# Modélisation multiphysique de l'élaboration d'une mousse bio-sourcée à base de tanins

V. Nicolas, Z. Marie, A. Celzard, V. Fierro.
Institut Jean Lamour, UMR Université de Lorraine - CNRS n°7198, Epinal, France

Objectif : Comprendre et optimiser la synthèse de mousses bio-sourcées, bon marché et ininflammables pour l'isolation du bâtiment.

Développement du modèle avec validation expérimentale



**Optimisation** 



Standardisation et industrialisation

## Description initiale du processus Formulation du mélange **Polymérisation** Extraits de tanins Réaction exothermique Mousse finale Alcool furfurylique Augmentation des propriétés Eau + Formaldéhyde mécaniques Éther diéthylique Expansion de la mousse Changement de phase (à 20°C et 1 atm) Réaction endothermique Flux de chaleur convectif Déformation libre + T<sub>a</sub>=20°C 0.012 0.01 0.008 0.006 0.004 0.002 -0.002 Paroi Pas de glissement Géométrie 2D-axisymétrique avec maillage mobile (formulation ALE)

## Développement du modèle

Conservation de la masse d'éther diéthylique (liquide vapeur)

$$\begin{split} &\frac{\partial \rho_{de;l}^{a}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_{de;l}^{a} \vec{u} \right) = -K_{de} \\ &\frac{\partial \rho_{de;g}^{a}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_{de;g}^{a} \vec{u} \right) = K_{de} \end{split}$$

Conservation de la masse de solide

$$\frac{\partial \rho_s^a}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( \rho_s^a \vec{u} \right) = 0$$

Conservation de l'énergie

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{Q} + H \vec{u} \right) = 0$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\tau} + (P - P_{atm})\vec{I} + \rho\vec{u}\vec{u}\right) = \rho\vec{g}$$

Équation de polymérisation

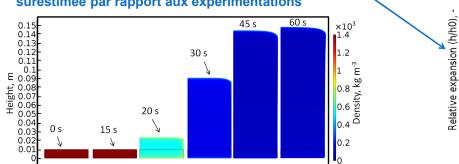
$$\frac{\partial(\xi)}{\partial t} = k \times e^{\frac{-Ea}{RT}} (A + \xi^m)(1 - \xi)$$

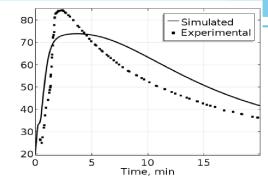
Comparaison Simulation/Expériences

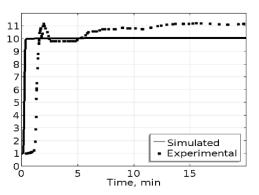
### Résultats et discussion

- **Température** 
  - Augmentation rapide durant les deux minutes, suivie par un lent refroidissement dans les deux cas (simulation et expérimental)
  - Température maximale simulée sous-estimée (74°C) par rapport aux expérimentations (85°C)
- Expansion
  - Trois comportements pour les deux cas (simulation et expériences)
    - Étape 1 : Volume constant
    - Étape 2 : Expansion rapide
    - Étape 3 : Volume constant

 Simulation plus rapide (l'accroissement commence à 20s) et surestimée par rapport aux expérimentations













#### Conclusion

- Les tendances générales sont en adéquation avec les évolutions expérimentales
- Des analyses de sensibilité et une étude paramétrique sont encore nécessaires pour de futures améliorations