

Un outil numérique basé sur des marches aléatoires hybrides pour simuler le transfert thermique couplé rayonnement/conduction dans les matériaux poreux

G. L. VIGNOLES^a

a. Lab. des Composites ThermoStructuraux (LCTS), Université de Bordeaux, 3 Allée La Boétie, F33600 Pessac, France

Résumé :

Parmi les nombreuses propriétés que les matériaux céramiques de haute technologie -- comme les Composites à Matrice Céramique (CMC) ou carbone (C/C) et les mousses céramiques -- doivent satisfaire, il y a les propriétés de transfert de chaleur depuis l'ambiante jusqu'à des températures extrêmement élevées. Pour ces dernières, le transfert de chaleur ne s'appuie plus seulement sur le transfert conductif à travers la phase solide, mais également sur le transfert radiatif à travers les macropores du matériau. Il importe de pouvoir évaluer aussi précisément que possible le comportement thermique du matériau dans ces conditions. Dans une approche de « matériau virtuel », nous proposons un outil permettant de simuler le transfert de chaleur en tenant compte des particularités du matériau, à savoir : (i) anisotropie locale due à une éventuelle texturation, (ii) hétérogénéité, et (iii) présence de cavités radiatives. L'approche permet de travailler sur des images 3D fidèlement représentatives du matériau réel, telles qu'on peut par exemple les obtenir par tomographie X. Un schéma numérique de marches aléatoires mixtes (diffusion/rayonnement) est présenté, ainsi que différentes validations du code. L'application à des images de matériaux réels (CMC, mousses, tissus, ...) est décrite et discutée, montrant l'impact du transfert radiatif sur le tenseur de diffusivité effective du matériau.

Abstract :

Among the numerous properties that advanced ceramics – like Ceramic-Matrix Composites, Carbon/Carbon Composites, and ceramic foams – have to satisfy, one finds heat transfer properties, from ambient up to extremely high temperatures. In the latter case, heat transfer rests not only on conduction in solids and convection in pores, but also on radiation through pores. The precise knowledge of the thermal behavior of these materials in these conditions is an issue. In a “virtual material” framework, we present a computational simulation tool for heat transfer in such materials, featuring: (i) a possible local anisotropy of conduction in the solid (e.g. fiber tows), (ii) a possible spatial heterogeneity of conduction, and (iii) the presence of open or closed radiating cavities. The software is suited to working in large 3D blocks as produced e.g. by X-ray CMT or by image synthesis. An original Monte-Carlo Mixed Random Walks scheme accounting for both diffusion and radiation is presented, and several validations are described. The application to some real material images (CMCs, foams, fiber mats) is described and discussed, principally in terms of the influence of the diffusion/radiation ratio on the effective (large-scale) diffusivity tensor.

Mots clefs (Times 14 gras) : transfert radiatif de chaleur, tomographies X, matériau virtuel, milieux poreux

1 Introduction

Dans certaines applications industrielles, notamment dans le domaine de l'énergie, les conditions rencontrées sont extrêmes, comme dans les turbines à gaz, ou les réacteurs nucléaires. Les matériaux utilisés doivent être en mesure de résister à ces conditions, en gardant des propriétés mécaniques élevées à des températures parfois supérieures à 1000°C. Il s'agit par exemple de céramiques techniques comme les composites thermostructuraux, les feutres de fibres céramiques, et les mousses céramiques. Un des points cruciaux est donc la connaissance des propriétés thermiques de ces composites. Or, pour des températures élevées, les transferts au sein du matériau présentent des contributions par conductivité dans la phase solide (fibre,

matrice, interphase), mais également radiative à travers la porosité. Selon la nature du matériau étudié, l'influence des transferts radiatifs sur la valeur de ses propriétés effectives est plus ou moins marquée. Ainsi, de nombreux travaux ont été réalisés sur la prise en compte du rayonnement dans les transferts au sein des mousses, qui sont le siège de transferts radiatifs importants, compte tenu de leur forte porosité. La contribution du rayonnement aux propriétés thermiques est donc évaluée pour des mousses plastiques [1], polymères [2], carbones [3] ou métal [4]. Si l'influence du rayonnement est significative pour des matériaux tels que les mousses, on peut se demander s'il en est de même sur les composite SiC_f/SiC dont la porosité est moindre, sans toutefois être négligeable (jusqu'à ~25%) [28].

L'étude du transfert couplé radiatif-conductif nécessite des outils de modélisation adaptés, permettant de prendre en compte ces différentes contributions. En effet, un des problèmes fondamentaux est la disparité de nature entre les deux types de transport. D'une part, le transport conductif obéit à l'équation de la chaleur, une équation parabolique portant sur la température, tandis que d'autre part le transport radiatif obéit à l'ETR (Equation de Transfert Radiatif) qui, si on l'intègre, décrit les flux échangés entre surfaces rayonnantes qui peuvent alors servir de conditions aux bords pour l'équation de la chaleur.

Une des méthodes les plus populaires pour la résolution de l'ETR est le lancer de rayon [4-10] ; les rayons sont d'ailleurs souvent lancés avec des directions aléatoires (méthode de Monte-Carlo). La méthode de Monte-Carlo/marches aléatoires est également utilisée pour décrire le transfert de phonons à travers un matériau [11], analogue à celui des gaz raréfiés à travers un milieu poreux [12,13]. Dans ce cas, on fait à nouveau de la simulation directe du transport d'espèces (phonons ou molécules). Cependant, il existe d'autres méthodes de marches aléatoires permettant la simulation d'un mouvement à caractère Brownien à une échelle bien plus grande que la longueur d'absorption [14,15] : il s'agit là d'une méthode adaptée pour résoudre l'équation de la chaleur ou toute équation elliptique similaire (2^{ème} loi de Fick, etc), mais dans laquelle l'espèce transportée n'est plus la simulation directe d'un « porteur d'énergie ». De plus, elle permet de prendre en compte l'anisotropie locale du milieu. Nous examinons dans ce travail une méthode couplant le schéma Brownien dans le solide avec un lancer de rayons dans les cavités rayonnantes du matériau, dans une seule et même marche aléatoire mixte.

Nous rappellerons brièvement ici d'abord le principe de la méthode de résolution employée, avec des validations numériques ; puis nous discuterons de son application à des images 3D réalistes de matériaux : mousse cellulaire ouverte, assemblage de fibres, composite SiC_f/SiC.

2 Méthodes

Les N_m marcheurs aléatoires sont ici des porteurs d'énergie. L'enthalpie volumique est donc discrétisée de la façon suivante :

$$\rho c_p T(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{N_m} \delta(\underline{x} - \underline{x}_i) h_i \quad (1)$$

où ρc_p est la capacité calorifique volumique, h_i est le « quantum » d'enthalpie porté par le $i^{\text{ème}}$ marcheur localisé en \underline{x}_i , et δ est la distribution de Dirac. Le programme utilise deux types de marches, une pour la conduction/diffusion de chaleur dans le solide, l'autre pour le rayonnement en cavité. La première est une simulation du mouvement Brownien par des pas d'espaces élémentaires $\underline{\delta x}_i$ obéissant au schéma d'Itô-Taylor suivant [16] :

$$\underline{\delta x}_i = \underbrace{\left(-\text{div} \cdot \underline{a}(\underline{x}_i) \right) \delta t}_{\text{advection}} + \underline{P} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \Gamma_1 \sqrt{2a_{11}(\underline{x}_i)} \delta t \\ \Gamma_2 \sqrt{2a_{22}(\underline{x}_i)} \delta t \\ \Gamma_3 \sqrt{2a_{33}(\underline{x}_i)} \delta t \end{pmatrix}}_{\text{diffusion}} \quad (2)$$

où \underline{a} est le tenseur local de diffusivité thermique, \underline{P} est une matrice de passage permettant de se placer dans les axes propres du tenseur \underline{a} diagonalisé et Γ_i sont trois tirages aléatoires à distribution normale centrée. Le caractère tensoriel de la diffusivité rend compte de l'anisotropie locale du milieu conducteur (par exemple, dans un composite à renfort fibreux), et sa divergence rend compte de son hétérogénéité spatiale.

Par ailleurs, le rayonnement est représenté par un algorithme de lancer de rayons. La cavité radiative est séparée du solide conducteur par une interface discrétisée en Marching Cube Simplifié (SMC)[12]. La probabilité qu'un marcheur aléatoire « conducteur » se transforme en rayon est obtenue à partir des propriétés du matériau, dans l'approximation de Rosseland :

$$P = \frac{Nu_p}{1 + Nu_p} \quad (3)$$

où Nu_p est un « nombre de Nusselt numérique de pore » :

$$Nu_p = \frac{4\varepsilon\sigma T^3 \langle \delta x_i \rangle}{\rho c_p a} \quad (4)$$

, expression dans laquelle la température est moyennée sur l'échantillon, ε est son émissivité, σ est la constante de Stefan-Boltzmann, et $\langle \delta x_i \rangle$ une moyenne des pas d'espace. Dans la pratique, les très hautes températures (2000°C) permettent d'arriver vers une probabilité P de l'ordre de 0,1 pour des mousses dont le solide est assez peu conducteur ; pour d'autres matériaux comme les composites SiC_f/SiC, P ne dépasse pas les 0,005.

L'algorithme peut être utilisé pour résoudre l'ETR, mais il peut également servir à produire directement un tenseur effectif de diffusion à travers un milieu homogénéisé, dans la limite d'une épaisseur suffisamment importante et de l'absence d'horizon infini. Pour cela, on prend un nombre suffisamment grand de marcheurs aléatoires, placés initialement au hasard dans la phase solide de l'image, et après un temps assez grand, on emploie la formule d'Einstein :

$$a_{\equiv}^{eff} = \lim_{\substack{N_m \rightarrow \infty \\ t \rightarrow \infty}} \left[\frac{1}{2t} \overline{\text{cov}(x(t) - x(0))} \right] \quad (5)$$

L'intérêt des marches aléatoires pour l'homogénéisation est que la gestion des répétitions du volume élémentaire de matériau pour paver l'espace est particulièrement souple. En sus des conditions classiques de symétrie et de translation, il est possible d'implémenter une condition de « périodicité faible », pour laquelle la périodicité des flux et concentrations n'est imposée qu'en moyenne par face. Ceci s'obtient en gérant la réintroduction des marcheurs, lorsqu'ils sortent par une face, par la face opposée en les déplaçant aléatoirement sur cette face opposée.

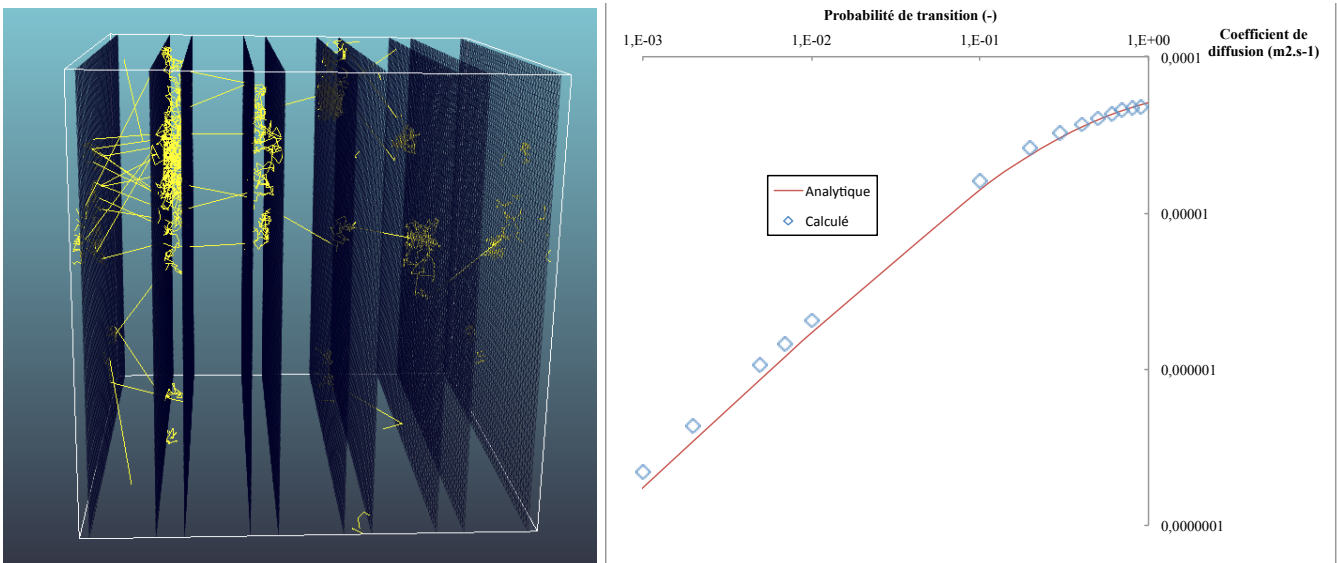


Figure 1 – A gauche : Exemple de marche aléatoire mixte dans un milieu formé de plaques parallèles séparées. A droite : comparaison entre calculs et prévision analytique.

La partie « conduction » a été validée vis-à-vis de cas de calcul ayant des solutions analytiques : (i) solide homogène avec tenseur de diffusivité hors axes, (ii) solide contenant un gradient du tenseur de diffusivité, (iii) solide avec une discontinuité du tenseur de diffusivité. Le couplage conduction / rayonnement a été

validé dans le cas d'un milieu formé de plaques parallèles d'extension infinie (fig. 1). En effet, pour cette configuration, une solution analytique existe pour le coefficient effectif de diffusion transverse aux plaques (tandis que les deux autres composantes divergent). L'accord est excellent dans tous les cas, avec par exemple : 3% d'erreur pour 800 marcheurs et 15 fois le côté de l'image comme longueur de marche. Le temps de calcul avoisine les 350 secondes pour une image de 50^3 voxels, sur un CPU Intel Core i7 à 2 GHz.

Le caractère anisotrope de la conduction dans chaque élément de volume solide est décrit par un tenseur dont on aligne les axes propres sur un repère local suivant par exemple la direction des fibres dans le cas d'un composite. La direction locale des fibres est obtenue par un calcul des valeurs et vecteurs propres du tenseur de structure, i.e. la matrice Hessienne (dérivée seconde) de l'image. Cette opération est menée grâce à l'application successive d'un filtre gradient. Nous avons utilisé un filtre optimisé pour la détection d'objets cylindriques [17].

3 Résultats

Pour illustrer les possibilités de la méthode, des calculs de diffusivité thermique effective ont été réalisés sur trois types de milieux, issus de microtomographies X de matériaux réels : un arrangement de fibres, une mousse cellulaire ouverte, et un composite SiC_f/SiC à renfort de fibres longues tissées.

3.1 Mèche de fibres

La figure 2 donne une représentation du milieu choisi, de taille 100^3 voxels, extrait d'une tomographie de préforme de composite carbone/carbone [18]. Les fibres suivent une direction générale proche de [110], ce qui se retrouve bien dans l'analyse des directions propres du tenseur effectif. En effet, à transfert radiatif nul, la seule composante proche de [110] donne une valeur égale à celle de la phase solide (ici, $2,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$), pondérée par sa fraction volumique (ici, 32,4%), les deux autres étant proches de zéro ; lorsque la probabilité de transition dans la cavité rayonnante augmente, les trois composantes augmentent fortement, de façon quasi-linéaire.

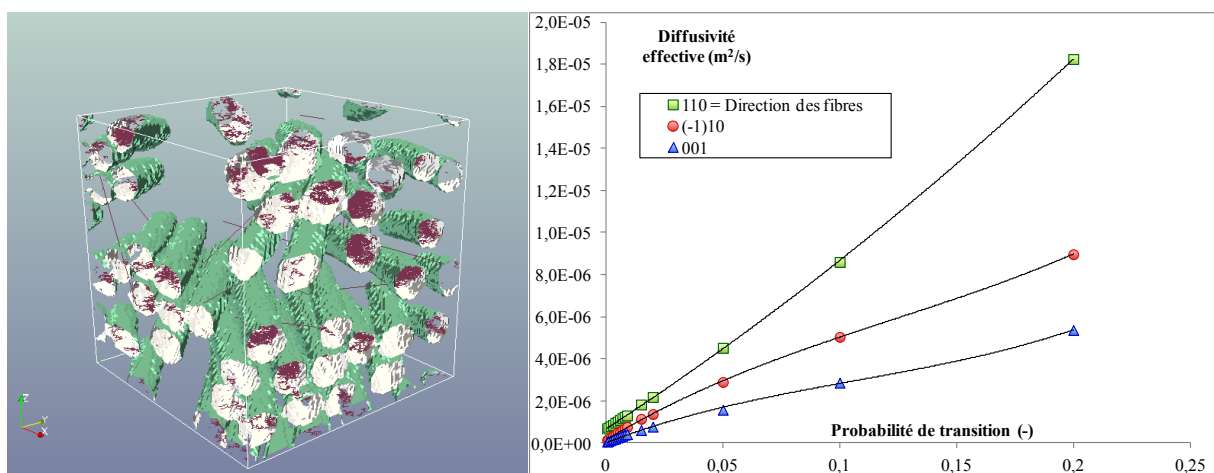


Figure 2 : A gauche, visualisation du milieu fibreux, et d'une trajectoire mixte à l'intérieur. A droite, évolution de la diffusivité effective du milieu en fonction de la probabilité de transition. La diffusivité dans le solide est de $2,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

3.2 Mousse cellulaire ouverte

Le milieu étudié ici est une mousse de carbone de 97,2% de porosité [3,19]; l'image mesure 242^3 voxels de $20 \mu\text{m}$ de côté. Le calcul a été mené ici avec une probabilité de transition radiative de 0,05, et une diffusivité isotrope de $5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ pour la phase solide. Les trois directions trouvées ne coïncident pas avec les trois directions du repère ; les valeurs dans chaque direction (notées 1,2,3) sont assez distinctes, dans un ratio 1:1,16:1,28. En regardant attentivement l'image perpendiculairement aux trois directions propres trouvées, on constate en effet qu'il existe des petites zones aplaties – jouant le rôle d'obstacles au rayonnement – que l'on voit de face suivant les axes 1 et 2, et qui sont de profil suivant la direction 3. Ce résultat permet d'illustrer l'intérêt de la méthode pour détecter l'ampleur et la direction de l'anisotropie dans une mousse cellulaire ouverte.

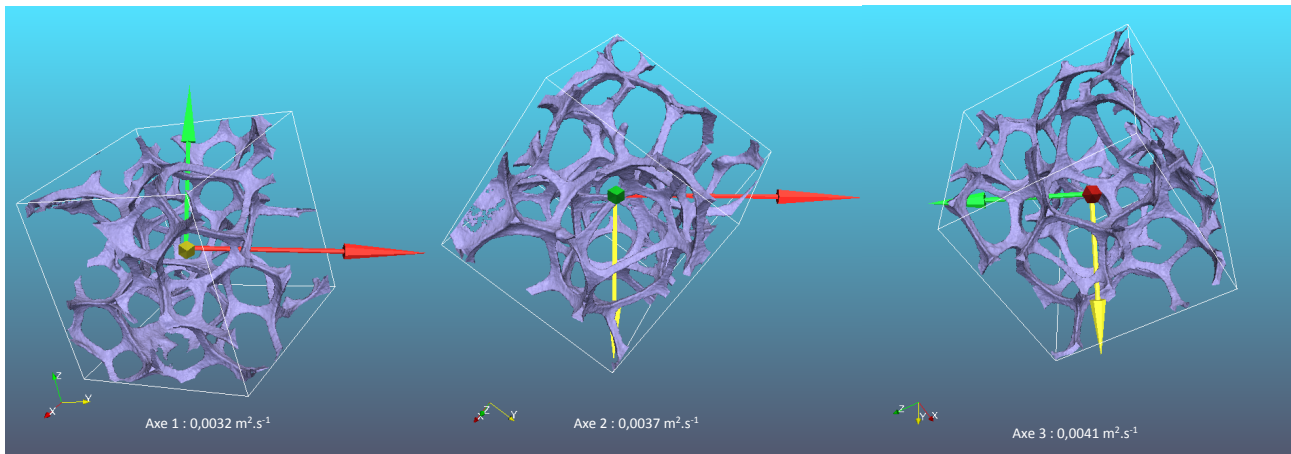


Figure 3 : Visualisation des 3 axes propres de diffusivité thermique à 5% de transition vers le rayonnement. De gauche à droite : vues du matériau perpendiculairement aux directions propres de diffusion 1 (la plus faible), 2, et 3 (la plus forte).

3.3 Composite à Matrice Céramique

La méthode a été appliquée à une image 3D de composite à matrice céramique de type SiC_f/SiC à renfort fibres longues [20]. Dans ce cas, la détection d'anisotropie et l'affectation de propriétés localement hétérogènes et anisotropes ont été activées. Le résultat est illustré à la Figure 4. On note la différence de comportement entre les directions transverse et parallèles au tissu : si la pente initiale est approximativement la même en fonction de P pour les faibles valeurs, la direction de l'épaisseur connaît une évolution non-linéaire, au contraire des deux autres. Cependant, pour le domaine d'application envisagé, la probabilité P est très faible ($< 0,005$). En pratique, la contribution du rayonnement n'apporte qu'un excédent très limité (de l'ordre du %) à la diffusivité effective du matériau.

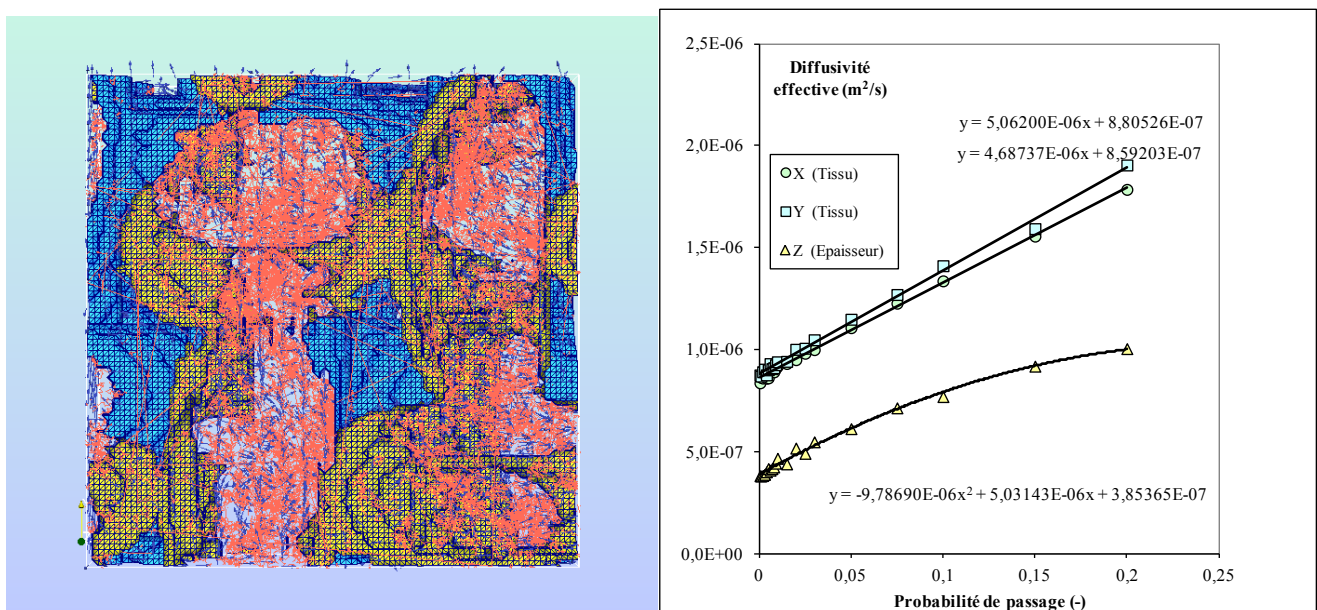


Figure 4. Calculs dans une tomographie de composite SiC_f/SiC . A gauche : image 3D seuillée, avec une représentation du champ de vecteurs d'orientation (flèches bleues) et un exemple de trajectoire mixte (en rouge). A droite : Evolution des valeurs propres du tenseur effectif de diffusion thermique en fonction de l'importance du rayonnement.

4 Conclusions

Une méthode de calcul originale basée sur des marches aléatoires mixtes a été développée, validée, et appliquée à divers milieux 3D issus de tomographies. Elle permet d'obtenir une diffusivité thermique tensorielle effective dans le milieu considéré – c'est donc une méthode d'homogénéisation. Cependant, le

« moteur élémentaire » de la marche aléatoire peut également servir pour obtenir une description plus précise des milieux concernés, par exemple les coefficients du modèle RDFI [5]. Il est également possible d'enrichir la description physique du code, par exemple en simulant des milieux participatifs, en ajoutant de la conduction et de la convection dans la phase fluide, etc ...

L'utilisation de ce programme pour alimenter des démarches de type « matériau virtuel » fait partie des futures directions les plus immédiates que l'on puisse envisager.

References

- [1] De Micco C., Aldao C.M., Radiation contribution to the thermal Conductivity of Plastic Foams, *J. Polymer Sci. B*, 43, 190-192, 2005.
- [2] Almanza O.A., Rodríguez Pérez M.A., De Saja J.A., Prediction of the radiation term in the thermal conductivity of crosslinked closed cell polyolefin foams, *J. Polymer Sci. B*, 38, 993-1004, 2000.
- [3] Delettrez S., Elaboration par voie gazeuse et caractérisation de céramiques alvéolaires base pyrocarbone ou carbure de silicium, Thèse de l'Université Bordeaux 1, 2008.
- [4] Loretz M., Coquard R., Baillis D., Maire E., Metallic foams : Radiative properties/comparison between different models, *J. Quantit. Spectrosc. & Radiat. Transf.* 109, 16-27, 2008.
- [5] Zeghondy, B., Iacona E., Taine J., Determination of the anisotropic radiative properties of a porous material by radiative distribution function identification (RDFI), *Intl. J. Heat & Mass Transf.* 49, 3702-3707, 2006.
- [6] Tancrez, M., Taine, J. Direct identification of absorption and scattering coefficients and phase function of a porous medium by a Monte Carlo technique, *Intl. J. Heat & Mass Transf.*, 47, 373-383, 2004.
- [7] Rousseau B., De Sousa Meneses D., Echegut P., Di Michiel M., Thovert J.-F., Prediction of thermal radiative properties of an X-ray μ -tomographed porous silica glass, *Appl. Opt.* 46, 4266-4276, 2007.
- [8] Loretz M., Maire E., Baillis D. Analytical modelling of the radiative properties of metallic foams: Contribution of X-ray tomography, *Adv. Eng. Mater.* 10, 352-360, 2008.
- [9] Volz S., Monte Carlo Method, in: "Microscale and Nanoscale Heat Transfer", *Topics Appl. Physics* 107, 133-154, 2007.
- [10] Howell J.R., Perlmutter M., The calculation of nonlinear radiation transport by a Monte Carlo method: statistical physics, *Meth. Comput. Phys.* 1, 43-65, 1961.
- [11] Terris D., Joulain K., Lemonnier D., Lacroix D., Chantrenne P., Prediction of the thermal conductivity anisotropy of Si nanofilms. Results of several numerical methods, *Intl. J. Therm. Sci.* 48, 1467-1476, 2009.
- [12] Vignoles G. L., Germain C., Coindreau O., Mulat C., Ros W., Fibre-scale modelling of C/C processing by Chemical Vapour Infiltration using X-ray CMT images and random walkers, *ECS Trans.* 23, 1275-1284, 2009.
- [13] Vignoles G. L., Modelling binary, Knudsen, and transition regime diffusion inside complex porous media", *J. Phys. IV France C5*, 159-166, 1995.
- [14] Chandrasekhar S., Stochastic problems in physics and astronomy, *Rev. Mod. Phys.* 15, 1-89, 1943.
- [15] Kim I. C., Torquato S., Effective conductivity of suspensions of hard spheres by Brownian motion simulation, *J. Appl. Phys.* 69, 2280-2289, 1991.
- [16] LaBolle E. M., Fogg G. E., Thompson A. F. B., Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media : Local mass-conservation problem and implementation methods, *Water Res. Res.* 32, 583-593, 1996.
- [17] Mulat C., Donias M., Baylou P., Germain C., Vignoles G. L., Optimal orientation estimators for detection of cylinders axes, *Sig. Im. & Video Process.* 2, 51-58, 2008.
- [18] Coindreau O., Vignoles G. L., Assessment of structural and transport properties in fibrous C/C composite preforms as digitized by X-ray CMT. Part I : Image acquisition and geometrical properties, *J. Mater. Res.* 20, 2328-2339, 2005.
- [19] Vignoles G. L., Gaborieau C., Delettrez S., Chollon G., Langlais F., Reinforced carbon foams prepared by chemical vapor infiltration: a process modeling approach, *Surf. Coat. Technol.* 203, 510-515, 2008.
- [20] Vignoles G. L., Bonnenfant J.-F., Szelengowicz I., Prédiction de la diffusivité thermique à haute température d'un composite SiC_f/SiC: Un outil numérique basé sur des marches aléatoires hybrides, Actes du congrès Matériaux 2010, Nantes, 18-22 Octobre 2010.