ligne].
<http://mathworld.wolfram.com/HexagonalClosePacking.html>
(Page consultée le 28 mai 2003)
- 45- EKSI, G., BOUSFIELD, D. W. 1997. « Modeling of coating structure development ». *TAPPI Journal*. 80:2. 125-135.
- 46- ZHOU, Y.C., XU, B.L., YU, A.B., ZULLI, P. 2002. « An Experimental and Numerical Study of the Angle of Repose of Coarse Spheres ». *Powder Technology*. 125. 45-54.
- 47- MENG, B. 1994. « Resolution-dependent characterization of interconnected pore systems : development and suitability of a new method ». *Materials and structures*. 27:166. 63-70.