

## Approches de génération de structures alvéolaires et élasticité de produits céréaliers

Sofiane Guessasma

INRA

Unité Biopolymères Interactions Assemblages (BIA)

Nantes 44316, France

[sofiane.guessasma@nantes.inra.fr](mailto:sofiane.guessasma@nantes.inra.fr)

### Résumé :

*La texture des aliments dépend intimement de la relation entre leur structure à différentes échelles et leurs propriétés mécaniques. Dans le cas de mousses solides à base de céréales, base de notre alimentation, la structure alvéolaire est fonction des variables du procédé mis en œuvre (extrusion, moulage, fermentation, cuisson) et de la composition du produit. Afin de comprendre l'influence spécifique de la structure, indépendamment de celle du matériau intrinsèque, sur les paramètres d'élasticité, différentes approches de génération de structures alvéolaires sont décrites. En particulier, deux groupes de méthodes sont testés : générations sélectives (technique RSA) et générations coopératives (Monte Carlo, Voronoi). Des calculs de paramètres d'élasticité sont reliés aux caractéristiques des structures virtuelles pour chaque approche de génération. Les résultats calculés du module d'élasticité et du coefficient de Poisson sont discutés sur la base de la théorie des solides cellulaires ouverts.*

### Abstract :

*Food texture is fully determined by the correlation between mechanical and structure properties. The cellular structure of various cereal products is a function of the process variables and compound transformations. In this paper we are concerned by 3D structure generation which best represents the main characteristics of the cellular structures after a typical fermentation process. Three methodologies are tried : Random Selection Addition (RSA), Monte Carlo (MC) and Voronoi tessellation. Elasticity parameters are calculated and discussed based on the theory of open cell structures.*

### Mots-clefs :

**Cereal food ; open-cell structures ; elasticity parameters**

### 1 Introduction

Dans un processus typique de fermentation, la libération du CO<sub>2</sub> permet la nucléation, la croissance puis la coalescence de bulles dans la pâte. Lors de la cuisson d'un produit céréalier, la structure alvéolaire est figée et dépend significativement des caractéristiques structurales obtenues lors de l'étape de fermentation notamment l'aspect ouvert des cellules, Babin *et al* (2005). Les propriétés mécaniques qui en découlent déterminent la texture de l'aliment et l'aspect sensoriel moelleux, Scanlon *et al* (2001). Dans cette étude introductive, il s'agit de développer des algorithmes de génération de structures alvéolaires qui représentent au mieux les caractéristiques structurales d'un produit fini comme la mie de pain. Un calcul par éléments finis est réalisé pour comparer les paramètres d'élasticité obtenus pour chaque méthode de génération.

## 2 Modèles de génération de structures alvéolaires

Trois approches de génération sont testées : deux sont coopératives (Monte Carlo, Voronoi) et une est dite sélective (RSA).

### 2.1 Génération par Monte Carlo

Dans cet algorithme, la structure poreuse est créée par un processus de minimisation d'énergie, Binder *et. al* (1992). L'énergie  $\xi$  du système 3D formé d'un ensemble cubique de sites s'appuie sur une généralisation du principe d'Ising pour lequel

$$\xi = - \sum_i^{NX_x NY_x NZ} H_i + \frac{1}{2} \sum_i^{NX_x NY_x NZ} \sum_j^S J \delta_{ij} \quad (1)$$

où

$H_i$  est l'énergie d'un site qui dépend de la pression interne dans un processus typique de fermentation.  $J$  est le terme d'échange qui traduit le couplage des sites d'interfaces.  $S$  est le nombre de proches voisins concernés par le terme de couplage. Dans cette étude, un couplage jusqu'au 3<sup>ème</sup> proche voisin est nécessaire pour prendre en compte l'anisotropie d'énergie créée par le réseau cubique.

Dans cette équation, le premier terme tend à augmenter la taille des bulles (diminution de la pression interne). Le deuxième terme tend à diminuer la taille des bulles à cause des forces de viscosité et/ou de la tension interfaciale. L'égalité de ses deux termes correspond au rayon critique. La croissance et la coalescence des bulles est permise par le changement d'état des sites. L'état pâte correspond au niveau 0 et le niveau bulle correspond à des entiers positifs tant que la coalescence n'est pas atteinte. Dans ce dernier cas, l'état coalescence est identifié par des labels entiers négatifs.

L'acceptation des changements d'états est soumise à la loi ergodique suivant une probabilité de la forme

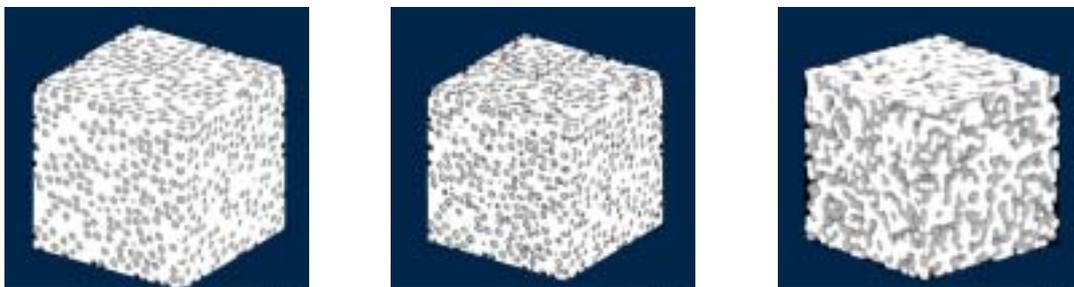
$$P = \frac{1}{1 + \exp(\beta \Delta \xi)} \quad (2)$$

où  $\beta$  est l'énergie de Boltzmann.

Cette probabilité est comparée à un nombre tiré au hasard entre 0 et 1. Le changement est définitivement accepté si le nombre tiré est supérieur à la probabilité  $P$ .

Les tentatives de changement d'états sont opérées pour un nombre qui égale le nombre de sites dans le matériau soit  $NX_x NY_x NZ$  et correspond à un pas Monte Carlo ou MCS.

La figure 1 montre l'évolution typique d'un volume de matériau alvéolaire au cours de temps de calcul.



10 MCS

30 MCS

50 MCS (seuil de percolation)

FIG. 1 – Evolution de la structure alvéolaire dans un processus Monte Carlo. (grille =  $200^3$ , nombre de bulles initiale = 3640, rayon critique = 5 voxels). La phase blanche correspond au matériau solide.

La figure 2 montre l'évolution de la densité relative ( $\rho$ ) en fonction du nombre de pas Monte Carlo et le rapport H/J.

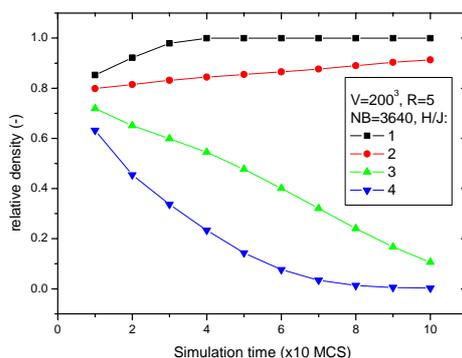


FIG. 2 – Evolution de la densité relative en fonction du rapport H/J traduisant l'effet relatif de la force motrice de volume par rapport aux forces interfaciales dans le processus Monte Carlo.

Il est intéressant de noter que lorsque le rapport H/J est faible, la croissance des bulles ne s'opère pas car la force motrice (pression du gaz) ne peut contrecarrer la viscosité de la phase solide et/ou la tension de surface, d'où l'augmentation de  $\rho$ . Pour un rapport supérieur à 2, la densité relative diminue permettant la croissance puis la coalescence des bulles.

## 2.2 Génération par RSA

La génération par RSA, Clarke *et. al* (1987), Evans (1992) ou empilement aléatoire séquentiel (Random Sequential Addition) permet de disposer des bulles les unes après les autres en contrôlant la distance inter-bulle définie par le critère de recouvrement ( $\delta$ )

$$\delta = C_{ij} - (r_i + r_j) \quad (3)$$

où  $C_{ij}$  exprime la distance séparant les sphères  $i$  et  $j$  de rayon  $r_i$  et  $r_j$ , respectivement.  $\delta$  prend des valeurs négatives pour avoir une densité relative inférieure à la limite d'empilement des sphères dures.

La figure 3 montre un exemple d'empilement réalisé par RSA et la structure alvéolaire correspondante. La densité relative est déterminée par le rayon des bulles, leur nombre et la distance de recouvrement. Ce type de génération permet de contrôler la distribution de tailles des bulles mais ne rend pas compte définitivement de la courbure des parois au voisinage des zones de coalescence.

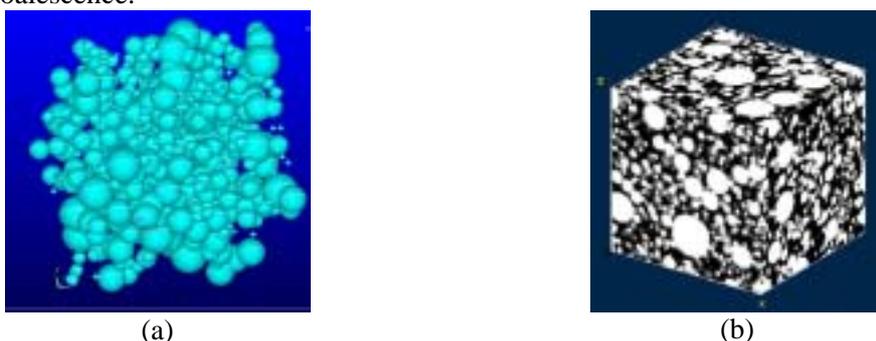


FIG. 3 – (a) Illustration de l'empilement RSA. (b) Structure alvéolaire correspondante.

## 2.3 Génération par Voronoi

La génération par Voronoi, Fortune (1992) s'appuie sur un principe similaire à la génération Monte Carlo c-à-d l'empilement coopératif. Dans cet algorithme, les centres de bulles ou embryons sont disposés au début du calcul dont le nombre contrôle la densité relative finale du matériau. Les frontières des cellules sont identifiées par les plans médiateurs si les

centres de bulles croissent avec la même vitesse. Cependant, les structures obtenues renferment des cellules fermés ayant des parois planes. Dans cette étude, une évolution de l'algorithme Voronoi est proposée pour prendre en compte l'aspect ouvert des cellules et la courbure locale des parois. La vitesse de progression de chaque bulle est adaptée en fonction inverse du volume. Une probabilité de sélection d'une bulle PR pour augmenter son rayon est établie sur ce principe

$$PR=1-\alpha\left(\frac{V_i}{V_{tot}}\right)^3 \quad (4)$$

où  $\alpha$  est un facteur adimensionnel,  $V_i$  est le volume de la bulle  $i$ ,  $V_{tot}$  est le volume total du matériau.

Le pas de calcul correspond à un nombre de tentatives de sélection de toutes les bulles dans le matériau. La figure 4 montre un exemple de développement d'une structure alvéolaire.

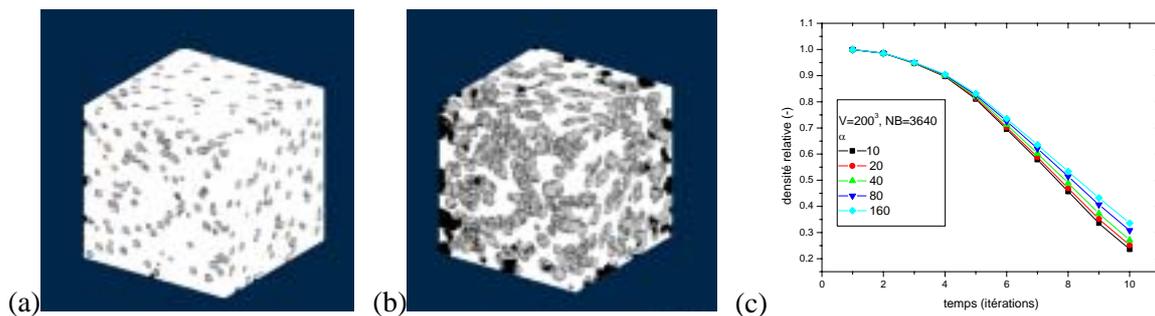


FIG. 4 – Evolution de la structure alvéolaire dans un processus Voronoi modifié. (grille =  $200^3$ , nombre de bulles initiale = 3640,  $\alpha=10$ ). (a)  $t=5$  itérations (b)  $t=10$  itérations. (c) Densité relative en fonction du temps et du paramètre  $\alpha$ .

La densité relative est fonction du nombre initial de bulles et du facteur  $\alpha$  qui traduit la portée de l'évanouissement de la croissance. La figure 4c montre l'évolution de la densité relative pour un nombre initial de bulle de 3640. La croissance est plus rapide quand  $\alpha$  est faible.

#### 4 Calculs éléments finis

Un maillage régulier est réalisé sur les structures 3D avec des éléments cubiques isotropes. La procédure comprend le remplacement de chaque voxel par un élément en gardant uniquement l'objet solide percillant. Ceci permet d'éviter les discontinuités dans le solide et les déplacements rigides. La phase solide est dotée de modules de Young intrinsèques identiques dans les trois directions X, Y et Z. Le coefficient de Poisson est constant ( $\nu_s=0.35$ ) dans ces mêmes directions. Les modules effectifs (E) sont calculés en fonction de la densité relative pour les trois approches. Afin de garantir une homogénéité des structures par rapport aux approches de générations, les paramètres suivants sont adaptés :

Le rayon critique dans la procédure Monte Carlo est inférieur au rayon final des bulles dans la méthode RSA.

Le nombre de centres de bulles dans la procédure Voronoi est égale au nombre d'embryons dans la méthode Monte Carlo.

La distance de recouvrement est minimale pour chaque densité relative dans la méthode RSA. Un test de compression typique est réalisé et correspond à une restriction des nœuds d'une face aux translations axiales et un déplacement axial imposé des nœuds de la face opposée.

#### 5 Résultats et discussion

En vertu de la loi de Gibson *et. al* (1997) sur les solides ouverts, la densité relative est liée de la manière suivante aux grandeurs élastiques

$$E=c\rho^n \quad \nu=const \quad (5)$$

où  $c$  est un prefacteur qui dépend de la géométrie de la cellule.  $n$  est un exposant qui vaut 2 pour les solides 3D ouverts dans le cas spécifique de cellules de forme isotrope et d'architecture ordonnée. De nombreux travaux remettent en cause l'unicité de l'exposant théorique faisant mention de l'effet de l'irrégularité dans la forme des cellules, la présence de défauts structuraux comme les ondulations des parois et la variation des propriétés intrinsèques de la phase solide : Grenestedt (1998), Chen *et. al* (1999), Andrews *et. al* (1999), Roberts *et. al* (2002). Ces mêmes défauts permettent de prédire la variation du prefacteur  $c$ .

Le mécanisme de déformation qui prédomine à faible densité relative est la flexion suivi par la déformation uniaxiale pure quand la proportion de phase solide devient suffisante. Le fléchissement des parois a pour conséquence d'augmenter la valeur de l'exposant vue que c'est le mode le plus éprouvant pour la structure cellulaire.

Pour ce qui est du coefficient de Poisson, des études montrent que le coefficient effectif est indépendant de la valeur du coefficient intrinsèque ( $\nu_s$ ) à faible  $\rho$ . Cette indépendance vis-à-vis de  $\rho$  et  $\nu_s$  est attribuée à la présence d'un point critique comme signalé dans l'étude de Roberts *et. al* (2002). La création d'une structure poreuse importante et aléatoire isole des parties du solide. Le rapport du volume de ces parties par rapport au plus grand volume solide connecté est appelée taux de discontinuité. Ce paramètre est étudié en fonction de la densité relative.

Dans ce qui suit, les paramètres effectifs ( $\nu$ ,  $E$ ) sont déterminés pour les trois méthodes de génération. La figure 5a montre que le taux de discontinuité dans la structure cellulaire devient significatif quand  $\rho$  diminue et dépasse 50% pour  $\rho < 0.1$ . L'évolution de  $E$  qui est la moyenne  $E_x$ ,  $E_y$  et  $E_z$  montre que la valeur de l'exposant est la plus proche du cas isotrope avec un facteur de corrélation satisfaisant (Fig. 5b). La dispersion des 6 coefficients de Poisson effectifs calculés par rapport aux chargements sur X, Y et Z démontre une influence significative de la perte cellulaire. Cette dispersion est d'autant plus importante que  $\rho$  est faible.

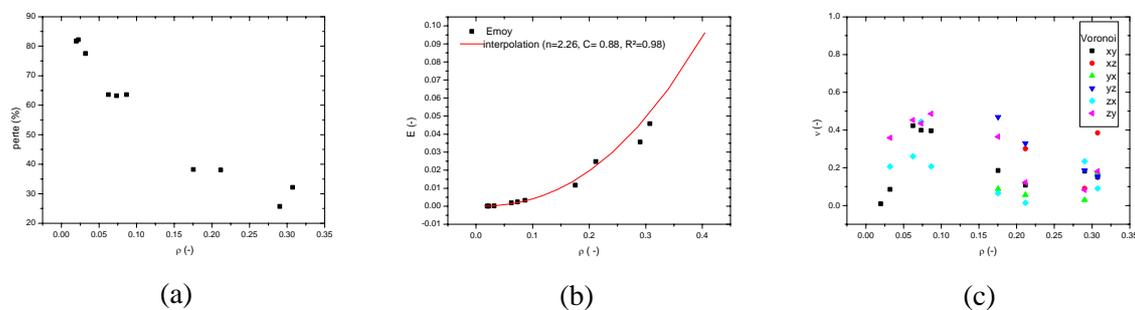


FIG. 5 – (a) Evolution de la perte de parois dans la Méthode Voronoi. (b)-(c) Evolution du module  $E$  et des coefficients de Poisson en fonction de  $\rho$ . (grille =  $60^3$ , NB=100,  $\alpha=20$ ).

Sur la figure 6 sont résumées les tendances prédites concernant la méthode de génération Monte Carlo. Le taux de perte est moins important et est attribué principalement à la percolation de la porosité à faible  $\rho$ . Le module  $E$  affiche une dispersion plus importante comparée à la méthode Voronoi. L'augmentation de l'exposant peut s'expliquer par la courbure des parois de cellules qui est plus prononcée dans ce cas (Fig. 1). Les coefficients de Poisson affichent une variation moins prononcées que dans le cas de la figure 5c ce qui signifie une répartition plus isotrope de la phase solide. La figure 7a montre un résultat similaire à celui de la figure 5a, c-à-d que le taux de discontinuité par les méthodes Voronoi et RSA sont les plus élevées. Ceci dégage un critère important pour la génération cellulaire qui est traduit par le rôle de l'interface. La figure 7b montre l'évolution de  $E$  en fonction de  $\rho$ . Il est à noter que la valeur élevée de l'exposant

s'explique par le désordre aléatoire créé par le recouvrement imposé des bulles. La dispersion des coefficients de Poisson reste comparable à celle des autres méthodes (Fig. 7c).

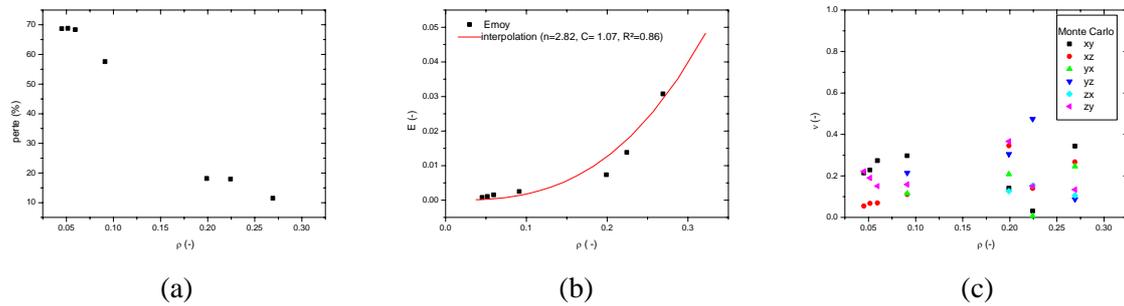


FIG. 6 – Résultats relatifs à la génération par Monte Carlo. (a) Evolution de la perte par discontinuités. (b) – (c) Evolution de E et  $\nu$  moyen en fonction de la densité relative. (grille =  $60^3$ , NB=100, R=5, H/J=3).

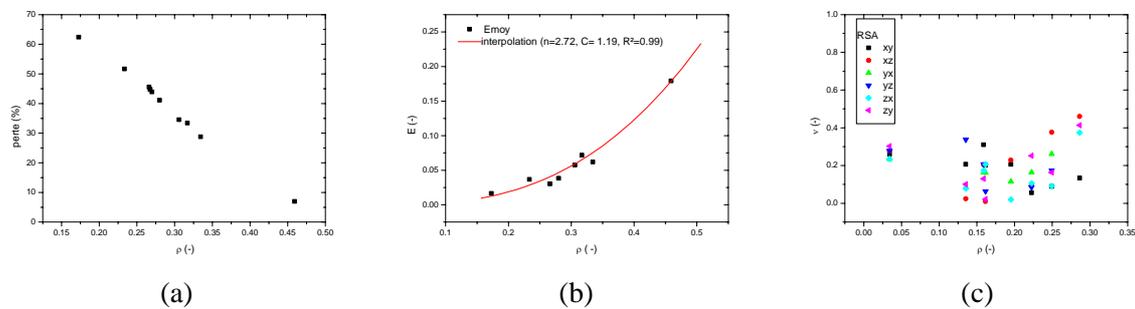


FIG. 7 – Résultats relatifs à la génération par RSA. (a) Evolution de la perte par discontinuités. (b) – (c) Evolution E et  $\nu$  en fonction de  $\rho$ . (grille =  $60^3$ , NB=197, R=10,  $\delta=-3$ ).

## 6 Conclusions

L'étude des paramètres d'élasticité montre une différence entre les approches de génération de structures alvéolaires. La variabilité des paramètres notamment celle du coefficient de Poisson est attribuée au taux élevé des discontinuité. Le taux de discontinuité augmente quand la densité relative diminue. L'approche Monte Carlo semble donner le taux le plus faible à cause de la prise en compte de la minimisation des surfaces libres dans la génération. L'approche Voronoi est celle qui s'approche le plus du résultat théorique donnant un exposant proche de 2. Dans une étude ultérieure, la sensibilité des paramètres d'élasticité par rapport à la taille de l'échantillon est à établir. Les paramètres de génération seront adaptés aux observations des processus de fermentation obtenues par tomographie RX.

## Références

- Babin, P. et coll. 2005 J. Mat. Sci. **40**, 5867-5873.  
 Scanlon, M. G. et Zghal, M.C. 2001 Food Research Int. **34**(10), 841-864.  
 Gibson, L.J. Ashby, M.F. 1997 Cellular solids (Cambridge, Pergamon Press Ltd).  
 Binder, K. et coll. 1992 Monte Carlo simulation in statistical Physics, Springer-Verlag.  
 Clarke, A.S. Wiley, J.D. 1987 Phys. Rev. B **35**, 7350-7356.  
 Evans J. W., 1993 Rev. Mod. Phys. **65** [4], 1281-1329.  
 Fortune, S. 1992 in Euclidean Geometry and Computers, p.193, World Scientific Pub. Co.  
 Roberts A. P. Garboczi, E. J. 2002 J. Mech. Phys. Solids **50**[1], 33-55.  
 Grenestedt, J.L. 1998 J. Mech. Phys. Solids **46**[1], 29-50.  
 Chen, C. Lu T. J. Fleck, N. A. 1999 J. Mech. Phys. Solids **47**[11], 2235-2272.  
 Andrews, E. Sanders W. Gibson L. J., 1999 Mat. Sci. Eng. A **270**[2] 113-124.