

# INFLUENCE D'UNE DISTRIBUTION DE FIBRES MULTIMODALE SUR LA PERMEABILITE DE MEDIAS FIBREUX

E. Cabaset<sup>1\*</sup>, A. Charvet<sup>1</sup>, N. Bardin-Monnier<sup>1</sup> et D. Thomas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Université de Lorraine, CNRS, LRGP, F-54000 Nancy, France

\*Courriel de l'orateur : elise.cabaset@univ-lorraine.fr

## TITLE

**Influence of multimodal fiber diameter distribution on the permeability of fibrous media**

## RESUME

L'objectif de cette étude est d'estimer les perméabilités de médias fibreux constitués d'une distribution multimodale de diamètres de fibres. Des microstructures tridimensionnelles ont été générées à l'aide du logiciel Geodict (2022), avec des compacités variant de 0,01 à 0,20 et des diamètres de fibres s'étendant de 1,5 µm à 30 µm, suivant des distributions bimodales, trimodales, quadrimodales et décamodales. L'approche classique de prédiction de la perte de charge consiste à assimiler ces structures fibreuses complexes à des structures constituées d'un seul diamètre de fibres. S'il existe déjà dans la littérature scientifique, différentes corrélations permettant d'estimer le diamètre équivalent de telles structures fibreuses, aucune ne semble en mesure de prédire précisément la perméabilité lorsqu'elles sont combinées au modèle d'Happel modifié. Les perméabilités obtenues par simulation numérique ont ainsi permis d'introduire une nouvelle expression de diamètre équivalent et d'aboutir à une meilleure prédiction de la perméabilité d'une distribution multimodale de fibres.

## ABSTRACT

The objective of this study is to estimate the permeabilities of fibrous media composed of a multimodal distribution of fiber diameters. Three-dimensional microstructures were generated using Geodict (2022) software, with packing density varying from 0,01 to 0,2 and fiber diameters ranging from 1,5 µm to 30 µm, representing bimodal, trimodal, quadrimodal, and decamodal distributions. The conventional approach to predicting pressure drop involves assimilating these complex fibrous structures to structures composed of a single fiber diameter. Although various correlations already exist in the scientific literature for estimating the equivalent diameter of such fibrous structures, none of them appear to accurately predict permeability when combined with the modified Happel model. Then, based on the permeabilities obtained through numerical simulation, a new expression was introduced showing a better prediction of the permeability for multimodal fiber distribution.

**MOTS-CLES** : média fibreux, perméabilité, polydispersité, simulation / **KEYWORDS**: fibrous media, permeability, polydispersity, simulation

## 1. PERMEABILITE DE MEDIAS FIBREUX

La perte de charge est un paramètre essentiel pour évaluer les performances d'un média fibreux. La loi de Darcy (eq. 1) décrit l'évolution de la perte de charge à travers un média poreux à faible nombre de Reynolds d'écoulement, où  $\mu$  est la viscosité dynamique du fluide,  $U_f$  la vitesse d'écoulement superficielle,  $Z$  l'épaisseur du média poreux et  $\kappa$  la perméabilité du média.

$$\frac{\Delta P}{Z} = \frac{\mu U_f}{\kappa} \quad (\text{Eq. 1})$$

En utilisant une analyse dimensionnelle, Davies (1953) propose que la perméabilité puisse être décrite et reliée au diamètre des fibres, ainsi qu'à une fonction de compacité :

$$\kappa = \frac{d_f^2}{f(\alpha)} \quad (\text{Eq. 2})$$

Cependant, la perméabilité est difficile à obtenir expérimentalement en raison des difficultés liées à la mesure précise de l'épaisseur du média (compressibilité) et à la caractérisation de sa structure qui présente une géométrie complexe en raison de son caractère hétérogène et anisotropique.

Même si des études menées par Singha et al (2012) ont démontré que la distribution des diamètres de fibres suit généralement une loi log-normale, indépendamment de la taille des fibres ou des méthodes de production utilisées, l'analyse microscopique de structures fibreuses montre une très grande dispersité. Cette polydispersité des fibres a été peu considérée dans les études précédentes, la plupart d'entre elles se concentrant sur des cas bimodaux, c'est-à-dire des médias composés de deux diamètres distincts.

En partant de l'expression de la perméabilité de Davies, plusieurs auteurs ont étudié des modèles de diamètre équivalent dans le cas de distribution bimodale. Ainsi, la perméabilité est déterminée en considérant que la résistance due à la distribution polydispense de fibres est équivalente à celle d'une distribution monodisperse de fibres. Tucny *et al* (2022) résumant différentes expressions de diamètres équivalents dans l'équation 3 : les diamètres *cube root mean* ( $d_{0,3}$ ), *square root mean* ( $d_{0,2}$ ), *number weighted mean* ( $d_{0,1}$ ), *area weighted mean* ( $d_{1,1}$ ), *volume weighted mean* ( $d_{2,1}$ ) et *volume weighted permeability* ( $d_{2,2}$ ).  $n_i$  et  $m_i$  représentent respectivement les fractions en nombre et en masse des fibres de diamètre  $d_i$  et les coefficients  $\alpha$  et  $\gamma$  dépendent du diamètre équivalent sélectionné.

$$d_{eq} = d_{\alpha,\gamma} = \left( \frac{\sum_i n_i d_i^{\alpha+\gamma}}{\sum_i n_i d_i^\alpha} \right)^{1/\gamma} = \left( \frac{\sum_i m_i d_i^{\alpha+\gamma-2}}{\sum_i m_i d_i^{\alpha-2}} \right)^{1/\gamma} \quad (\text{Eq. 3})$$

Récemment, Thomas *et al* (2023.a et 2023.b) ont réalisé une étude sur les différentes fonctions de compacité  $f(\alpha)$  existantes dans la littérature. Une meilleure prédiction de la perméabilité de médias contenant des fibres monodispersées a été démontrée en utilisant le modèle d'Happel modifié (eq. 4). Après intégration d'un diamètre équivalent, ce nouveau modèle a également généré un écart relatif très faible par rapport aux perméabilités simulées sur des médias ayant des distributions de tailles de fibres obéissant à une loi normale ou log-normale.

$$f(\alpha) = \frac{(5/2)^{\frac{1}{4}}}{32 \alpha} \left( -\ln(\alpha) + \frac{\alpha^2 - 1}{\alpha^2 + 1} \right) \quad (\text{Eq. 4})$$

Ainsi, pour cette étude, le modèle d'Happel modifié sera utilisé pour étudier les différentes expressions de diamètre équivalent précédemment présentées, afin d'estimer la perméabilité d'un média fibreux présentant une distribution bimodale à multimodale de fibres.

## 2. SIMULATION NUMERIQUE

Une des alternatives pour surmonter les possibles biais expérimentaux consiste à recourir à des outils numériques, tels que le logiciel Geodict (2022), afin de générer des structures parfaitement caractérisées. Différentes simulations ont été menées pour des microstructures composées de deux diamètres (distribution bimodale) ou de plusieurs diamètres (distribution trimodale, quadrimodale à décmodale).

Ce logiciel permet la création de microstructures avec une distribution aléatoire de fibres dans le domaine de simulation, tout en respectant différentes caractéristiques spécifiées. Afin de couvrir une large plage, tout en évitant les phénomènes de glissement, des diamètres allant de 1,5  $\mu\text{m}$  à 30  $\mu\text{m}$  ont été sélectionnés, avec des compacités de 1 %, 5 %, 12 % ou 20 %. La fraction massique/volumique  $m_i$  correspondant à un diamètre  $d_i$  est fixée.

L'initialisation de la génération d'une structure s'effectue à travers une fonction aléatoire nommée *random seed* (RS). Utiliser différentes valeurs de RS permet de générer des structures avec des arrangements de fibres variés, tout en préservant leurs propriétés macroscopiques. Ainsi, pour chaque microstructure, 5 simulations ont été effectuées avec des RS différents, permettant de calculer une perméabilité moyenne pour chaque type de structure.

Une attention particulière a été accordée aux paramètres liés à la construction de la structure, tels que la taille des voxels (pixels volumétriques), le nombre de voxels dans les trois dimensions et l'orientation des fibres. L'objectif est de décrire précisément l'écoulement tout en maintenant des temps de simulation raisonnables et en minimisant l'espace de stockage requis.

Par la suite, l'écoulement à travers la microstructure générée est simulé. Etant donné que l'écoulement est considéré comme stationnaire, il est donc régi par l'équation de Stokes (eq. 5), ainsi que par l'équation de conservation de la masse (eq. 6). Des conditions aux limites périodiques sont appliquées, car nos simulations sont effectuées sur un petit échantillon du milieu.

$$\mu \Delta \vec{u} - \Delta \vec{p} = 0 \quad (\text{Eq. 5})$$

$$\vec{\Delta} \cdot \vec{u} = 0 \quad (\text{Eq. 6})$$

Afin de résoudre ce système d'équations partielles, le solveur Left Identity Right (LIR) est utilisé. Basé sur une grille adaptative non uniforme, il nécessite peu de mémoire vive de la part de l'ordinateur. Le logiciel simule ainsi la perte de charge pour une vitesse de fluide donnée, à partir de laquelle la perméabilité de la microstructure est déduite.

### 3. RESULTATS

#### 3.1. Modèles de la littérature

Les modèles de la littérature ont tout d'abord été comparés aux simulations de perméabilité de microstructures présentant une distribution bimodale de fibres. Des couples de diamètres, caractérisés par un rapport de diamètre épais ( $d_e$ ) sur fin ( $d_f$ )  $R_{cf}$  compris entre 3 et 8, ont été sélectionnés. Ainsi, ces couples de diamètres ont été déterminés de manière à obtenir une répartition homogène dans le plan d'expériences, que ce soit en termes de compacité, du rapport  $R_{cf}$  des diamètres, ou de la différence entre  $d_e$  et  $d_f$ . En tout, 60 valeurs de perméabilité moyenne ont été obtenues pour différentes structures bimodales, ce qui équivaut à un total de 300 simulations. Les perméabilités simulées et celles issues du modèle d'Happel modifié combiné à différents diamètres équivalents sont comparées en figure 1 et 2.

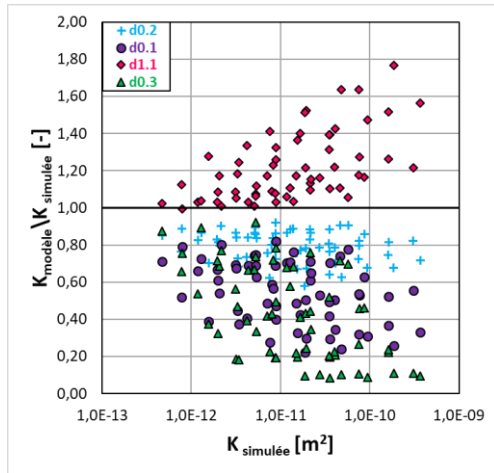


Figure 1. Comparaison des perméabilités obtenues pour des diamètres équivalents ( $d_{0,2}$ ,  $d_{0,1}$ ,  $d_{1,1}$ ,  $d_{0,3}$ ) avec les données simulées

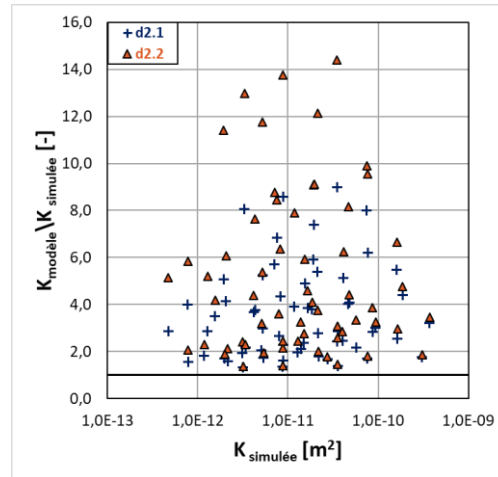


Figure 2. Comparaison des perméabilités obtenues pour des diamètres équivalents ( $d_{2,1}$  et  $d_{2,2}$ ) avec les données simulées

Les rapports de perméabilité simulée sur perméabilité théorique sont très dispersés, comme le montrent les figures 1 et 2. Pour évaluer qualitativement les différents modèles de diamètre équivalent, des calculs d'erreur relative moyenne (MRE) ont été réalisés (eq. 7).

$$MRE = \frac{1}{N} \sum_i \frac{|K_i^{simulée} - K_i^{modèle}|}{K_i^{simulée}} \quad (\text{Eq. 7})$$

Les diamètres  $d_{0,2}$  et  $d_{1,1}$  présentent les valeurs les plus faibles de MRE, à savoir 0,21 et 0,22. En revanche, les autres diamètres affichent des résultats très dispersés et ont des MRE supérieures à 0,5. Ces résultats mettent en évidence qu'aucun diamètre équivalent de la littérature ne permet de prédire précisément la valeur de la perméabilité de médias bimodaux.

#### 3.2. Nouveau modèle de diamètre équivalent

Ainsi, un nouveau modèle de lois de mélange a été déterminé, à partir duquel un nouveau diamètre équivalent a pu être déduit (eq. 8) :

$$d_{eq} = \left[ \frac{1}{\sum_i \frac{m_i}{d_i^2}} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (\text{Eq. 8})$$

Ce nouveau diamètre a tout d'abord été utilisé pour calculer les perméabilités théoriques des microstructures simulées précédemment, caractérisées par une distribution bimodale de diamètre de fibres. La figure 3 compare les valeurs de perméabilité obtenues par simulation avec celles calculées à partir du modèle de  $f(\alpha)$  de Davies, majoritairement utilisé dans la littérature, ainsi qu'à partir du modèle d'Happel modifié. L'utilisation de ce nouveau diamètre équivalent entraîne une dispersion plus faible des ratios et le modèle d'Happel modifié s'accorde mieux avec nos valeurs, présentant un MRE de 0,052, comparé à celui de Davies, qui affiche un MRE de 0,14.

Afin d'étendre la corrélation à des médias présentant une distribution multimodale, de nouvelles simulations ont été réalisées en suivant différentes distributions :

- Des distributions trimodales avec des diamètres de 20  $\mu\text{m}$ , 6  $\mu\text{m}$  et 1,5  $\mu\text{m}$ , ainsi qu'une compacité de 20 % ou 12 %.
- Des distributions quadrimodales avec des diamètres de 20  $\mu\text{m}$ , 8  $\mu\text{m}$ , 4,5  $\mu\text{m}$  et 1,5  $\mu\text{m}$  et une compacité de 20 % ou 12%
- Des distributions décimodales, composées de structures suivant une distribution de 10 diamètres choisis aléatoirement entre 2 et 10  $\mu\text{m}$  ou entre 5 et 14  $\mu\text{m}$ , avec une compacité de 12 % ou 6 %.

La figure 4 compare les résultats de perméabilité simulée à ceux théoriques, en utilisant la nouvelle expression du diamètre équivalent et le modèle d'Happel modifié. Pour chaque type de distribution, les rapports de la perméabilité simulée sur celle théorique sont compris entre 0,9 et 1 avec un MRE inférieur à 0,08.

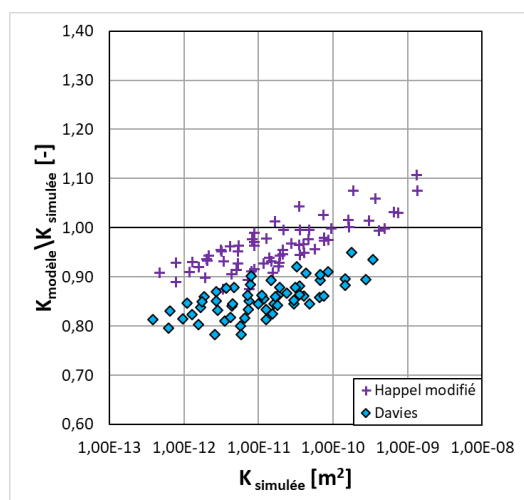


Figure 3. Comparaison des perméabilités théoriques avec les données simulées pour des distributions bimodales de fibres

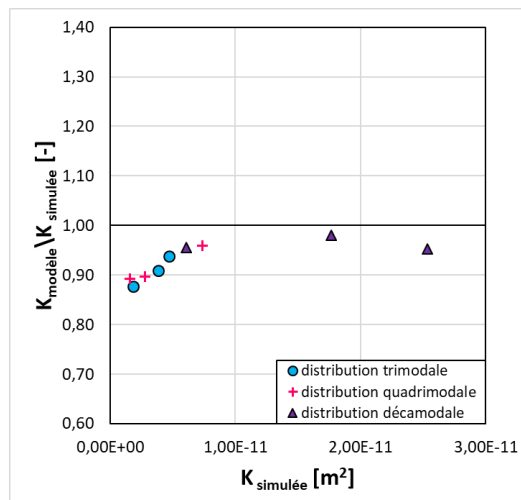


Figure 4. Comparaison des perméabilités théoriques avec les données simulées pour des distributions multimodales de fibres

#### 4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Cette étude s'est concentrée sur la détermination de la perméabilité de milieux fibreux présentant une distribution bimodale à multimodale. Afin d'éviter d'éventuels biais expérimentaux, des simulations de la perméabilité de microstructures parfaitement caractérisées ont été réalisées à l'aide du logiciel Geodict (2022). Associées au modèle d'Happel modifié, différentes expressions de diamètres équivalents issues de la littérature ont été étudiées. Les résultats simulés ont montré qu'aucun diamètre équivalent ne permet de prédire précisément la perméabilité de médias bimodaux. Ainsi, un nouveau modèle a été introduit et présente des résultats encourageants, basés sur les données numériques simulées avec Geodict. Il a notamment été démontré que ce modèle peut être étendu à des distributions multimodales de microstructures.

En raison des difficultés inhérentes à la caractérisation expérimentale de médias commerciaux, en particulier en ce qui concerne leur distribution de fibres, un protocole expérimental inspiré de la méthode de production papetière par voie humide a été développé. Pour cette réalisation de médias fibreux à façon, des fibres ont été fournies par un industriel, dans le but de vérifier expérimentalement la validité de notre corrélation pour des distributions multimodales. Les résultats obtenus jusqu'à présent sont encourageants, cependant des améliorations sont envisagées pour les méthodes de caractérisation.

*Cette étude a été menée dans le cadre du programme de recherche conjoint LIMA entre l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire et le Laboratoire Réactions et Génie des Procédés de l'Université de Lorraine/CNRS.*

Davies, C.N. (1953) The Separation of Airborne Dust and Particles, Air Filtration.

Singha, K., Maity, S., Singha, M., Paul, P., Gon, D.P. (2012) Effects of Fiber Diameter Distribution of Nonwoven Fabrics on its Properties, International Journal of Textile Science.

Tucny, J.-M., Spreutels, L., Drolet, F., Leclaire, S., Bertrand, F., Vidal, D. (2022) Impact of fiber diameter polydispersity on the permeability of fibrous media, Chemical Engineering Science.

Thomas, D., Bardin-Monnier, N., Charvet, A. (2023.a) Effect of the fibre diameter polydispersity on the permeability of nonwoven filter media, Can J Chem Eng.

Thomas, D., Bardin-Monnier, N., Charvet, A. (2023.b) Incidence de la distribution granulométrique des fibres sur la perméabilité des médias fibreux, Congrès Français sur les Aérosols 2023, Paris