

Couplage conducto-radiatif de structures poreuses hétérogènes dans un maillage tétraédrique par méthode hybride

Léo Royon^{1,2,*}, Frédéric Joly¹, Cyril Daoût², Denis Rochais², Yassine Rouizi¹

¹ Université Evry Paris Saclay, Laboratoire de Mécanique et d'Energétique d'Evry
40, rue du Pelvoux, 91020 Evry cedex, France

² CEA, DAM, Le Ripault, F-37260, Monts, France

*leo.royon@universite-paris-saclay.fr

Résumé - Nous présentons un nouveau modèle numérique de couplage de la conduction et du rayonnement thermique, permettant de caractériser des matériaux hétérogènes à structure complexe soumis à des hautes températures. La conduction est résolue de manière déterministe par éléments finis, et le rayonnement de manière stochastique par suivi de rayons, l'ensemble de la simulation ayant lieu dans un maillage tétraédrique non structuré. Par ailleurs, ce code de calcul permet de traiter des volumes numériques proches d'un VER sur un ordinateur de bureau et en des temps de calcul parfaitement raisonnables malgré son aspect stochastique. Pour illustrer les capacités de cet outil numérique, nous présentons une étude paramétrique sur l'évolution des profils de flux radiatif et conductif pour un matériau fibreux dont la géométrie est issue d'une tomographie par rayons X.

1. Introduction

Il existe de nombreuses situations lors desquelles des matériaux isolants sont portés à une température dépassant le millier de kelvin : la production d'énergie, les fours industriels ou encore la protection d'objets envoyés en hautes altitudes [1]. C'est dans ce contexte que le CEA Le Ripault a initié depuis deux décennies une démarche de "matériaux numériques", c'est-à-dire de modélisation des matériaux dans un environnement numérique afin de réduire le temps, le coût, et la complexité des expérimentations [2].

Les matériaux étudiés ici sont des céramiques structurées en fibres, interconnectées, qui piègent de l'air dans des pores. L'intérêt de ce type de structuration, que l'on peut retrouver au quotidien dans l'isolation des habitations, est de profiter de la très faible conductivité de l'air [3]. Si la taille des pores est assez faible, l'apport de la convection dans l'air est négligeable et ce dernier agit alors comme isolant. Cependant, à haute température, le transfert par rayonnement entre les fibres devient significatif et peut même devenir le mode de transfert prédominant, d'où la nécessité de le modéliser de manière réaliste.

L'objectif de ce travail est de présenter un code de calcul couplant la conduction avec le rayonnement dans des structures tri-dimensionnelles complexes, par exemple fibreuses, et avec un coût en temps de calcul et en mémoire vive limité.

Cet article présente d'abord les spécificités de notre modèle, puis les profils de température et flux moyen qu'il nous est possible d'obtenir en étudiant un échantillon numérique de matériau réel obtenu par tomographie à rayons X. Nous étudions l'évolution de l'influence du rayonnement avec la température. Finalement, il nous est possible d'obtenir une conductivité apparente en fonction de la température, et de la comparer à la conductivité apparente du modèle de diffusion de Rosseland.

2. Présentation du modèle

On considère un domaine ouvert et régulier $\mathcal{D}$ bordé par sa frontière $\partial\mathcal{D}$ de normale $\underline{n}$ (voir Fig. 1). Ce domaine est l'union de deux sous-domaines $\mathcal{D}_1$ et $\mathcal{D}_2$ aux propriétés physiques différentes. On considère dans cette communication que le domaine 1 est transparent vis-à-vis du rayonnement (de l'air), le domaine 2 étant opaque (fibres solides). La frontière entre ces deux sous-domaines est notée $\partial\mathcal{D}_{12}$. Le domaine est bordé par deux corps noirs en $z = 0$ et $z = L$ à des températures $T_0 + \Delta T$ et T_0 . La frontière $\partial\mathcal{D}$ est décomposée en $\partial\mathcal{D}_a$, les frontières adiabatiques, $\partial\mathcal{D}_1$ les frontières entre le domaine 1 et un corps noir et $\partial\mathcal{D}_2$ celles qui séparent le domaine 2 des corps noirs. Ces corps noirs sont virtuels, et ne sont représentés sur la figure 1 que pour aider à la compréhension.

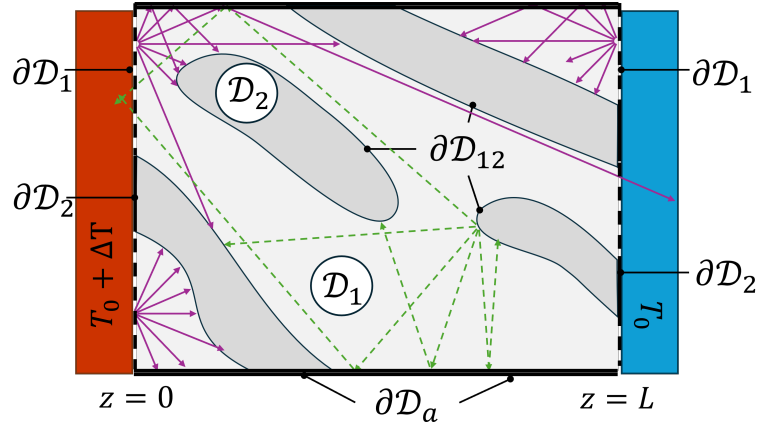


Figure 1 : Domaines considérés et conditions aux limites radiatives dans le cas d'une température imposée par un corps noir.

L'évolution de la température dans ce domaine est modélisée par l'équation de la chaleur, associée aux conditions aux limites suivantes :

- sur les frontières $\partial\mathcal{D}_1$ et $\partial\mathcal{D}_2$ nous imposons la température du corps noir correspondant ;
- chaque élément de la frontière $\partial\mathcal{D}_1$ émet un flux radiatif diffus correspondant à la température du corps noir considéré (rayons mauves en traits pleins).
- les frontières $\partial\mathcal{D}_{12}$ émettent un rayonnement diffus (rayons verts hachurés). Les rayons touchant ces frontières sont soit absorbés, soit subissent une réflexion spéculaire.
- les frontières $\partial\mathcal{D}_a$ sont adiabatiques. Les rayons touchant ces frontières subissent une réflexion spéculaire.

2.1. Résolution de la conduction - Éléments finis

L'approche retenue est de modéliser la conduction et le rayonnement dans un maillage tétraédrique non-structuré. Ce type de maillage est particulièrement intéressant pour deux aspects. Tout d'abord le fait de nécessiter moins d'éléments géométriques pour représenter une géométrie réelle permet de réduire le nombre de degrés de liberté du problème, et donc de diminuer les besoins en mémoire vive du programme. De plus, par rapport à une géométrie voxélisée, le maillage non structuré n'impose pas de direction privilégiée. L'équation de la chaleur, d'abord écrite en formulation variationnelle faible, s'écrit sous forme matricielle :

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + (\mathbf{K} + \mathbf{H}) \mathbf{T} = \mathbf{L} + \mathbf{P}(\mathbf{T}) \quad (1)$$

$\mathbf{C}$, $\mathbf{K}$ et $\mathbf{H}$ sont respectivement les matrices de capacité, de conductivité thermique et de conditions aux limites convectives. Ces matrices sont creuses, de rang N où N est le nombre de nœuds (donc de degrés de liberté du maillage), symétriques et définies positives. $\mathbf{L}$ représente le vecteur des sollicitations linéaires (par exemple les conditions aux limites convectives), alors que $\mathbf{P}$ ($\mathbf{T}$) représente les sollicitations dues au rayonnement thermique non linéaire, donc de fibre à fibre, mais aussi avec l'extérieur. L'obtention numérique de ce flux est détaillée dans la section suivante.

2.2. Obtention du flux radiatif - Suivi de rayons

On cherche à résoudre l'équation du Transfert Radiatif (ETR) au sein d'isolants hétérogènes :

$$\begin{aligned} \underline{\omega} \cdot \underline{\nabla} L_\nu(\underline{x}, \underline{\omega}) = & -(\kappa_{abs} + \kappa_{dif}) L_\nu(\underline{x}, \underline{\omega}) \\ & + \kappa_{abs} n^2 L_\nu^0(T) + \int_{4\pi} \kappa_{dif} p(\underline{\omega}|\underline{\omega}') L_\nu(\underline{x}, \underline{\omega}') d\omega'. \end{aligned} \quad (2)$$

Au vu de la complexité de résolution de l'ETR par des méthodes déterministes, les méthodes stochastiques, nommées historiquement de "Monte-Carlo" sont étudiées depuis le début des années 50 [1]. Elles consistent à suivre les trajets de paquets de photons (des "rayons"), qui seront soumis par exemple à l'optique géométrique si les dimensions considérées sont adéquates, et à mesurer leurs interactions avec le milieu. Ces méthodes permettent d'échanger la contrainte de mémoire vive (RAM) de l'ordinateur des méthodes déterministes, pour lesquelles il est nécessaire de stocker et manipuler des matrices proportionnelles à la taille de la géométrie et aux différents degrés de discrétisation (angulaire, spatiale, fréquentielle), par une contrainte de temps due à l'aspect statistique (nécessité de lancer un grand nombre de rayons indépendants).

Le modèle présenté ici considère les phases solides comme totalement opaques, et les phases fluides comme totalement transparentes. En outre, le milieu sera traité comme gris, c'est-à-dire qu'aucune dépendance en fréquence n'est présente dans l'étude. L'objectif à terme est d'inclure le comportement semi-transparent ainsi que l'aspect spectral à la modélisation. Les rayons sont d'abord émis avec une direction aléatoire depuis les surfaces émettrices ($\partial\mathcal{D}_1$ et $\partial\mathcal{D}_{12}$), et transportent une puissance de :

$$\frac{\varepsilon \sigma T^4 S_{triangle}}{N_{RayonsParSurface}} \quad (3)$$

Une fois émis, un rayon se déplace de tétraèdre en tétraèdre voisin selon la méthode de Möller-Trumbore [4], est éventuellement réfléchi sur une ou plusieurs surfaces solides, et finalement est absorbé par une autre fibre ou sort du domaine (cf. Fig. 1).

Cette méthode relativement originale lorsqu'il s'agit de modéliser le transfert thermique radiatif a été retenue pour plusieurs raisons. Tout d'abord, les maillages non structurés rendent plus difficile le fait de savoir dans quel élément on se trouve à la position $\underline{x}$ (puisque tous les éléments font une taille différente). Le déplacement de voisin en voisin résout ce problème puisqu'il suffit de connaître les quatre voisins du tétraèdre dans lequel on se trouve. De plus, même si en comparaison d'une équation de droite il y a beaucoup d'opérations, chacune de ces opérations est d'une complexité très faible, ce qui permet à ce genre de méthode d'être performante. Par ailleurs, dans un milieu poreux/fibreux dense, le nombre de déplacements que fait un rayon avant de toucher une surface est faible. Finalement, cette propagation permet

de représenter un changement de comportement à chaque déplacement, par exemple un dépôt d'énergie selon la loi de Beer dans un solide semi-transparent ou une diffusion dans le milieu. A l'issue du lancer de rayons, un triangle quelconque aura émis un flux et reçu une puissance qui dépend de celle des rayons absorbés :

$$\Phi_{ray} = \varphi_{ray} S = |\Phi_{abs}| - |\Phi_{emise}| = \sum_{\substack{\text{rayons} \\ \text{absorbés}}} \frac{\varepsilon \sigma T_r^4 S}{N} \Big|_e - \varepsilon \sigma T_{triangle}^4 S \quad (4)$$

Dans l'équation ci-dessus, l'indice e se réfère au triangle qui a émis le rayon touchant la surface. Le vecteur $\mathbf{P}(\mathbf{T})$ est obtenu en sommant les puissances sur les éléments :

$$\mathbf{P}(\mathbf{T}) = \int_{\partial \mathcal{D}_{12}} \varphi_{ray} g \quad g \in H^1(\mathcal{D}) \quad (5)$$

Le code de calcul a été validé sur le benchmark du GDR Tamarys mené par Penazzi *et al.* et regroupant huit équipes de recherche françaises [5]. Dans ce dernier, plusieurs hypothèses simplificatrices avaient été effectuées : des plaques opaques avaient été ajoutées afin d'appliquer des conditions aux limites purement conductives, et l'air était considéré comme du vide (transparent et non conducteur).

3. Résultats

3.1. Présentation de l'échantillon

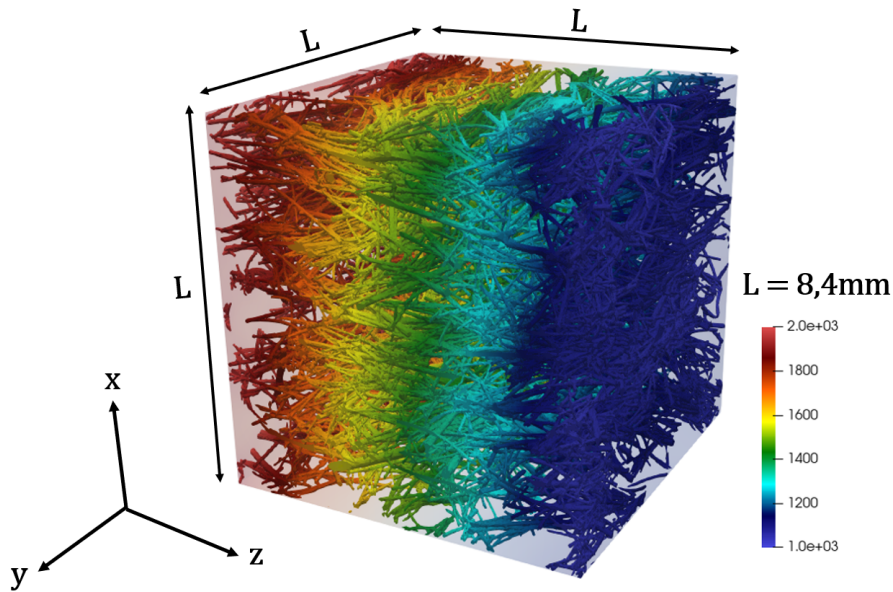


Figure 2 : Image du champ de température 3D dans l'échantillon depuis le logiciel Paraview. La phase solide (les fibres) a été mise en évidence mais les deux phases sont bien maillées.

Une tomographie d'isolant réel fabriqué au CEA a été traitée puis maillée en tétraèdres grâce au logiciel commercial Avizo. La résolution initiale de la tomographie est de 840^3 voxels (soit 592.7 millions), maillée en 15,4 millions de tétraèdres, délimité par 2,7 millions de nœuds. Le nombre de surfaces émettrices est alors de 4,3 millions environ (voir Fig. 2). Le code de calcul, parallélisé sur carte graphique (GPU), fonctionne sur un ordinateur de bureau disposant d'une

carte graphique Nvidia RTX A5000, pour des durées de calcul de l'ordre de huit heures pour une simulation transitoire complète jusqu'à atteindre régime permanent.

Nous souhaitons ici mettre en avant l'influence du rayonnement sur la conductivité apparente du matériau. Ainsi, les propriétés physiques sont considérées indépendantes de la température. Les fibres sont considérées opaques, avec une émissivité $\varepsilon = 0,85$ et une conductivité de $k_f = 13 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$. L'air est transparent au rayonnement mais conducteur ($k_a = 0,026 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$), à contrario du benchmark [5].

Les conditions aux limites modélisées ici sont une température imposée de $T_0 + \Delta T$ en $z = 0$ et T_0 en $z = L$. Les quatre autres surfaces sont adiabatiques. Une première simulation a été effectuée avec un écart de températures similaire à celui du benchmark [5], c'est-à-dire $T_0 = 1000\text{K}$ et $\Delta T = 1000\text{K}$. Ces conditions aux limites peu réalistes sur un échantillon aussi petit ont été choisies pour mettre en évidence le rôle du rayonnement. Les résultats sont présentés sur la figure 3. Nous pouvons tout d'abord observer que le flux total est bien conservé le long du volume. Les flux conductif et radiatif sont de signe négatif et du même ordre de grandeur (environ 7W). Le profil de température adopte quant à lui la forme courbée caractéristique lorsque le rayonnement est prépondérant. Cet effet sur la température est représenté dans la figure 5. On peut alors bien observer l'accentuation des convexités du profil de température proches des limites, lorsque le rayonnement gagne en importance.

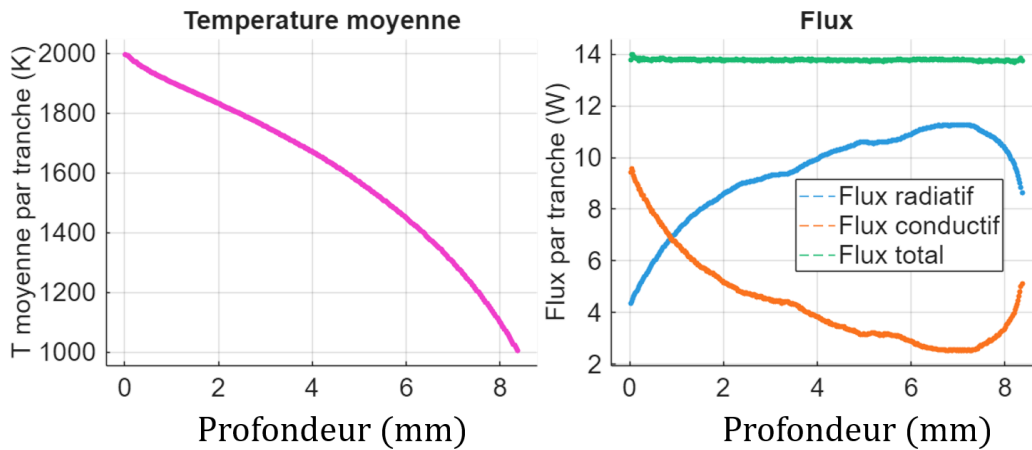


Figure 3 : Température moyenne dans la phase solide (à gauche) et flux conductif, radiatif et total (à droite) en fonction de la profondeur dans l'échantillon.

3.2. Etude des profils de flux et de température en fonction de la température

Sur le même échantillon, nous présentons maintenant une étude des profils de température et de flux en fonction de la température T_0 . Un faible écart de température est imposé ($\Delta T = 10 \text{ K}$) entre les faces, ce qui permet de considérer comme constantes les propriétés du matériau sur l'ensemble du volume pour l'expérience de plaque chaude gardée numérique réalisée. Nous calculons alors les flux de chaleur moyens traversant des surfaces de contrôle perpendiculaires à l'axe z . Le flux de chaleur conductif est calculé par la loi de Fourier, et le flux radiatif est estimé en sommant l'énergie des rayons traversant les surfaces de contrôles, pondérée par le signe de leur direction selon z .

Nous représentons sur la figure 4 les flux de chaleur (conductif, radiatif et total) pour 4 niveaux

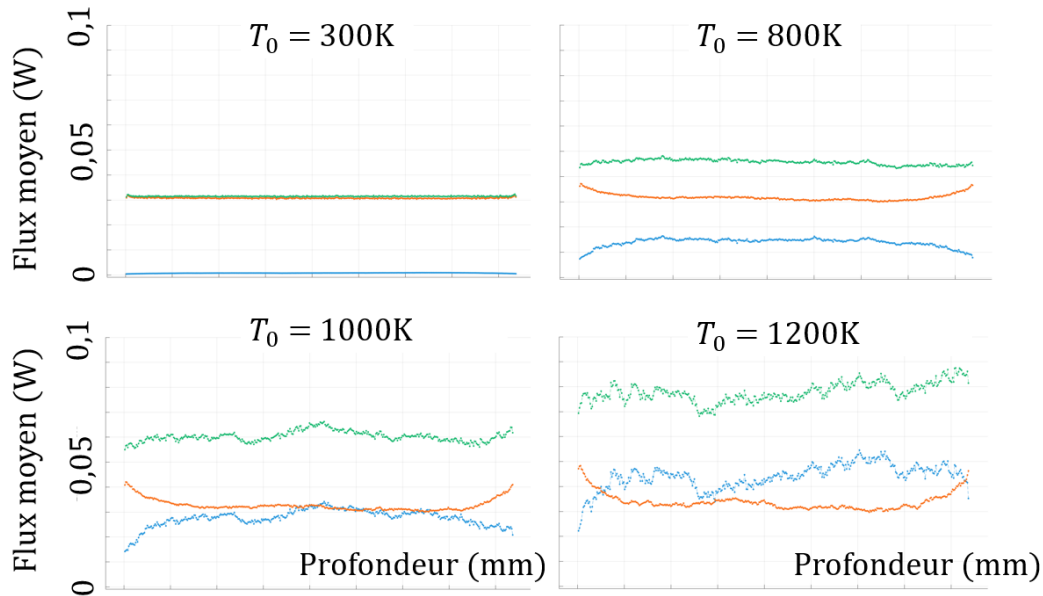


Figure 4 : Flux de chaleur (en W) en fonction de la profondeur (en mm) pour différents niveaux de températures. En rouge le flux conductif, de valeur moyenne stable, en bleu le flux radiatif qui augmente en fonction de la température, et en vert le flux total, somme des deux.

de température différents. Le flux total est globalement conservé, avec des nuances selon le niveau de température. Lorsque la température est faible (jusqu'à 800 K environ), le flux radiatif est inférieur au flux conductif. Il est très peu bruité, et constant à l'intérieur du domaine. Le flux radiatif augmente avec la température, et à partir de 800 K on observe distinctement une variation du flux radiatif près des bords. Quel que soit le niveau de température, le flux conductif reste globalement constant (aux alentours de 30 mW) à l'intérieur du domaine, mais se courbe lui aussi près de bords, de manière à ce que le flux total reste constant. La distorsion du flux conductif s'accompagne d'une déformation du profil de température qui n'est plus strictement linéaire (voir Fig. 5). Lorsque la température de référence augmente, le flux radiatif est de plus en plus bruité, car la différence relative entre les flux radiatifs émis par les différentes surfaces est de plus en plus petite. C'est ce qui explique pourquoi lorsque ΔT est important, le flux radiatif est très nettement défini (voir Fig. 3). Pour une température de 1200 K, l'écart type sur le flux total est de 3mW pour une moyenne de 76mW, soit un écart type inférieur à 5% qui est complètement acceptable.

3.3. Etude de la conductivité apparente en fonction de la température

Puisque l'outil numérique donne un flux de chaleur globalement conservé, la conductivité thermique apparente du matériau peut être estimée en supposant que les propriétés du matériau sont constantes dans le volume :

$$k(T) = \frac{L\Phi}{S\Delta T} \quad (6)$$

où L est l'épaisseur du matériau, S sa surface, et Φ est le flux total que l'on calcule pour chaque simulation. Les résultats sont compilés sur la figure 7. Nous avons ajouté sur la Fig. 7(a) la conductivité effective de l'échantillon (notée k_{cond}), obtenue par une simulation purement conductive, qui est bien indépendante de la température. En ce qui concerne le couplage

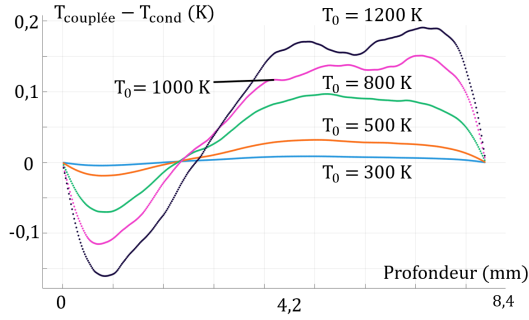


Figure 5 : Différence entre la température moyenne (K) couplée et la température dans le cas où seule la conduction est présente.

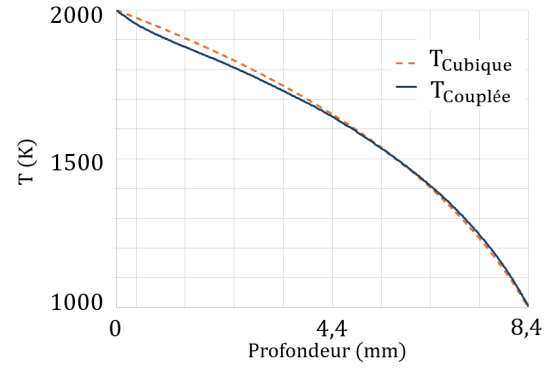
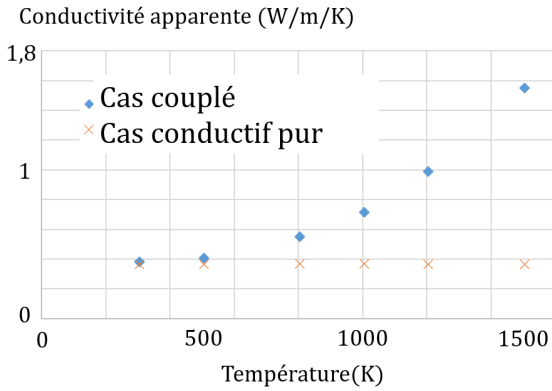
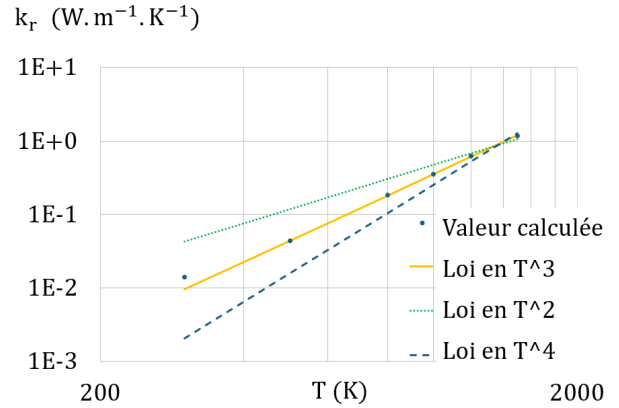


Figure 6 : Profils moyens de température obtenus pour le modèle couplé et le modèle homogène équivalent.



(a) Conductivité apparente (W/m/K) de l'échantillon en fonction de la température



(b) Conductivité radiative k_r en fonction de la température (échelle log-log)

Figure 7 : Evolution de la conductivité thermique apparente en fonction de la température

conducto-radiatif, la conductivité apparente est supérieure à k_{cond} d'environ 5 % dès 300 K et est multipliée par quatre à $T_0 = 1500 K$. Nous représentons sur la figure 7(b) la conductivité radiative, c'est-à-dire $k - k_{cond}$ sur une échelle log-log, ainsi que trois courbes de tendance, en T^2 , T^3 et T^4 . La conductivité apparente augmente sans ambiguïté avec la température selon une loi cubique, ce que l'on peut rapprocher du modèle de diffusion de Rosseland en faisant l'hypothèse d'un milieu optiquement épais :

$$k(T) = k_{cond} + \alpha T^3. \quad (7)$$

On trouve un coefficient $\alpha = 3.53 \times 10^{-10} W.m^{-1}.K^{-4}$. Il est néanmoins bon de noter que les dimensions de l'échantillon ainsi que sa densité nous placent à la limite de ce qu'il est possible de considérer comme optiquement épais, domaine d'application de la théorie de Rosseland.

Nous avons alors calculé le champ de température en régime permanent sur un volume de mêmes dimensions que l'échantillon réel considéré, mais homogène, et possédant une conductivité non-linéaire donnée par la formule (7). Sur la figure 6 sont représentées les températures moyennes en fonction de la profondeur obtenues d'abord par le modèle couplé (qui avait déjà été représenté dans la figure 3), puis sur le volume homogène équivalent. Les deux approches

donnent des résultats similaires, même pour un grand écart de température. On observe cependant des différences près des frontières, avec une légère surestimation de la température près du côté chaud, et sous-estimation du côté froid, comme mis en évidence par Ouchtout *et al.* [6].

4. Conclusion

Lors de cette étude, nous avons utilisé un nouvel outil de modélisation numérique du couplage conducto-radiatif afin de déterminer la conductivité apparente d'un échantillon issu de tomographie en fonction de la température. Ce modèle, qui couple une méthode de résolution déterministe de l'équation de la chaleur par éléments finis et une méthode stochastique de lanciers de rayons pour le rayonnement, présente plusieurs intérêts pour la communauté. Il permet d'abord de traiter des volumes 3D de matériaux réels, de taille significative pouvant correspondre à un volume représentatif, avec des contraintes matérielles faibles et en des temps de simulation réduits. En outre, il permet de calculer le flux radiatif et donc d'obtenir un flux total conservé le long du volume, un résultat qui est loin d'être trivial à obtenir dans la littérature aujourd'hui. Finalement, l'étude d'un échantillon de matériau réel permet également de mettre en avant le traitement de conditions aux limites radiatives de notre modèle.

L'étude menée a permis de souligner l'importance de la prise en compte du rayonnement thermique dès lors que la température dépasse la centaine de degrés Celsius. En effet, le matériau voit ses capacités d'isolation thermique grandement diminuées lorsque le rayonnement devient significatif, d'où l'importance de le prendre en compte dans les simulations. Une perspective de poursuite de ce travail serait de pouvoir comparer les résultats obtenus par la simulation à des résultats expérimentaux sur un échantillon de matériau réel. Cependant, pour cela, le modèle nécessite encore d'être affiné pour pouvoir prendre en compte le caractère semi-transparent des fibres d'isolants.

Références

- [1] El-Hafi, M., Enguehard, F., Favennec, Y. & Fournier, R. Introduction aux méthodes de résolution numérique de l'équation de transfert radiatif Doctoral. Lecture. France, mai 2022. <https://hal.science/hal-03878236>.
- [2] Seyer, L. Modélisation du transfert thermique couplé conducto-radiatif dans les milieux hétérogènes par des techniques stochastiques PhD thesis (Université de Poitiers, Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées, Ecole doctorale MIMME - CEA Le Ripault, nov. 2024).
- [3] Galiev, E. *et al.* Hybrid ceramic insulation made of oxide fiber ceramic matrix composite and paper-based ceramic for hot forming tools. *Open Ceramics* 15, 100403. issn : 2666-5395. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666539523000755> (2023).
- [4] Möller, T. & Trumbore, B. Fast, minimum storage ray/triangle intersection in ACM SIGGRAPH 2005 Courses (Association for Computing Machinery, Los Angeles, California, 2005), 7-es. isbn : 9781450378338. <https://doi.org/10.1145/1198555.1198746>.
- [5] Penazzi L. *et al.* Comparative analysis of methods for solving conduction-radiation coupling in heterogeneous materials. RAD-25 - 11th International Symposium on Radiative Transfer, Jun 2025, Kuşadasi, Turkey. pp.377-384, <10.1615/RAD-25.480>. <hal-05292926>
- [6] Ouchtout S., Rousseau B., Favennec Y., Finite element framework for modeling conducto-radiative transfers within heterogeneous media at both discrete and continuous scales, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 197 (2022)