Laboratoire
des
Composites
ThermoStructuraux

Evaluation
de la
diffusivité thermique à T > 1000°C
de
composites SiC_f/SiC
à partir de microtomographies X :
Une méthode de marches aléatoires

Gérard L. Vignoles
Jean-François Bonnenfant
Ivan Szelengowicz

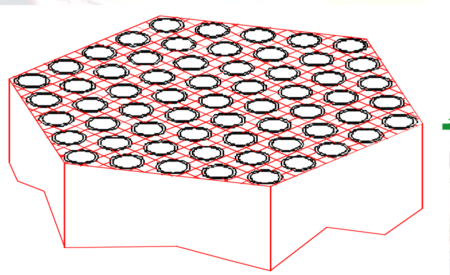
Lionel Gélébart, CEA/Saclay

Plan de la présentation

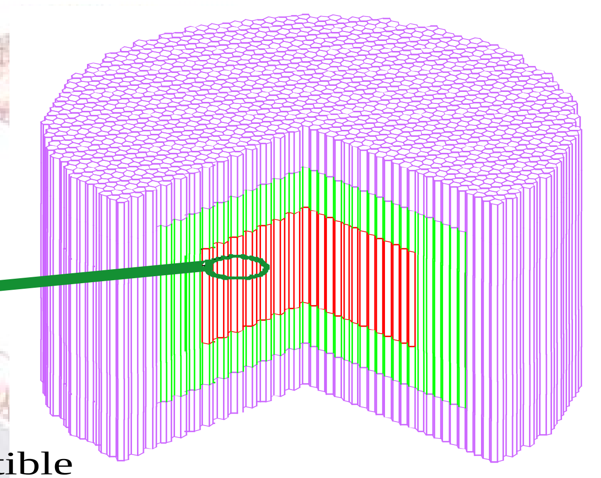
- Introduction (contexte industriel)
- Objectifs de l'étude
- Moyens mis en œuvre
- Principaux résultats
- Conclusion et perspectives

Introduction

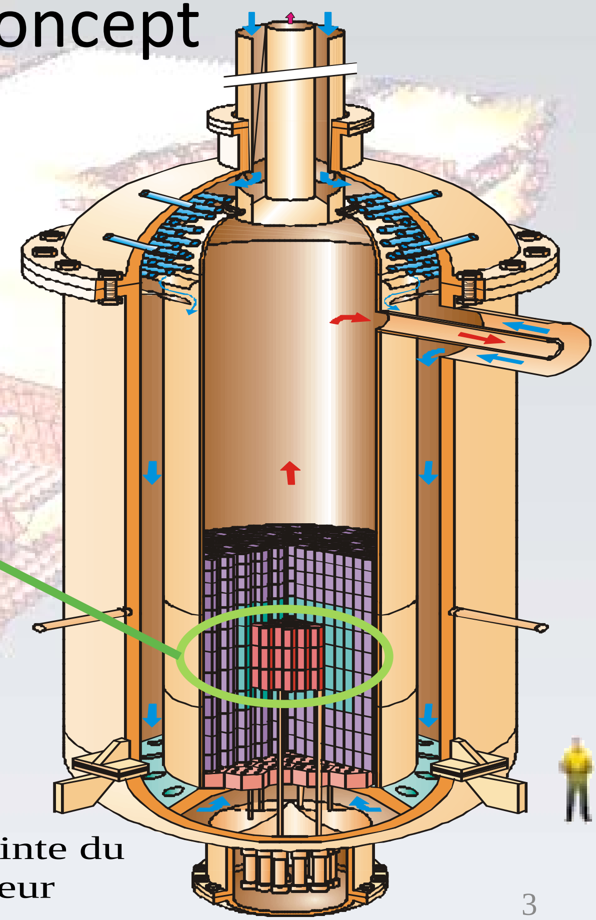
- Cadre du travail : Contexte industriel
  - Nucléaire civil : Génération IV, concept GFR (Gas-Cooled Fast Reactor)



Element de Combustible gainé par un CMC



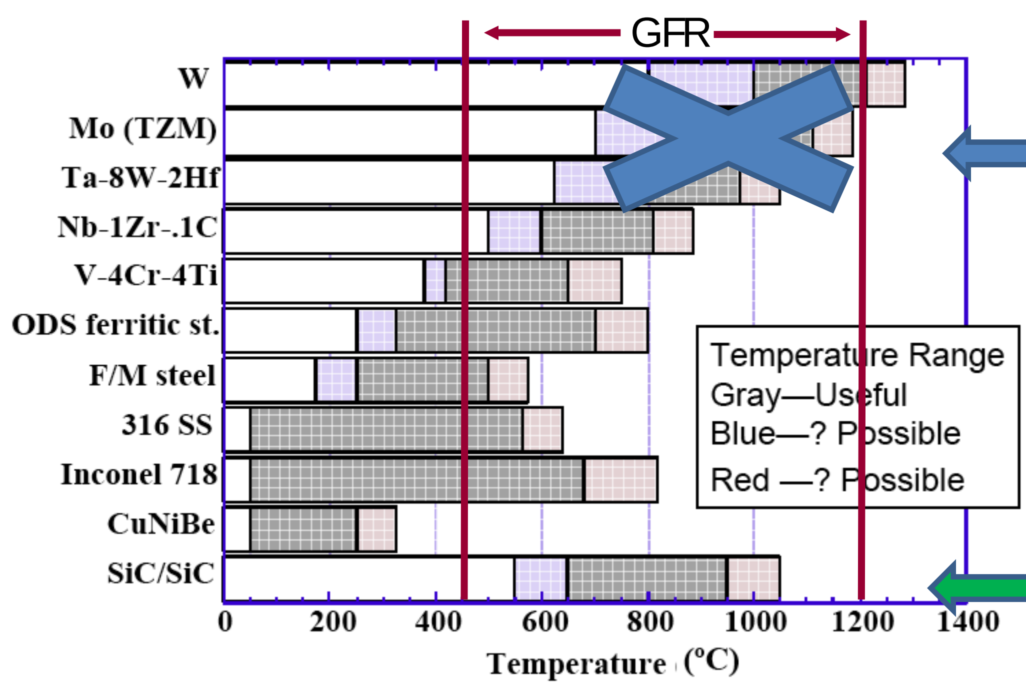
Structure du coeur



Enceinte du réacteur

Introduction

- Cadre du travail - Contexte industriel



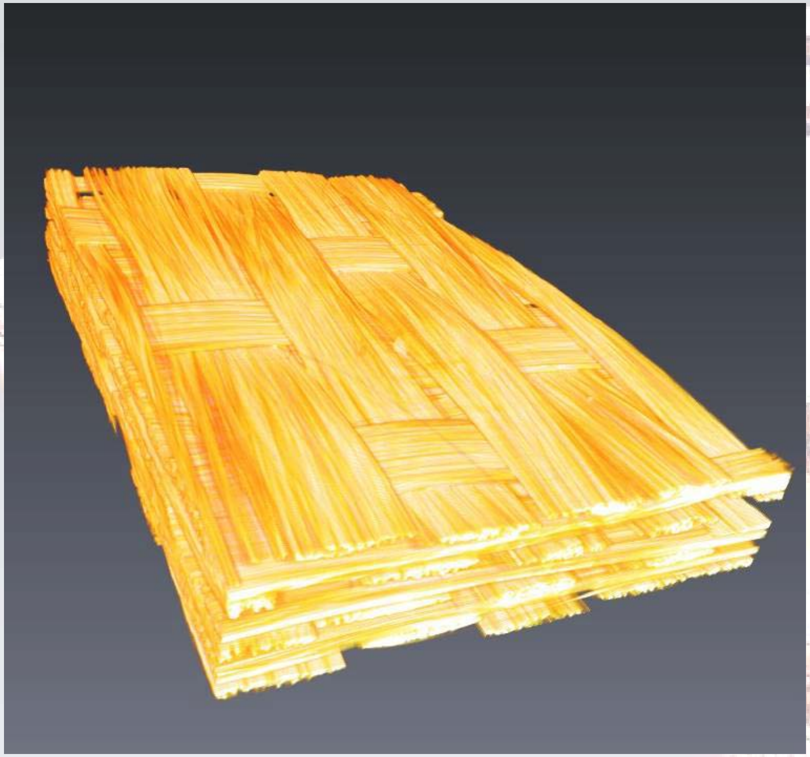
Absorption de neutrons trop élevée

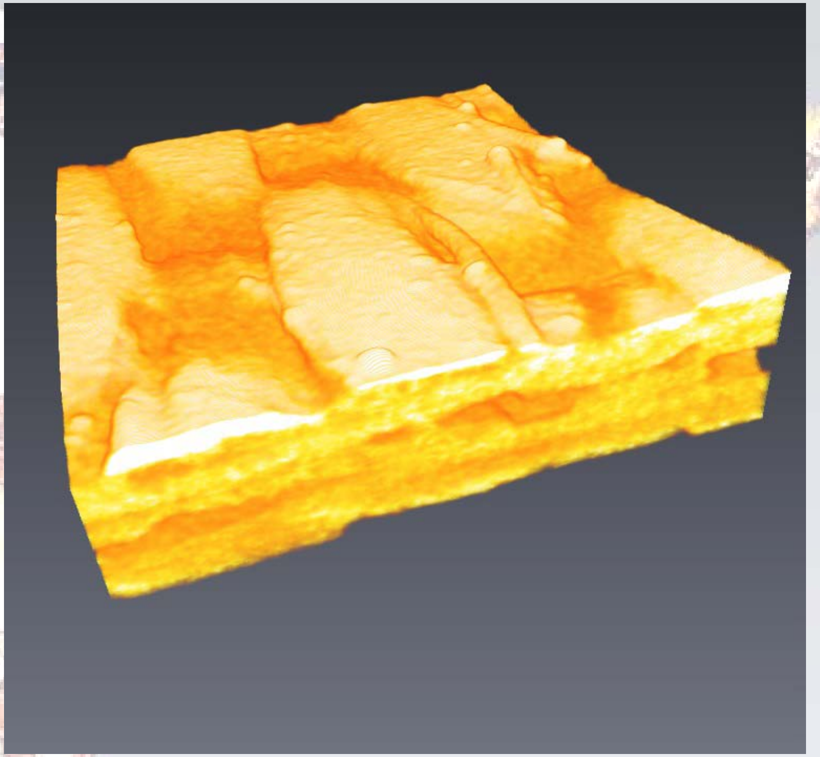
SiC_f/SiC : très bon candidat, mais ….

Il faut garantir une conductivité thermique suffisante

SiC_f/SiC

- Fibres tissées ; matrice obtenue par infiltration

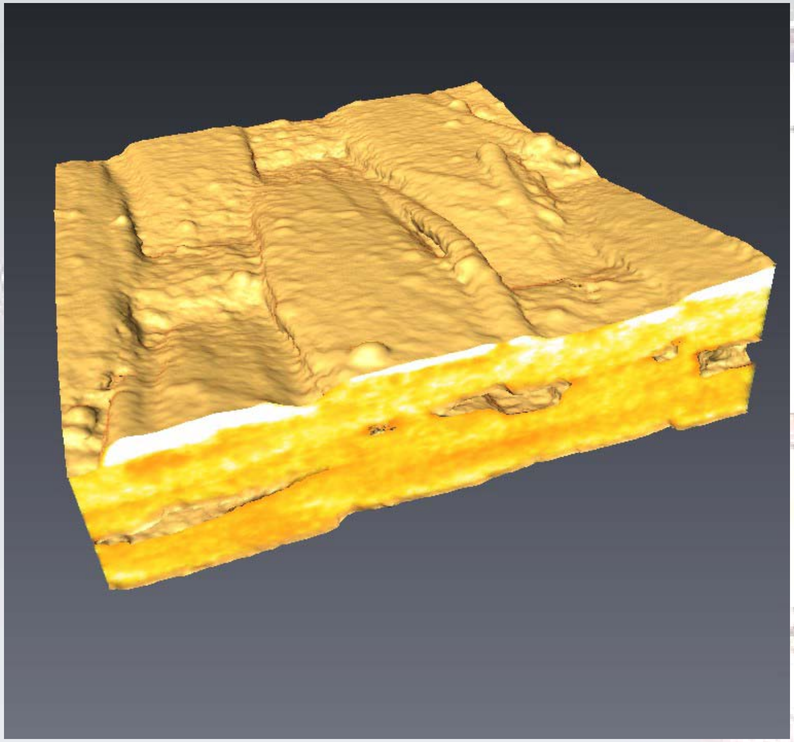


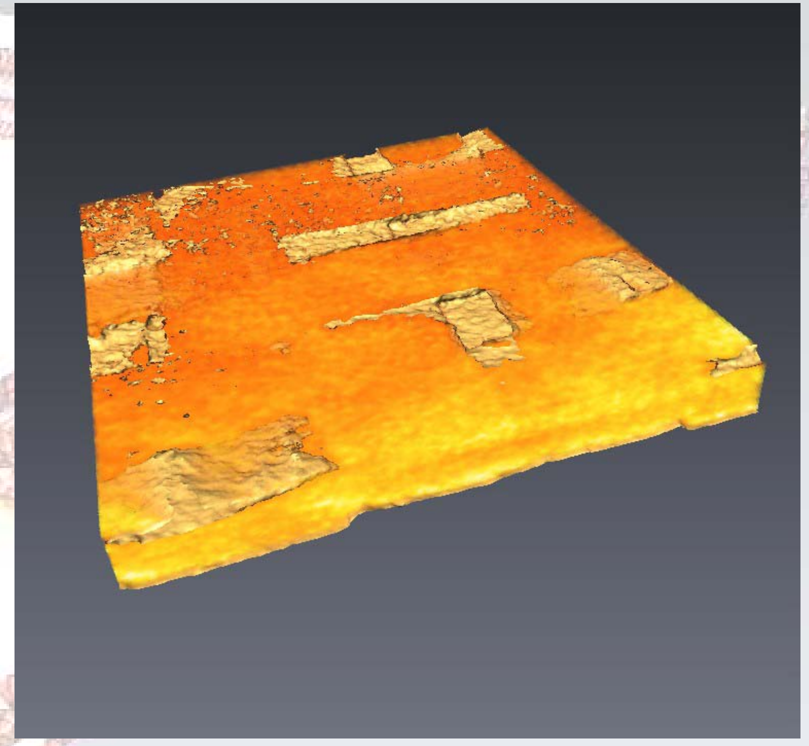


Matériau hétérogène et anisotrope

SiC_f/SiC

- Porosité résiduelle => cavités radiatives





Rôle du rayonnement à quantifier au-delà de ~1000°C

Objectifs

- A partir de tomographies de matériaux SiC_f/SiC, évaluer la conductivité thermique effective, en prenant en compte l'hétérogénéité, l'anisotropie et le rayonnement
- Développement d'une méthode numérique spécifique :
  - Code de marches aléatoires inspiré des codes développés par les hydrogéologues
  - Marche aléatoire hybride solide (hétérogène anisotrope)/cavité
  - Discrétisation/facettisation de l'image, détection des cavités rayonnantes

Méthode de marches aléatoires

- Mouvement brownien (hétérogène/anisotrope)
  - Représentation des phénomènes de diffusion
  - Equation de diffusion (2ème loi de Fick) : $\frac{\partial C}{\partial t} = div.(\underline{\underline{D}}\nabla C)$

$$\rho Cp \frac{\partial T}{\partial t} + div(-\underline{\underline{k}} \cdot \underline{\nabla T}) = 0$$

$$-\underline{divk} \cdot \underline{\nabla T} \quad + \quad -\underline{\underline{k}}\nabla^2 T$$

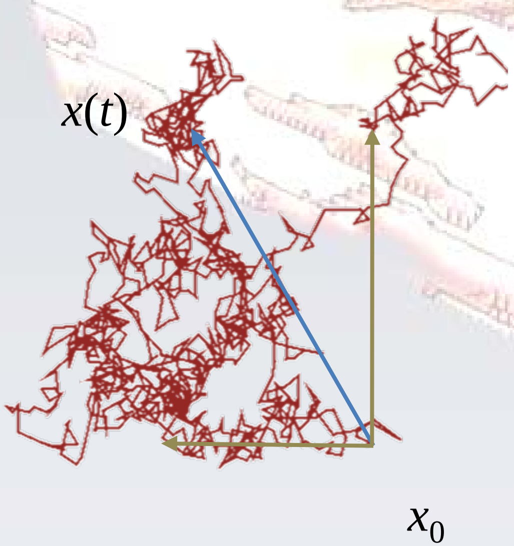
hétérogène

Advection par $-\underline{divk}$

Diffusion par $\underline{\underline{k}}$

Marches aléatoires

- Mouvement brownien (hétérogène/anisotrope)
  - Lien avec les marches aléatoires (Einstein)
    - Détermination de la diffusivité effective :



Probabilité de présence *p en x à t* → 2[e] Loi de Fick :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_{local} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad \text{avec} \quad D_{local} = \frac{\delta x^2}{2\delta t}$$

Intégration sur un grand nombre de marcheurs

$$\lim_{\substack{t \to \infty \\ N \to \infty}} \underline{\underline{\mathrm{cov}}}\left(\underline{x(t)} - \underline{x}_0\right) = 2\underline{\underline{D}}^{eff}\, t \qquad \text{(en 3D)}$$

Relation d'Einstein

$$\underline{\underline{k}}^{eff} = (\rho Cp)^{eff} \,.\, \underline{\underline{D}}^{eff}$$

Marches aléatoires

- Schéma de Itō-Taylor:

(avec processus de Wiener = tirage aléatoire du pas diffusif)

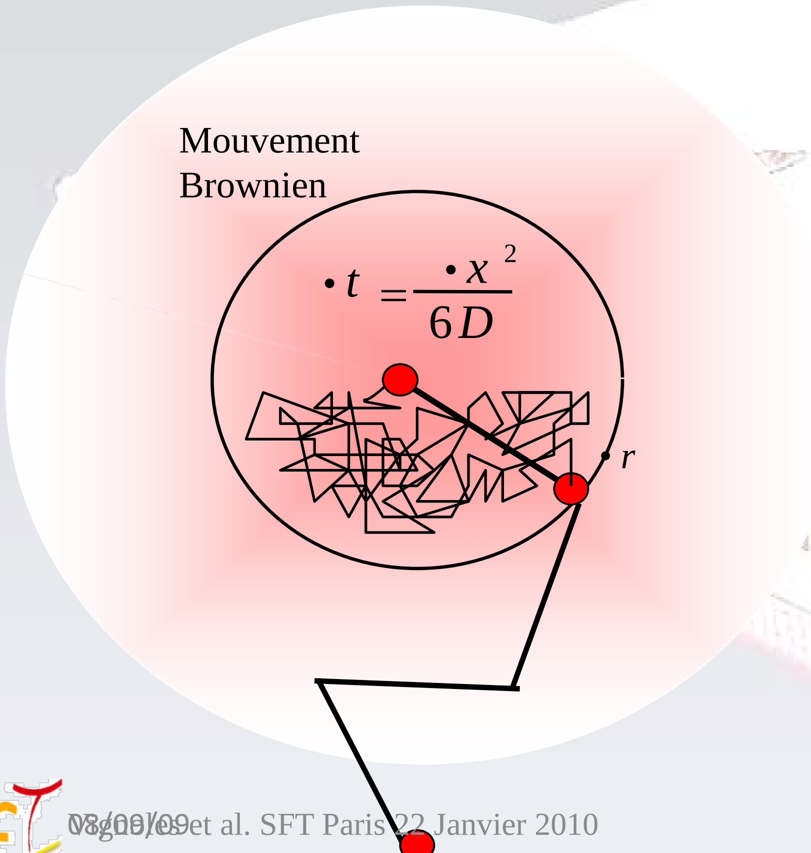
$$\underline{\delta r} = \underbrace{-\underline{divk}.\delta t}_{\text{pas convectif}} + \underbrace{\underline{\underline{P}}.\begin{pmatrix}\sqrt{2D_{xx}\delta t}.\Omega_x \\ \sqrt{2D_{yy}\delta t}.\Omega_y \\ \sqrt{2D_{zz}\delta t}.\Omega_z\end{pmatrix}}_{\text{pas diffusif}}$$

Où les Ω sont des tirages aléatoires normaux unitaires et centrés

Marches aléatoires

- Méthode des marcheurs aléatoires :

- Régime Continu : méthode « Mouvement Brownien »



- $r = \Omega\,\delta x$
- $t = \delta x^2/6D$

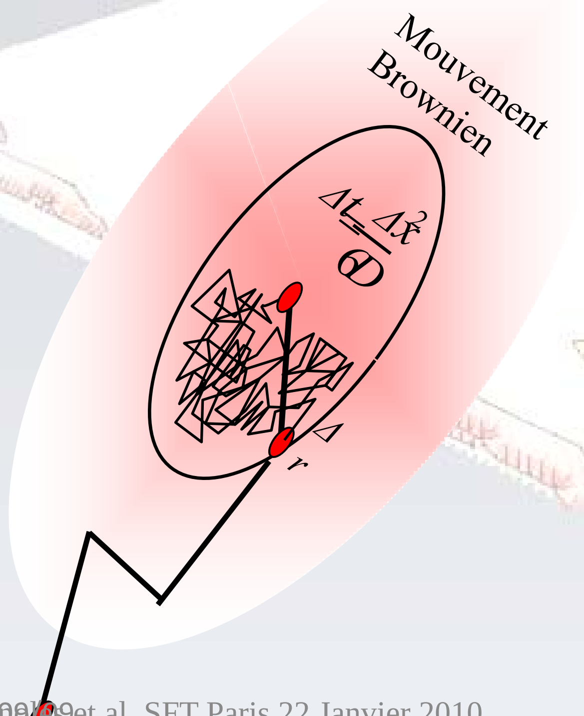
- **r : vecteur de direction de propagation**
- **δx : taille choisie d'un voisinage sphérique**
- **Ω : orientation aléatoire à densité isotrope**

(angle solide)

Marches aléatoires

- Méthode des marcheurs aléatoires :

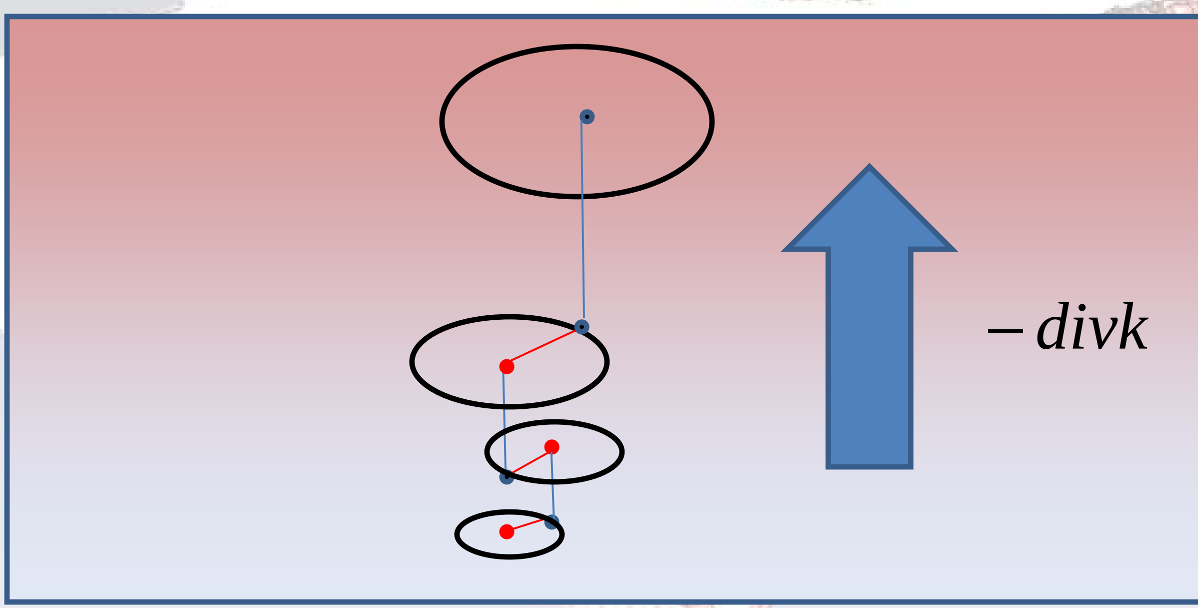
- Prise en compte de l’anisotropie locale



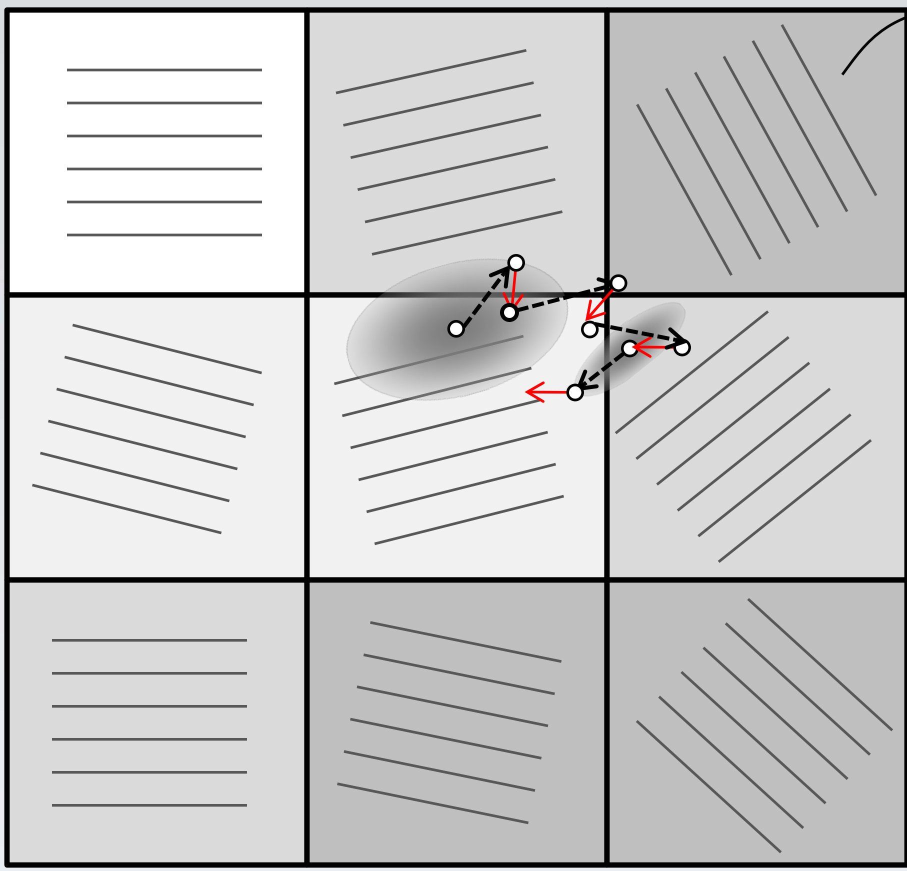
Idem précédemment,
mais avec changement de base
(rotation + mise à l’échelle différentiée)

Marches aléatoires

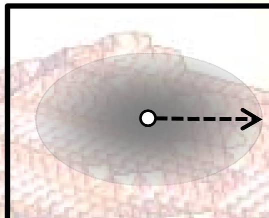
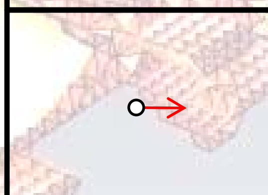
- Méthode des marcheurs aléatoires
  - *Représentation des pas advectifs et diffusifs :*



Conductivité anisotrope ET Gradient de conductivité



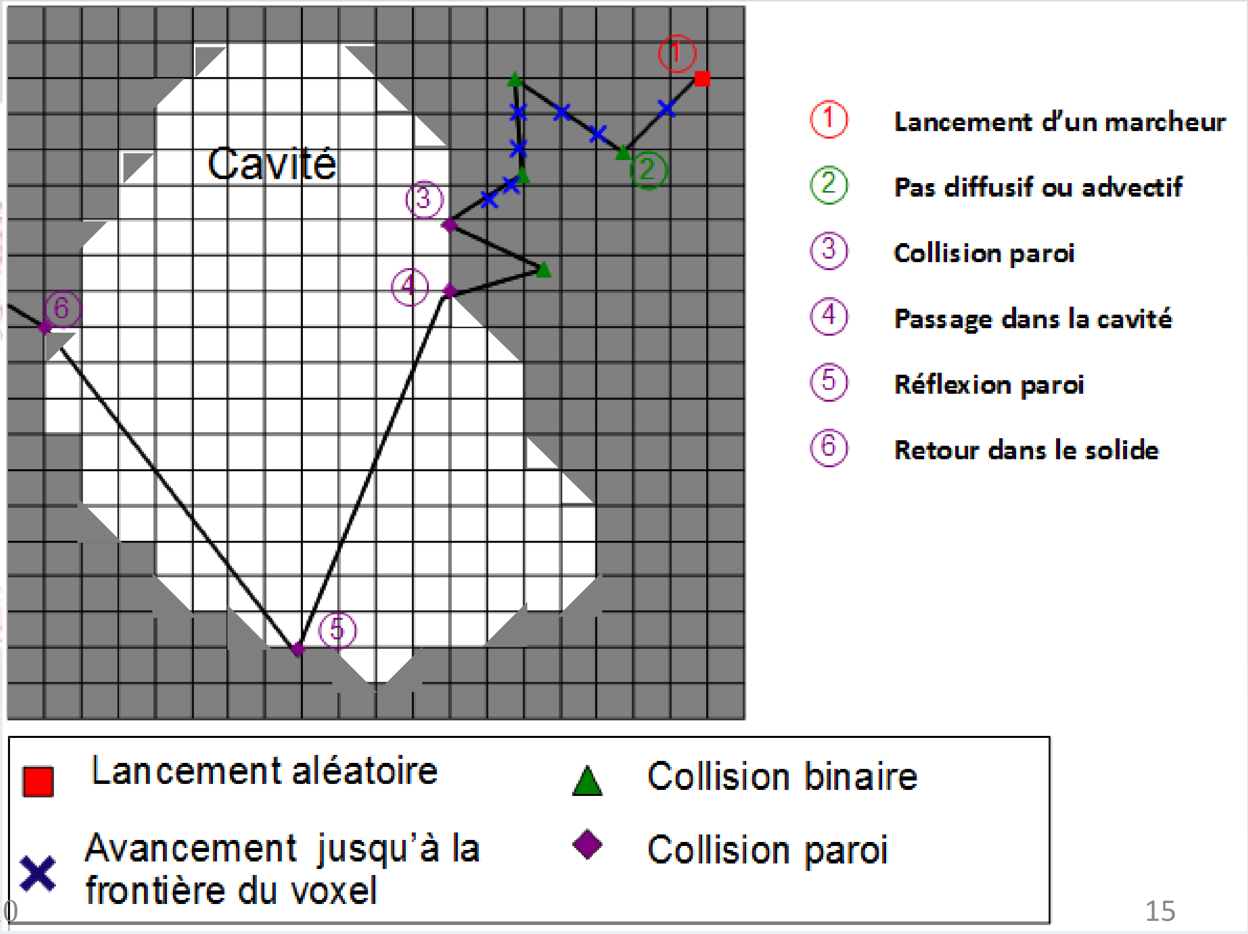
Diffusion tensor $\underline{\underline{D}}$
computed in each voxel from
greyscale value (density)
and local fiber orientation

	Diffusive step : random direction w/ anisotropic distribution following $\underline{\underline{D}}$
	Advective step following $\underline{div}.\underline{\underline{D}}$ (heterogeneity)

Moyens mis en œuvre

- Code avec rayonnement

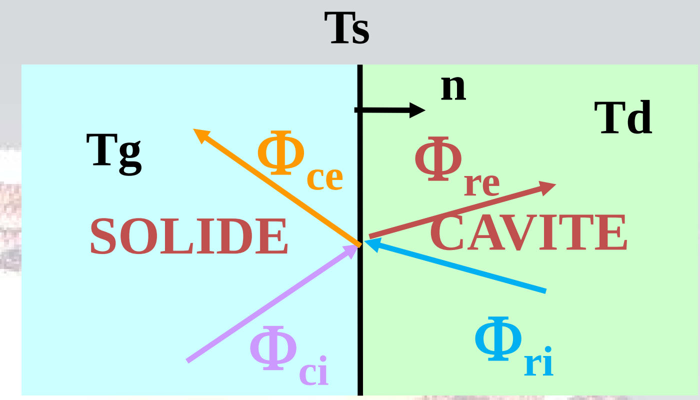
- Adaptation Marche dans les cavités
- Loi cosinus de Lambert aux interfaces



Moyens mis en œuvre

- Code avec rayonnement
  - Echange entre milieux

P : probabilité de passage d'un marcheur dans la cavité



- **Φ_r : densité de flux radiatif émis** ($W.m^{-2}$)
- **Φ_c : densité de flux conductif** ($W.m^{-2}$)
- **h : coefficient de transfert** ($W.m^{-2}.K^{-1}$)

$$\boxed{h = \varepsilon\sigma T^3}$$

$$P = \Phi_{re}/(\Phi_{ci} + \Phi_{ri})$$
$$1 - P = \Phi_{ce}/(\Phi_{ci} + \Phi_{ri})$$

$$\boxed{\Phi_{ce}/\Phi_{re} = (1-P)/P}$$

$$\Phi_{ce} \bullet k.Ts/\bullet r$$
$$\Phi_{ci} \bullet k.Tg/\bullet r$$
$$\Phi_{re} \bullet h.Ts$$
$$\Phi_{ri} \bullet hTd$$

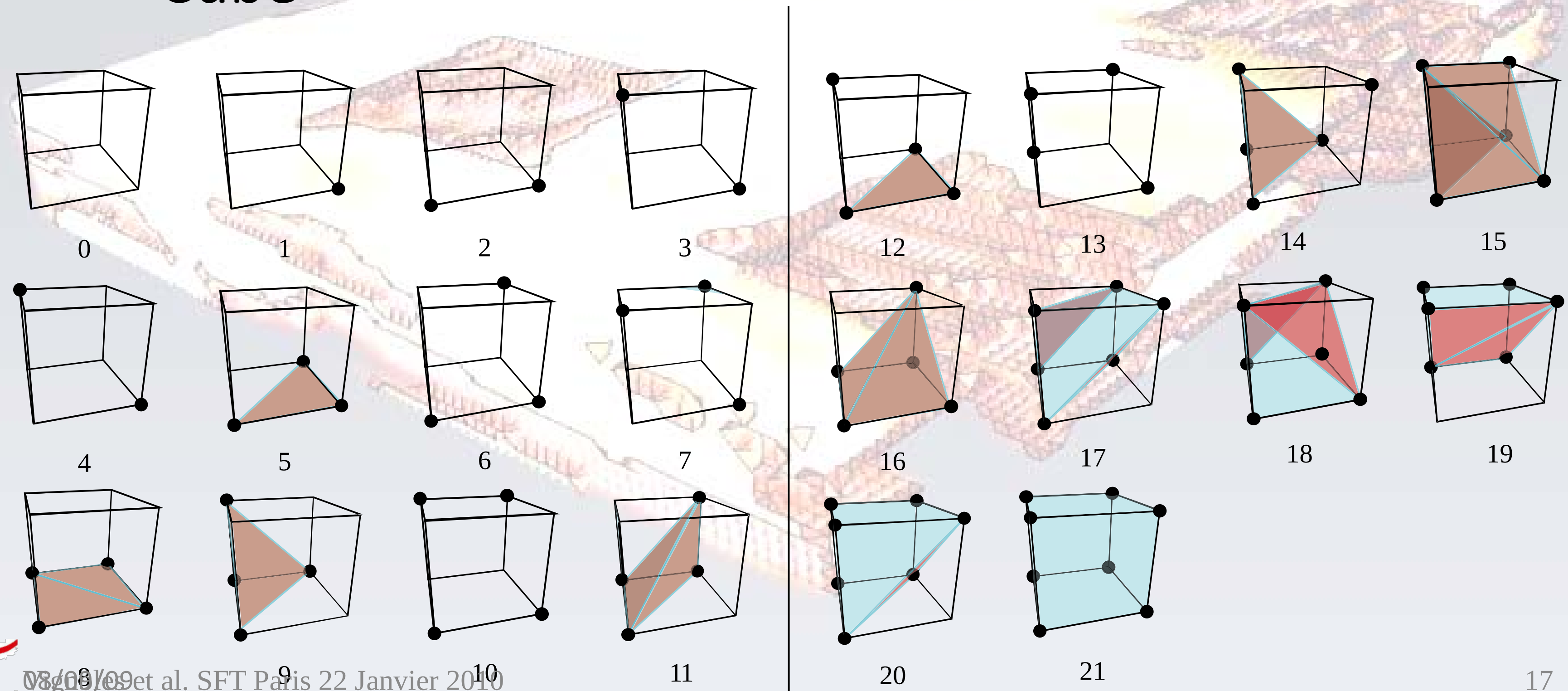
$$\boxed{\Phi_{re}/\Phi_{ce} = Nu_p = h\,\delta r\,/k}$$

~ 1 pixel

$$P = \frac{Nu_p}{1 + Nu_p}$$

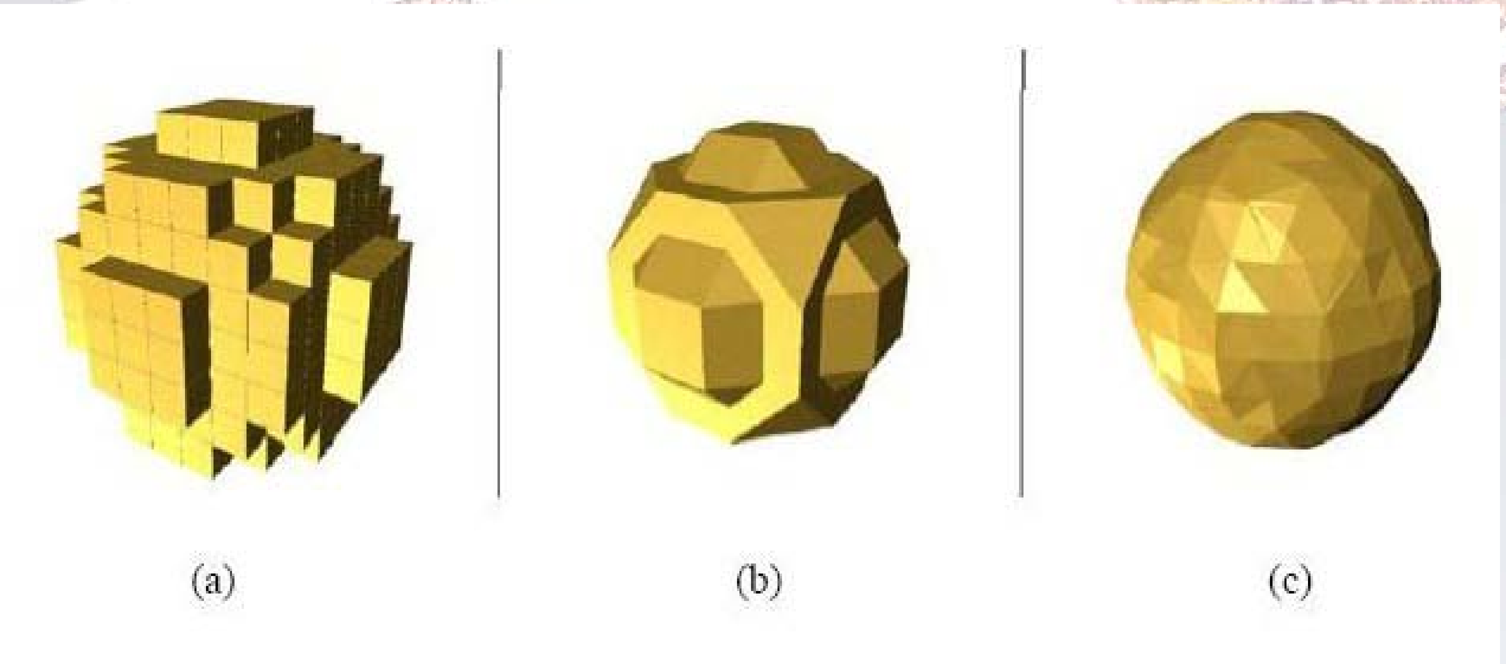
Moyens mis en œuvre

- Prétraitement de l'image
  - Discrétisation de l'image : Simplified Marching Cube



Moyens mis en œuvre

- Prétraitement de l’image
  - Discrétisation de l’image : Simplified Marching Cube

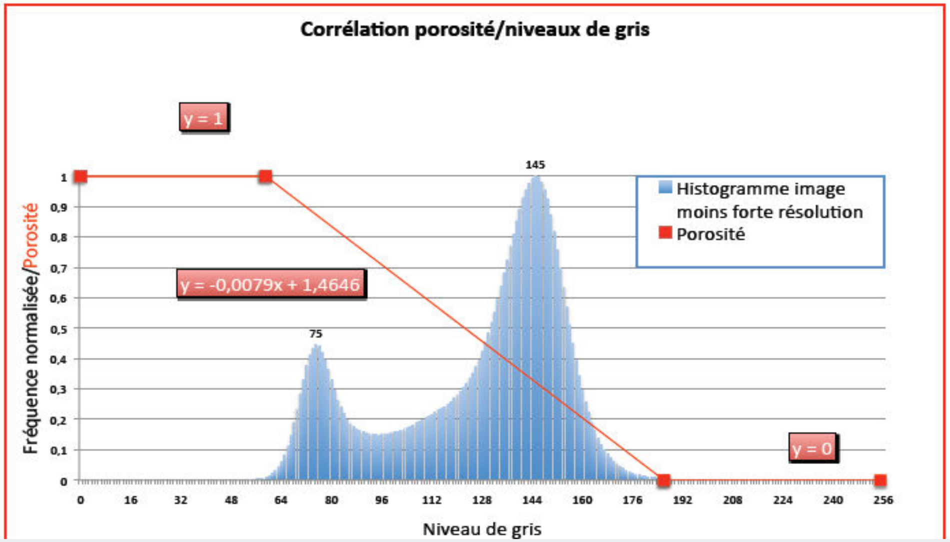


Moyens mis en œuvre

- Prétraitement de l'image
  - Acquisition d'une image : microtomographie X, ou génération « artificielle »
  - Paramétrage de l'image :
    - Calibration :

Niveau de gris

porosité



Moyens mis en œuvre

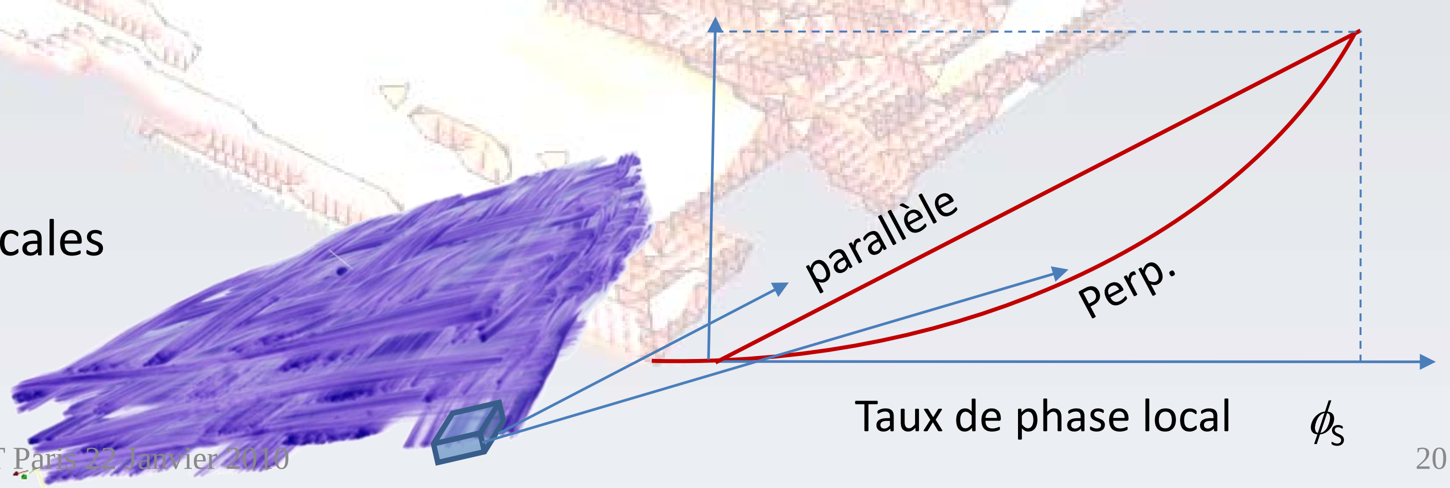
- Prétraitement de l'image
  - Acquisition d'une image : microtomographie X, ou génération « artificielle »
  - Paramétrage de l'image :
    - Loi locale :

porosité

Propriétés locales

Conductivité locale réduite

λ/λ_{SiC}

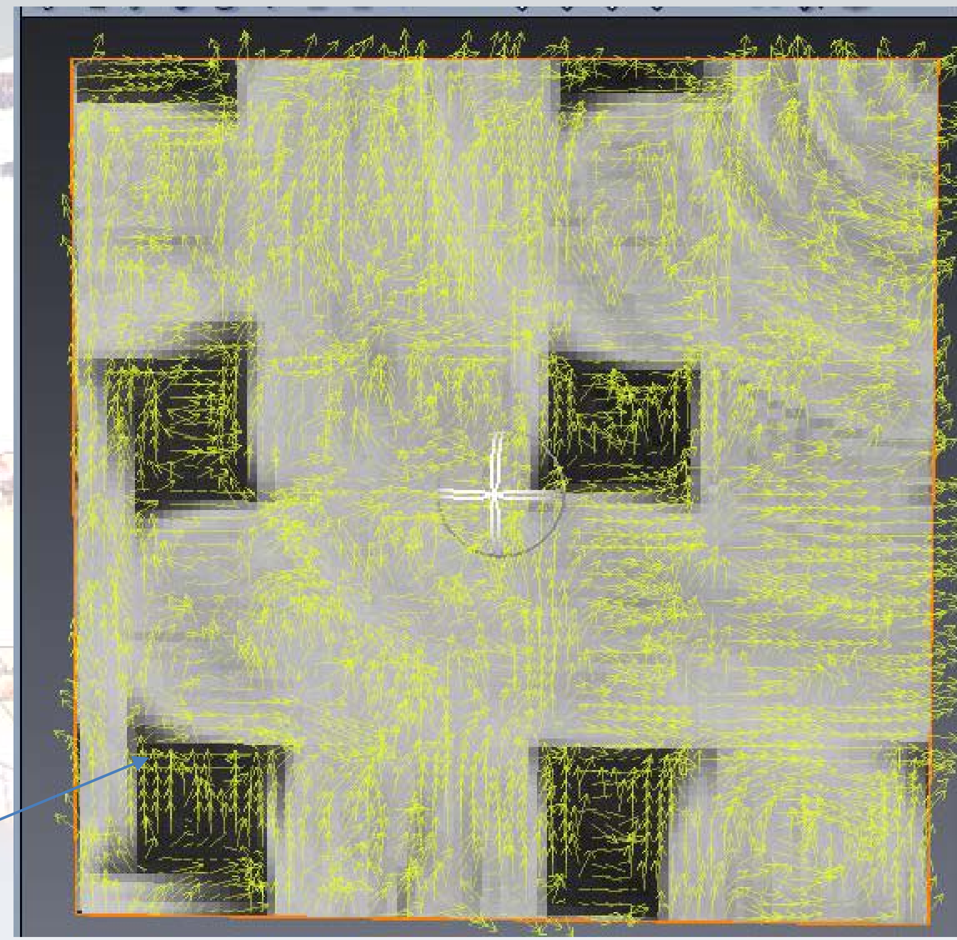


Taux de phase local ϕ_S

Moyens mis en œuvre

- Prétraitement de l'image
  - Détection

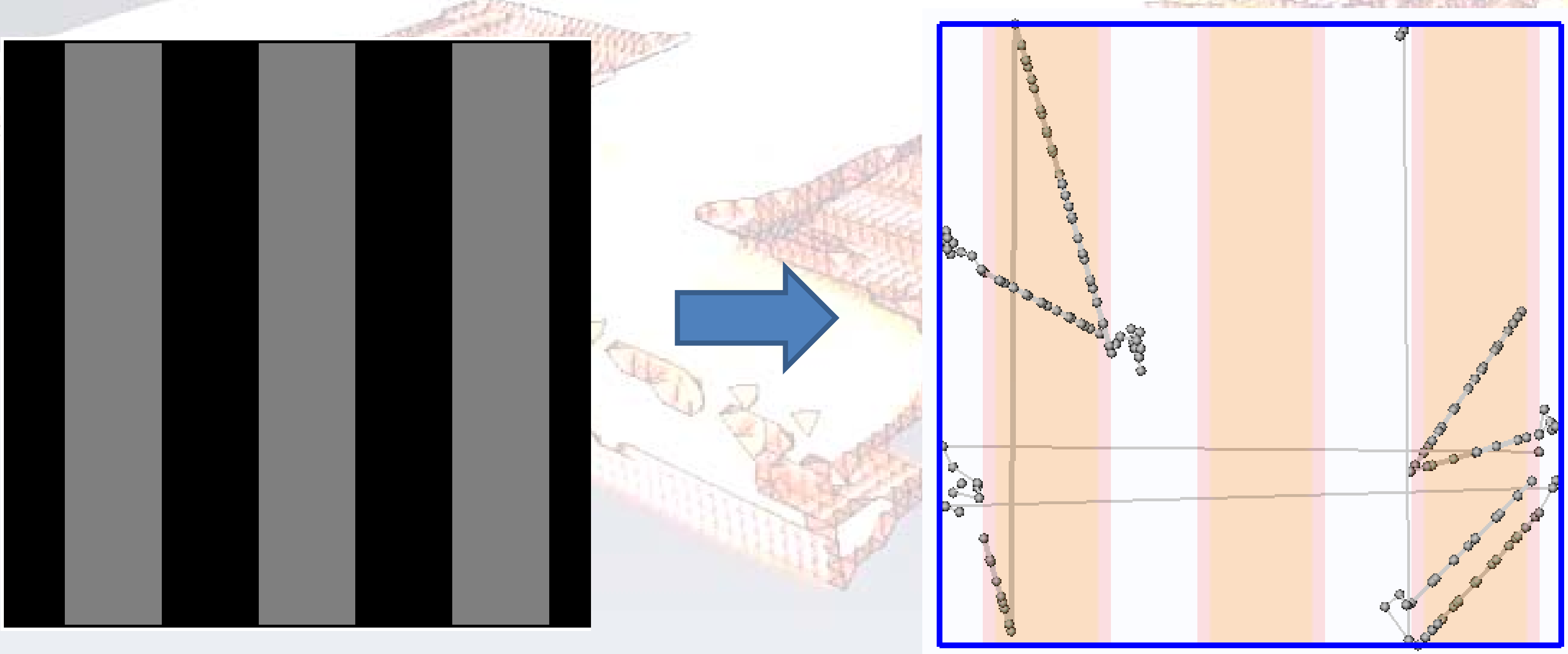
de l'anisotropie du matériau : calcul des orientations



calcul des valeurs propres du tenseur de structure $\underline{\nabla^2 I}$

Principaux résultats

- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Image « feuilletée » avec solution analytique :



Principaux résultats

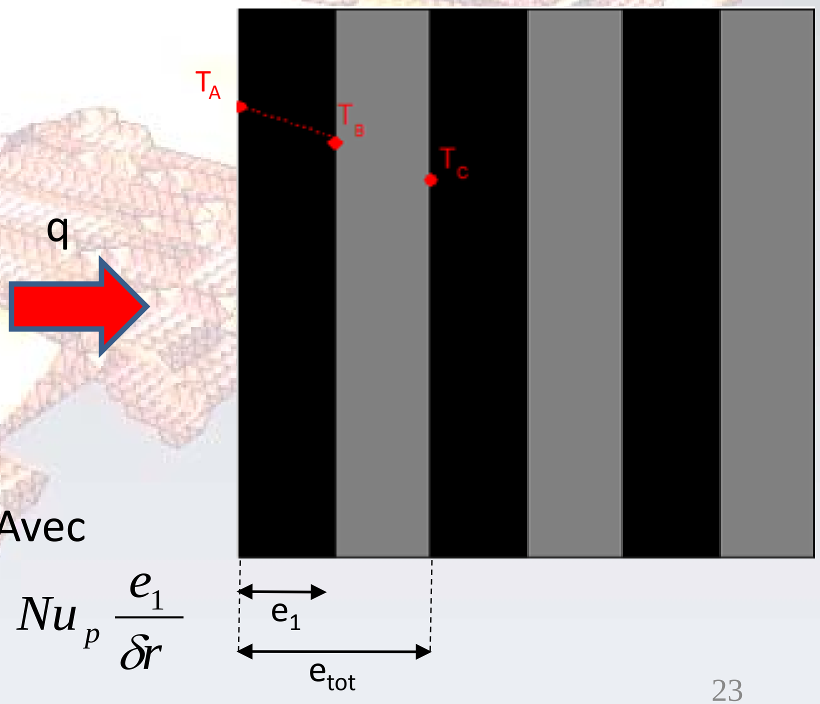
- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Image « feuilletée » avec solution analytique :

Dans le solide :

$$q = \frac{-k_{SiC}.(T_B - T_A)}{e_1}$$

Dans le fluide :

$$q = \varepsilon\sigma(T_B^4 - T_C^4) = \varepsilon\sigma\tilde{T}_B^3(T_B - T_C)$$



$$\Rightarrow \quad k^{eff} = \frac{e_{tot}}{e_1}.\frac{Nu}{1+Nu}.k_{SiC}$$

Avec

$$Nu = Nu_p \frac{e_1}{\delta r}$$

Principaux résultats

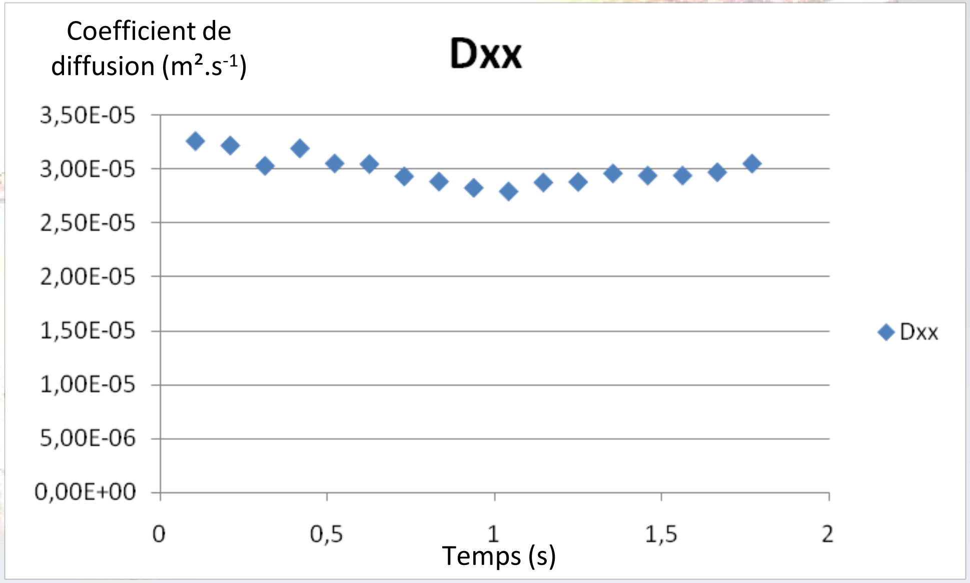
- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Image « feuilletée » avec solution analytique :

$$\lambda^{eff} = (\rho Cp)^{eff} . \alpha^{eff}$$

$$\alpha^{eff} = \left(\frac{e_{tot}}{e_1}\right)^2 . \frac{Nu}{1+Nu} . \alpha_{SiC}$$

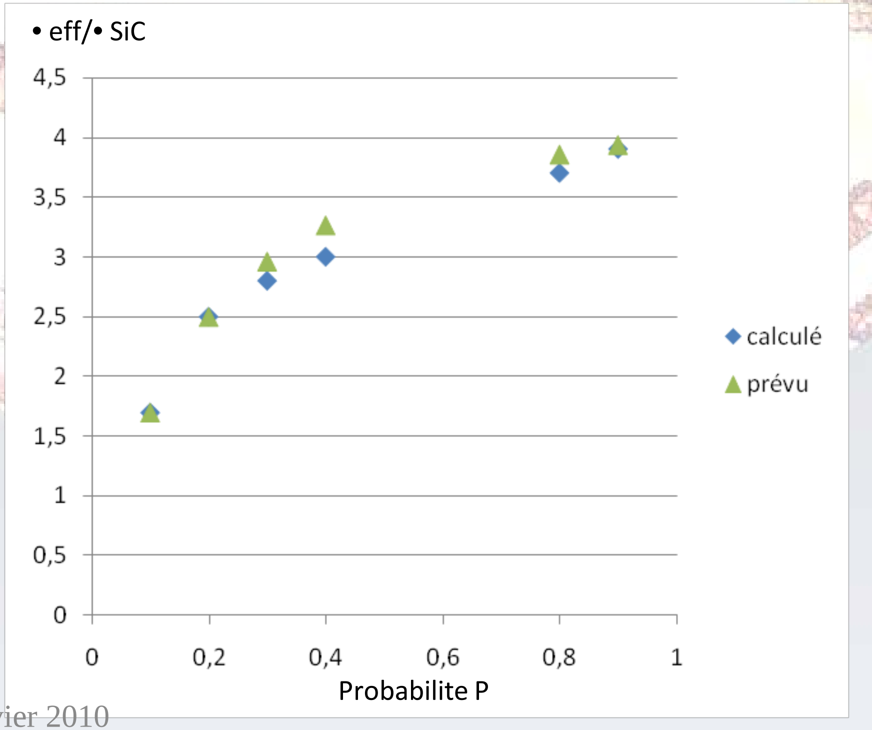
Avec P = 0,4

α^{eff} = 3,26. 10^{-5}m².s^{-1}

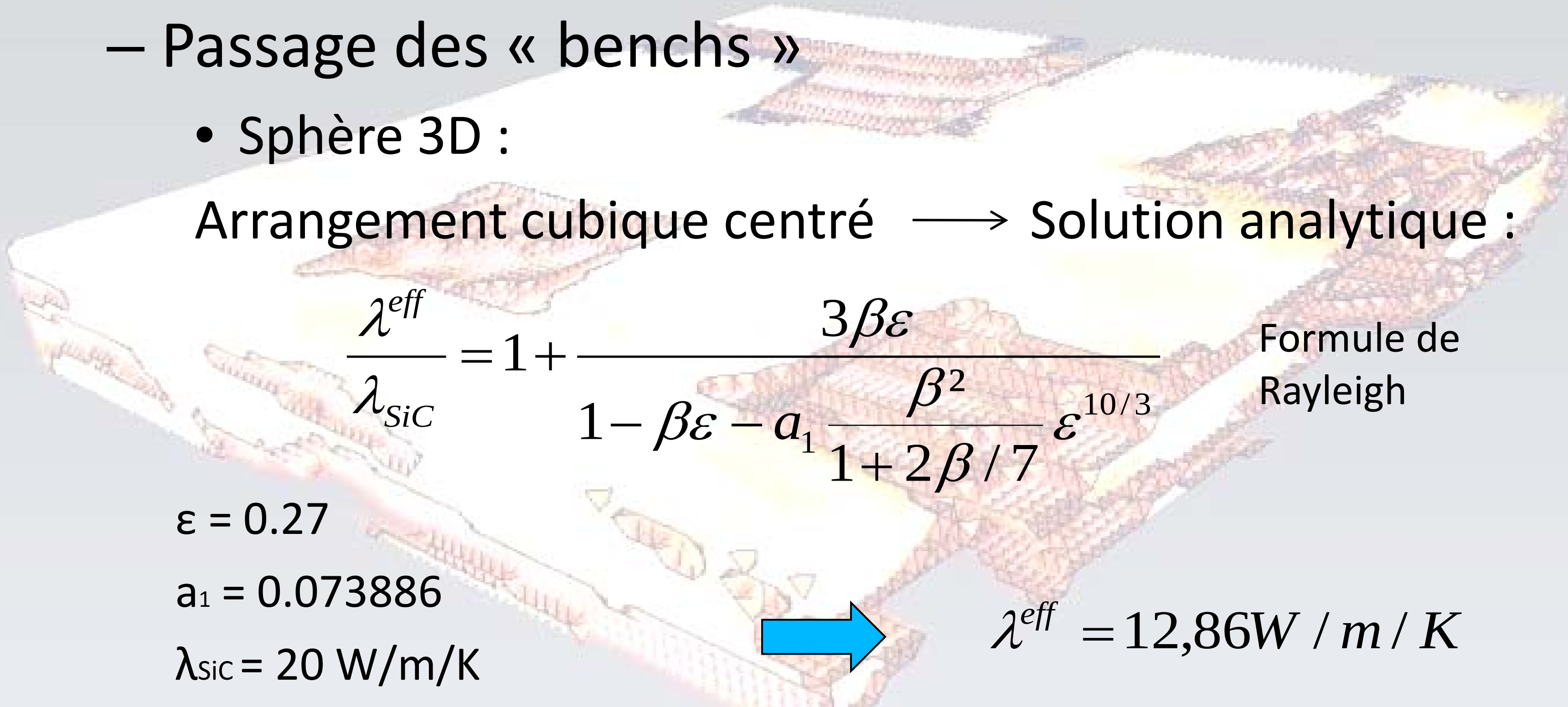


Principaux résultats

- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Image « feuilletée » avec solution analytique :



Principaux résultats



- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :

Arrangement cubique centré $\longrightarrow$ Solution analytique :

$$\frac{\lambda^{eff}}{\lambda_{SiC}} = 1 + \frac{3\beta\varepsilon}{1 - \beta\varepsilon - a_1 \dfrac{\beta^2}{1 + 2\beta/7}\varepsilon^{10/3}}$$

Formule de Rayleigh

$\varepsilon = 0.27$

$a_1 = 0.073886$

$\lambda_{SiC} = 20$ W/m/K

$$\beta = \frac{\lambda_{cavité} - \lambda_{SiC}}{\lambda_{cavité} + 2\lambda_{SiC}} = -1/2$$

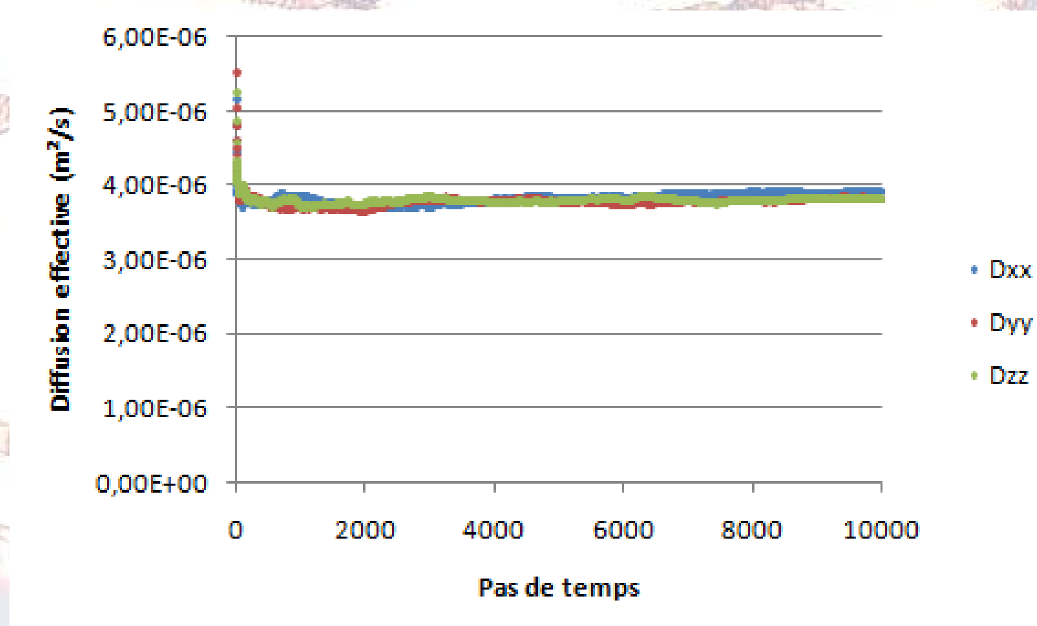
$$\lambda^{eff} = 12{,}86 W/m/K$$

Principaux résultats

- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :

$$\lambda^{eff} = (\rho Cp)^{eff} \, \alpha^{eff}$$

$$\lambda^{eff} = 12{,}72 W / m / K$$



Principaux résultats

- Code sans rayonnement
  - Validation progressive du code
  - Application à l'image réelle

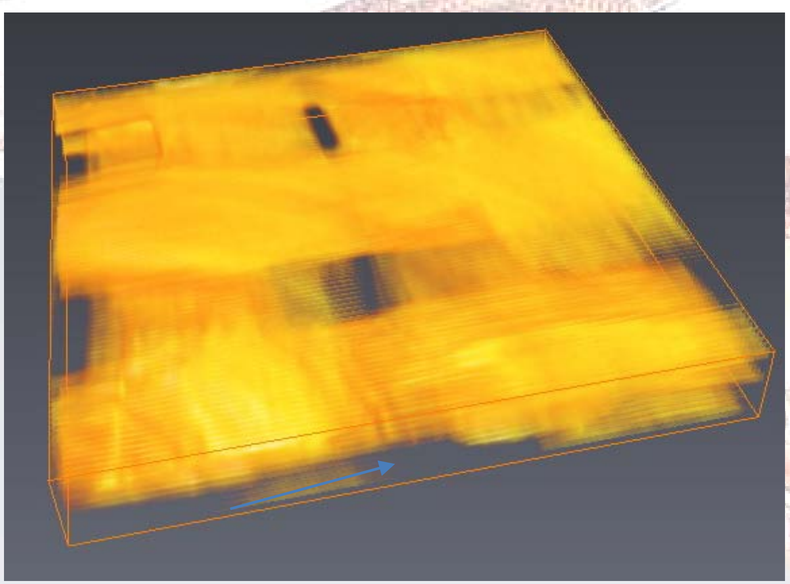
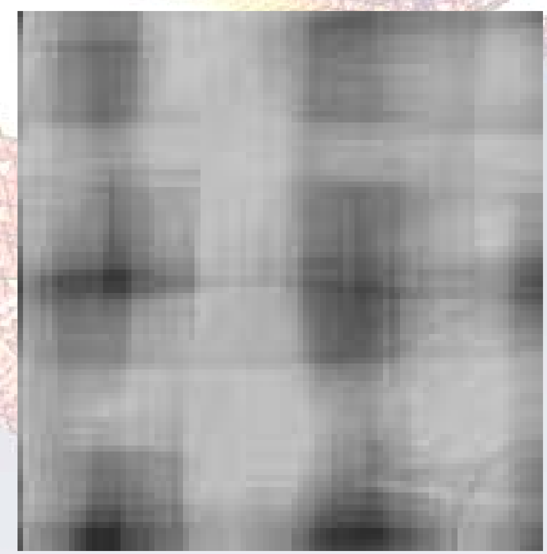


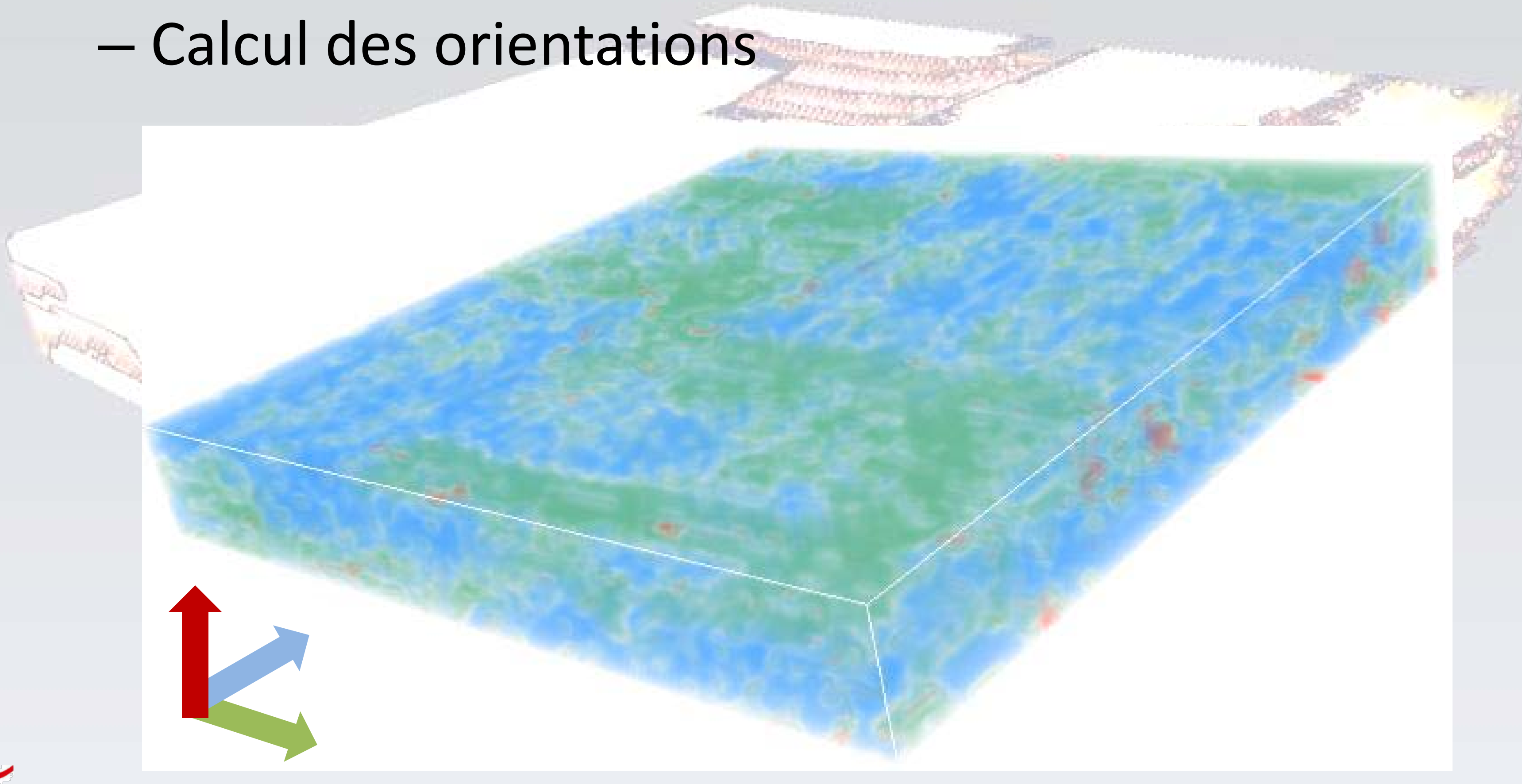
Image tomographiée



Projection sur l'ensemble de l'épaisseur

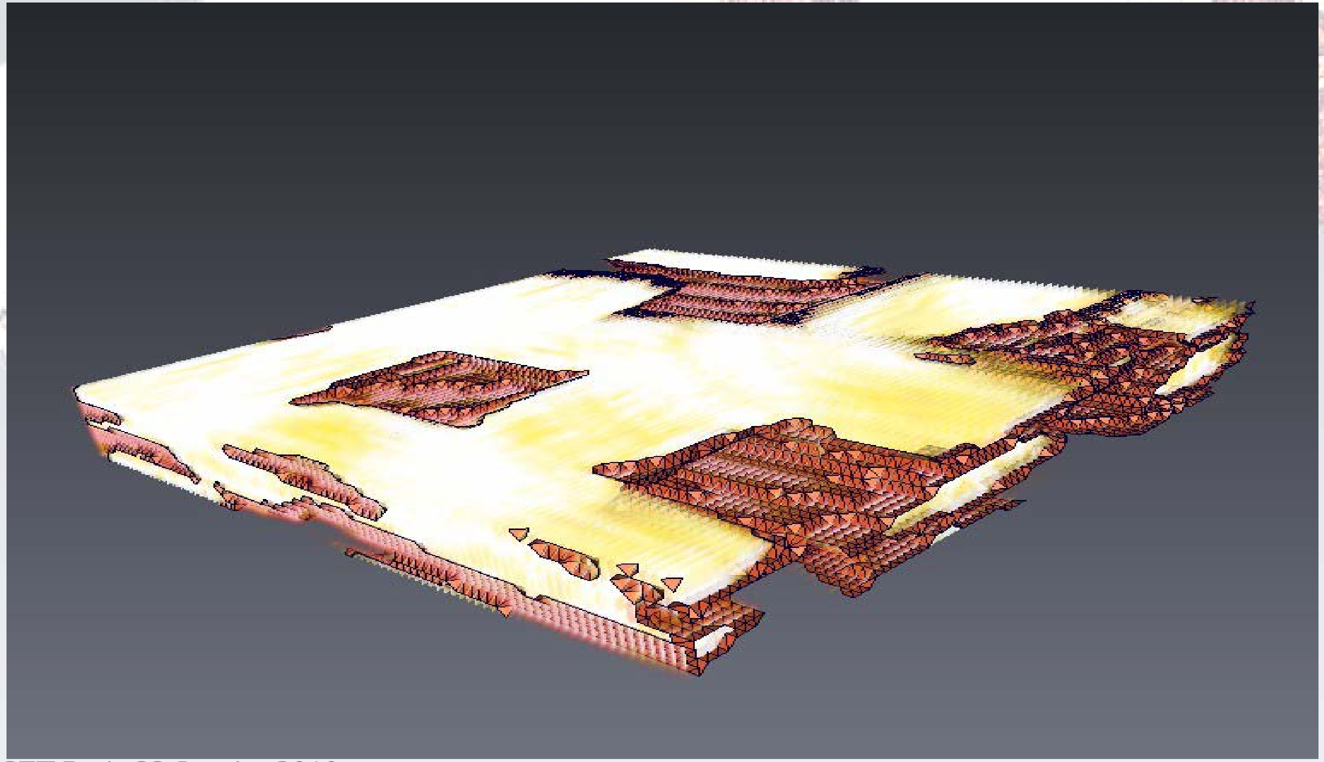
Principaux résultats

- Code sans rayonnement
  - Calcul des orientations



Principaux résultats

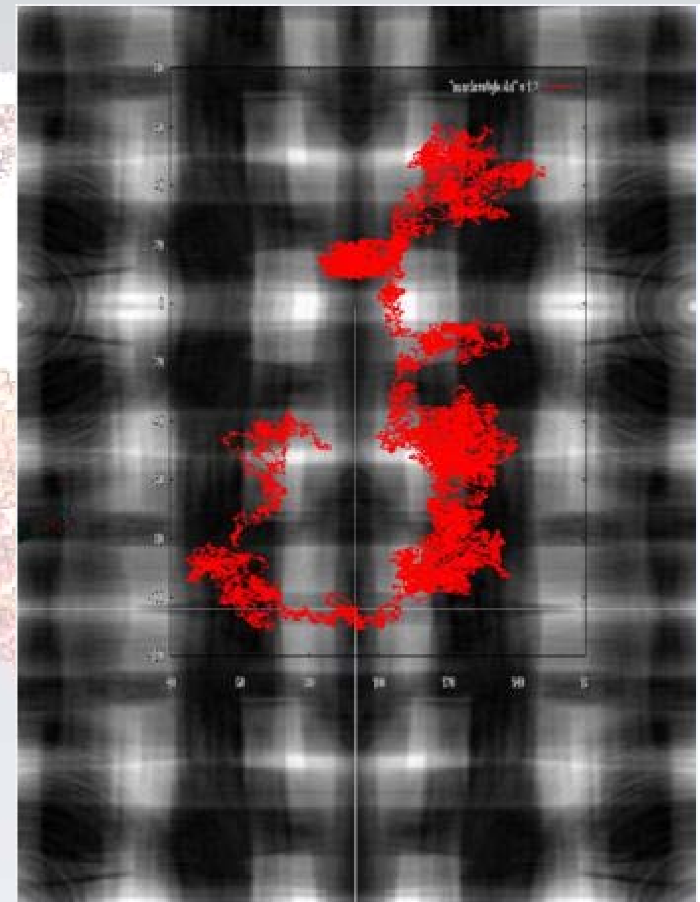
- Code sans rayonnement
  - Discrétisation fluide/solide (SMC)

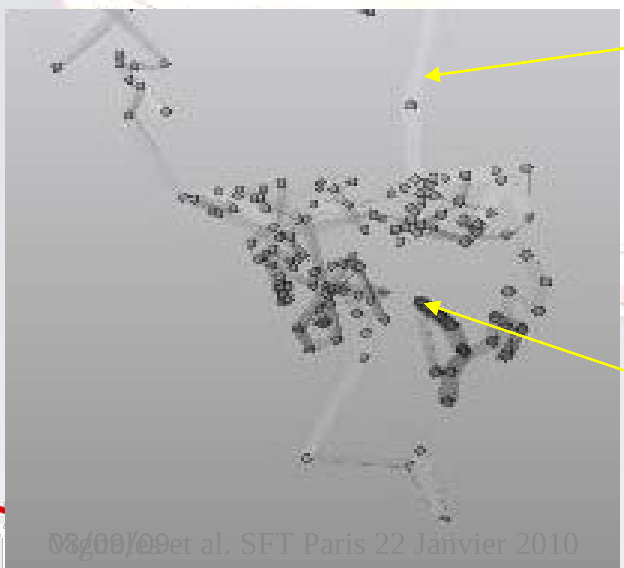


Principaux résultats

- Code sans rayonnement
  - Résultats obtenus :

-Prise en compte de l'anisotropie et de l'hétérogénéité du matériau



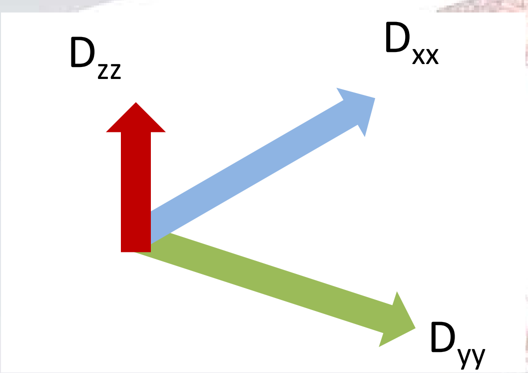


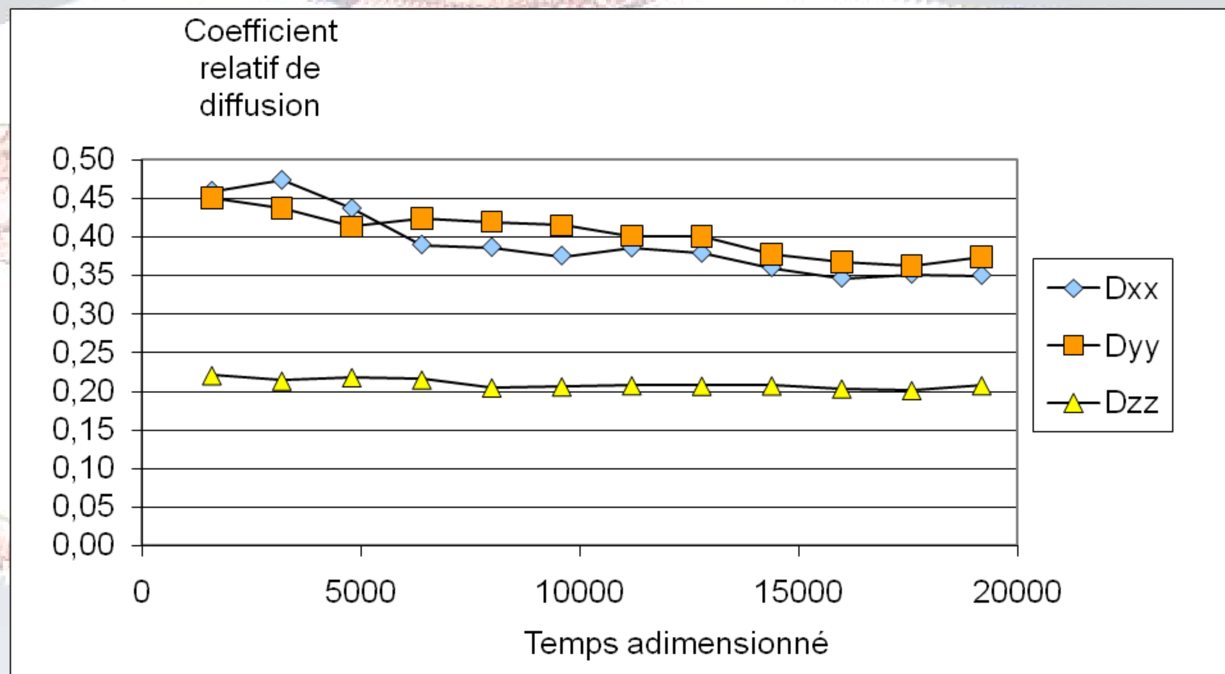
Points clairs = Matériau bon conducteur = pas de marche longs

Points sombres = Matériau peu conducteur = pas de marche courts

Principaux résultats

- Code sans rayonnement
  - Résultats obtenus :
    - Convergence



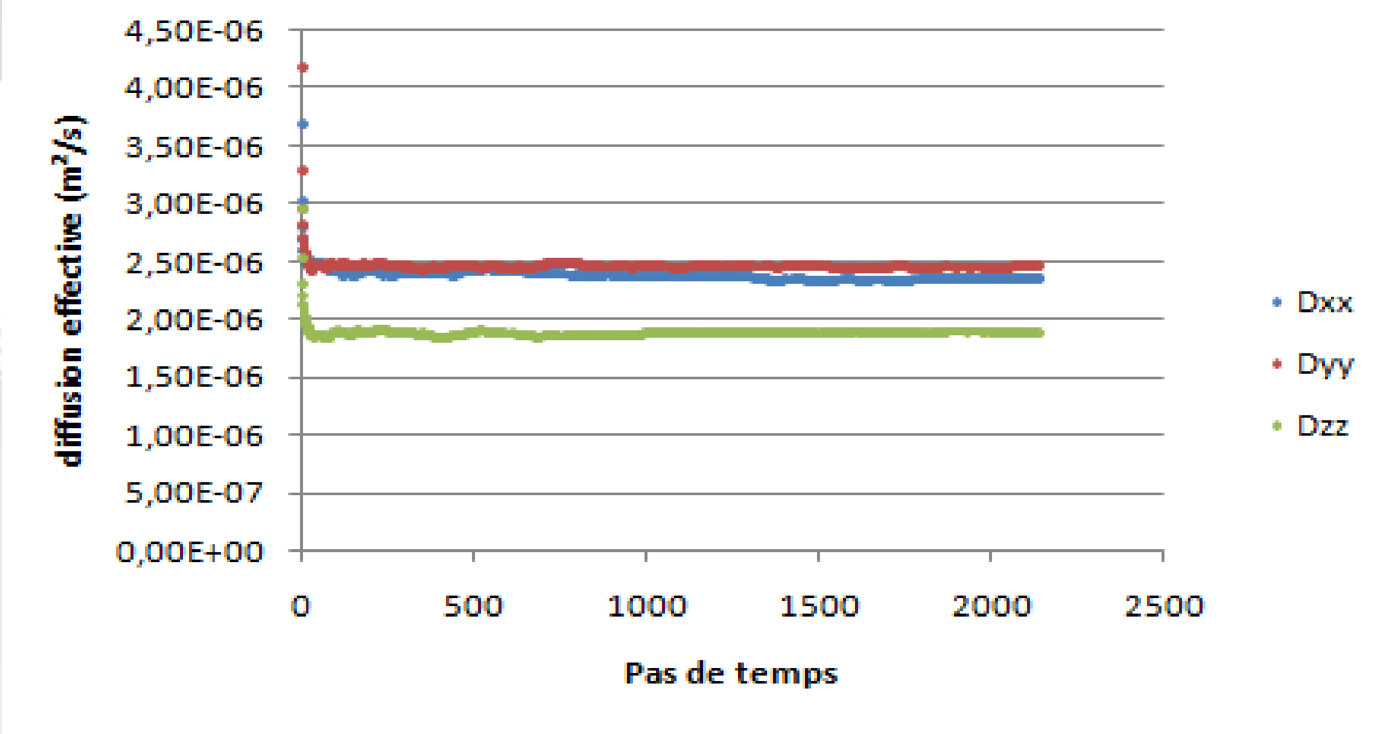


    - Valeurs du tenseur effectif : 37% en x et y , 20% en z !

=> la texturation macro pilote l'anisotropie globale effective

Principaux résultats

- Code avec rayonnement : 10% de réduction d'anisotropie



Principaux résultats

- Réponse au besoin
  - Analyse dimensionnelle du problème posé
    - Taille de cavités rayonnantes ~ 100 µm
    - Conductivité du SiC ~20 W/m/K
    - Emissivité ~ 0.7
    - => Nusselt « de cavité » ~ $3.\ 10^{-3}$

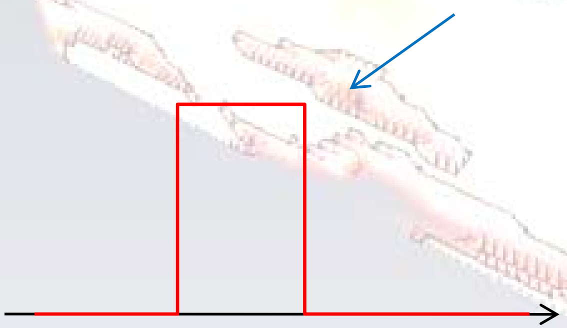
Calcul avec radiation seulement nécessaire pour l'**anisotropie**

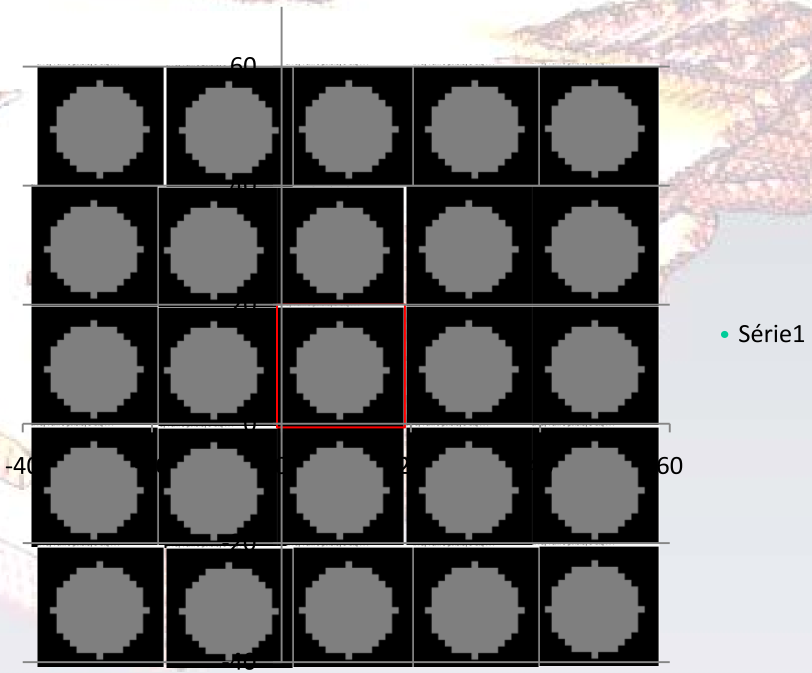
Conclusion et perspectives

- Validation progressive du code avec rayonnement sur des images simplifiées
- Validation du code sans rayonnement sur image réelle : convergence rapide, détection de l'anisotropie
- Application à l'image réelle Calcul de la conductivité effective du matériau.
- Comparaison avec les résultats précédemment obtenus sans rayonnement, afin d'observer son influence.
- Comparaison avec d'autres méthodes (Eléments finis)

Marches aléatoires

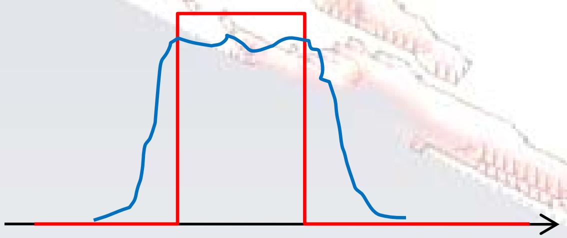
Concentration marcheurs

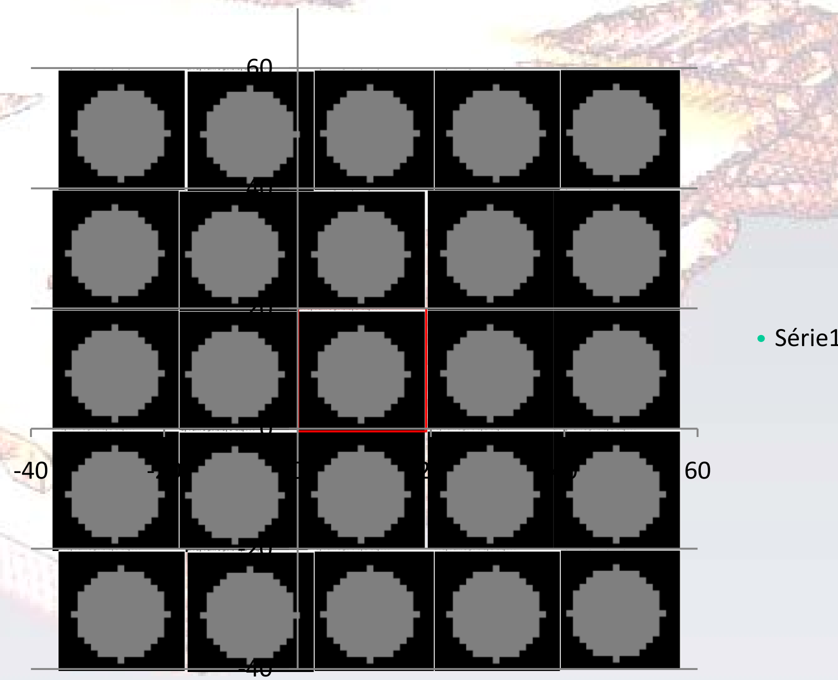




Principaux résultats

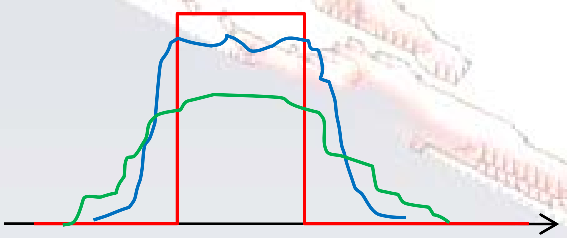
- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :

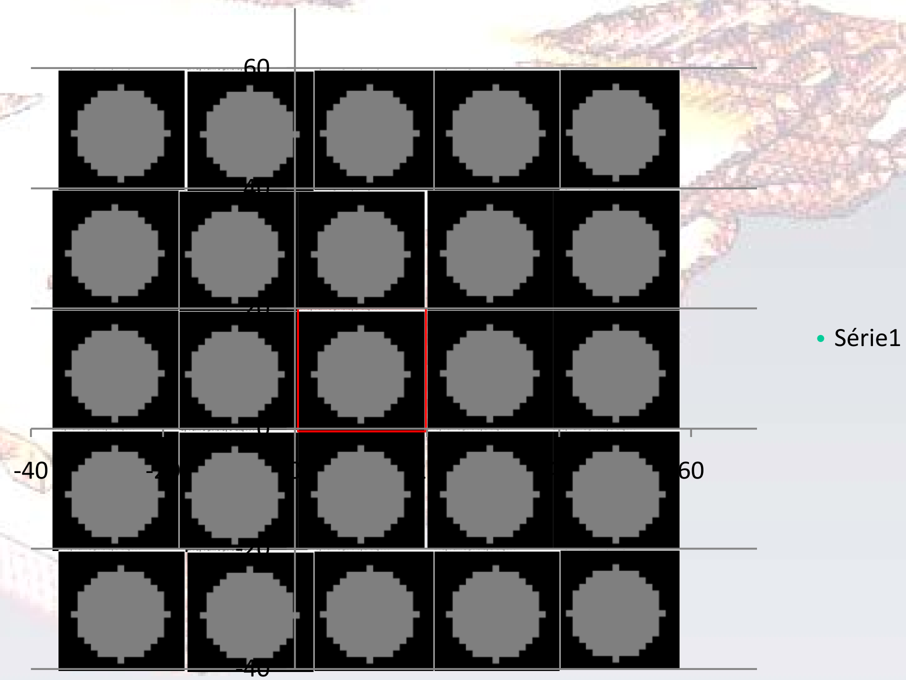




Principaux résultats

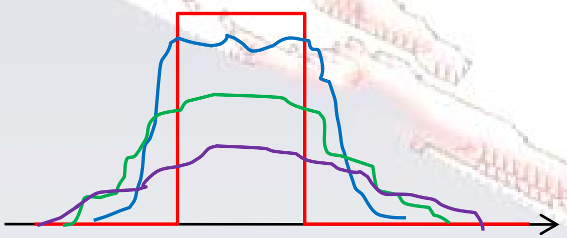
- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :

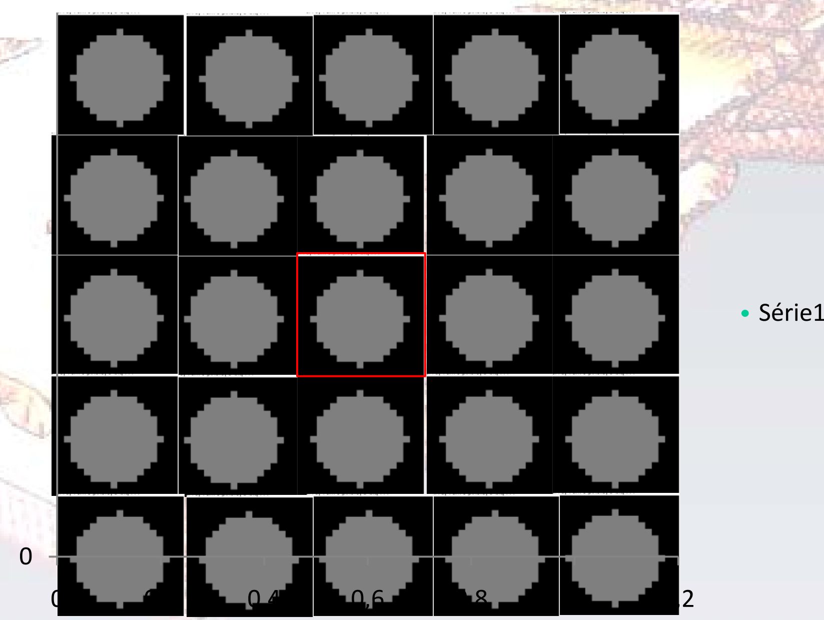




Principaux résultats

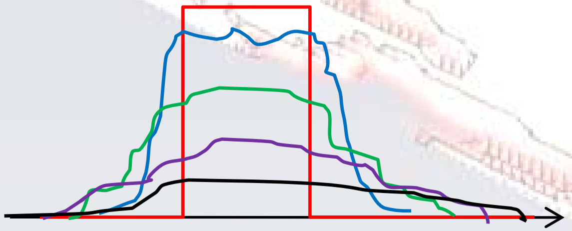
- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :



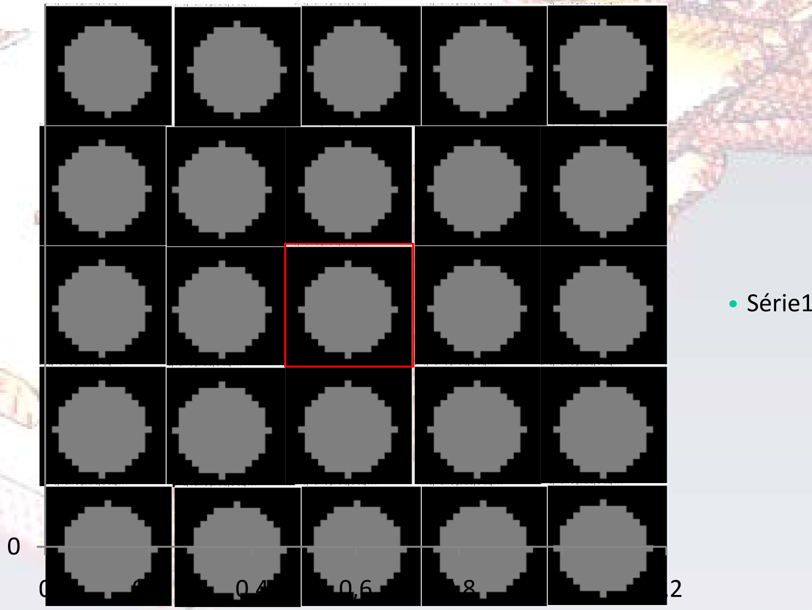


Principaux résultats

- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Sphère 3D :



Gaussiennes, solutions de l'équation de diffusion



Principaux résultats

- Code avec rayonnement
  - Passage des « benchs »
    - Cylindre 2D :

Parcours d'un marcheur sur un intervalle de temps