

## MODÉLISATION THÉRIQUE MULTI-ÉCHELLE DE MILIEUX HÉTÉROGÈNES

D. ROCHAIS, F. ENGUEHARD  
CEA – LE RIPAUT

**L**es moyens de description de la microstructure de matériaux complexes par tomographie X ou par des algorithmes adaptés ont ouvert la voie au calcul des propriétés thermiques de ces milieux. À partir de ces descriptions, nous avons développé une démarche originale de modélisation multi-échelle des transferts par conduction et rayonnement. Cette démarche a pu être appliquée à des matériaux de types composites, alvéolaires, multicouches, superisolants nanoporeux, conçus et élaborés par le CEA pour être utilisés, par exemple, pour leurs propriétés de tenue à une rentrée atmosphérique, de diffuseur de gaz à haute température, d'isolation thermique... Dans cet article, nous illustrons cette approche par deux exemples traitant l'un de la conduction et l'autre du rayonnement.

### Conduction

Pour modéliser le transfert conductif au sein d'un milieu hétérogène, il faut d'abord connaître les propriétés thermiques des constituants de base. Celles-ci sont soit mesurables (jusqu'à l'échelle du  $\mu\text{m}$ ) soit modélisables (échelle du  $\text{nm}$  [1]). Ensuite, il faut décrire la microstructure du matériau, éventuellement à plusieurs échelles spatiales suivant la taille et l'agencement des constituants. Le développement de la tomographie X et l'évolution des moyens informatiques permettent de reconstruire des volumes de "matière numérique" représentatifs des matériaux. Des codes de calcul spécifiques, s'inspirant de techniques expérimentales de type "plaque chaude gardée" (PCG) et "méthode flash" [2], ont été développés pour déterminer la conductivité thermique et la diffusivité thermique effectives de ces volumes numériques. La figure 1 représente la simulation d'un essai PCG appliqué à un feutre constitué de fibres de SiC (carbure de silicium). La méthode de résolution repose sur une discrétisation par différences finies du volume de simulation. Les propriétés thermiques locales, associées soit à une fibre, soit au gaz, sont attribuées à chaque cube élémentaire supposé homogène et isotrope. Une différence de température est imposée entre deux faces du volume (les autres faces étant adiabatiques). Le champ de température une fois calculé, le flux transitant entre les faces chaude et froide est déterminé et la conductivité thermique effective dans le sens du gradient peut être déduite.

### Rayonnement

Lorsque nous avons affaire à des matériaux poreux de faible conductivité thermique effective ou portés à de hautes températures, le transfert radiatif en leur sein ne peut pas être ignoré. Ces dernières années, les matériaux superisolants thermiques nanoporeux ont fait l'objet d'études de modélisation radiative au CEA.

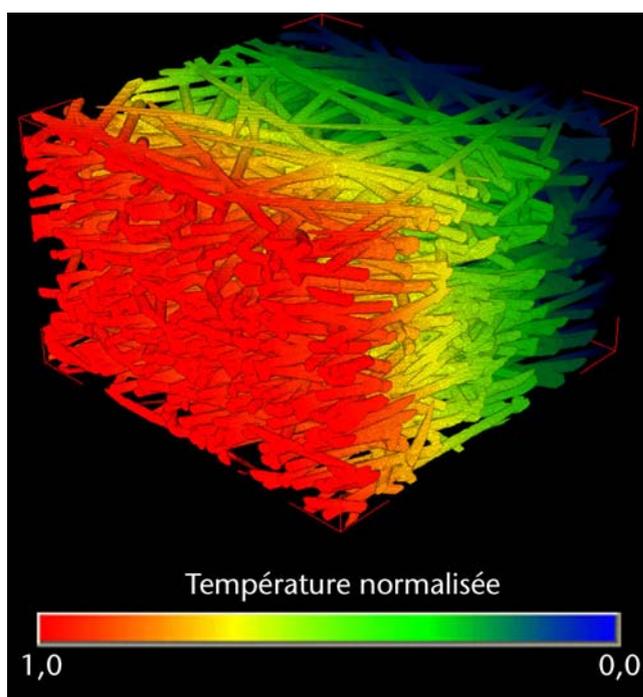


Figure 1  
Détermination, par la technique PCG numérique, de la conductivité thermique effective d'un feutre de SiC à partir d'une tomographie X de sa microstructure ( $1,7 \times 1,7 \times 1,1 \text{ mm}^3$ ).

Ces études visaient deux objectifs associés à deux échelles d'observation différentes : d'une part, à l'échelle macroscopique, mettre en œuvre des modèles d'homogénéisation permettant de rendre compte du transfert radiatif au sein de ces matériaux en fonction de leur composition et de la température à laquelle ils sont portés, et d'autre part, à une échelle plus locale, étudier l'impact de la microstructure de ces matériaux sur leurs propriétés radiatives effectives.

La première étude, basée sur la notion de conductivité thermique radiative de Rosseland, a essentiellement révélé le rôle clé joué par les microparticules opacifiantes dans l'extinction du flux radiatif : dispersées au sein de la matrice nanoporeuse de silice en très faible fraction volumique, ces microparticules peuvent atténuer le transfert radiatif d'un ordre de grandeur lorsque leurs diamètre et matériau constitutif sont correctement choisis [3].

Dans le cadre de la seconde étude, les propriétés radiatives de matrices nanoporeuses de silice ont été déterminées expérimentalement sur un large spectre de longueurs d'onde (entre 0,2 et 20  $\mu\text{m}$ ). L'analyse de ces données aux petites longueurs d'onde (d'ordre de grandeur équivalent à celui de l'échelle spatiale de la structure des matrices), a abouti à l'introduction de la notion d'agrégat représentatif de nanoparticules de silice et à la mise au point de modèles spécifiques rendant compte de l'interaction rayonnement-agrégat (figure 2) [4], [5].

### Perspectives

Les techniques de modélisation thermique présentées ici constituent une boîte à outils permettant de prédire les propriétés d'ensemble de matériaux hétérogènes à partir de leurs données microstructurales pertinentes.

Pour compléter cette approche, nous travaillons à des techniques d'homogénéisation portant sur le transfert thermique couplé conduction-rayonnement.

### Références

- [1] G. DOMINGUES, D. ROCHAIS, S. VOLZ, "Thermal contact resistance between two nanoparticles", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, **5**, p. 153-156 (2008).
- [2] D. ROCHAIS, G. LE MEUR, G. DOMINGUES, V. BASINI, "Microscopic thermal characterization of HTR particle layers", *Nuclear Engineering and Design*, **238**, p. 3047-3059 (2008).
- [3] F. ENGUEHARD, "Multi-scale modeling of radiation heat transfer through nanoporous superinsulating materials", *International Journal of Thermophysics*, **28**, p. 1693-1717 (2007).
- [4] F. ENGUEHARD, "Mie theory and the discrete dipole approximation – Calculating radiative properties of particulate media, with application to nanostructured materials", dans *Thermal Nanosystems and Nanomaterials*, édité par S. Volz, Springer, accepté pour publication en mai 2008.
- [5] S. LALLICH, F. ENGUEHARD, D. BAILLIS, "Experimental determination and modeling of the radiative properties of silica nanoporous matrices", *ASME Journal of Heat Transfer*, accepté pour publication en novembre 2008.

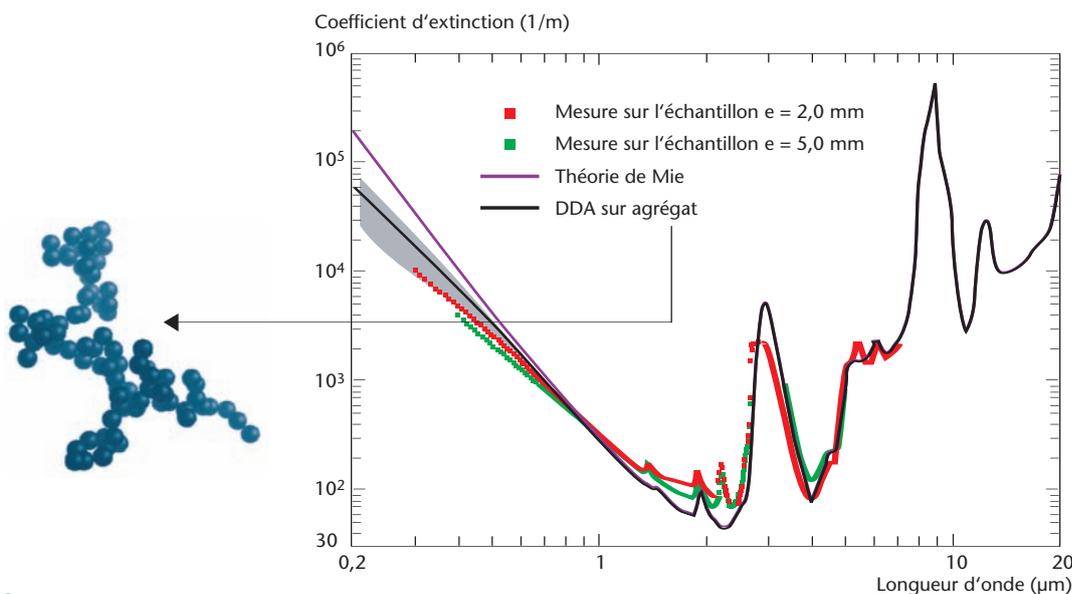


Figure 2

Spectres de coefficient d'extinction d'une matrice nanoporeuse de silice. Carrés rouges et verts : spectres expérimentaux. Courbe violette : spectre prévu par la théorie de Mie. Bande et courbe moyenne noires : application de la technique d'approximation dipolaire discrète (DDA) à l'agrégat représentatif montré sur le graphe [5].