

Extension du modèle Hashin–Shtrikman et introduction de la tortuosité effective de la phase solide pour prédire la conductivité effective thermique.

Prashant KUMAR^{1*}, Frédéric TOPIN¹

¹IUSTI, CNRS UMR 7343, Aix Marseille Université
5 Rue Enrico Fermi, Technopole de Château Gombert, Marseille 13453

* (auteur correspondant : prashant.kumar@etu.univ-amu.fr)

Résumé - La connaissance des propriétés thermiques des composants industriels est souvent nécessaire pour dimensionner des nombreux « process » d'ingénierie. Le comportement thermique des mousses à cellules ouvertes dépend de leur structure microscopique. Les deux corrélations pour prédire la conductivité effective thermique des différentes morphologies de brin ont été dérivées. Les corrélations sont basées sur une géométrie tétrakaïdecaédrique (tétrakaïdecaèdre) et prennent en compte les paramètres géométriques et le rapport de phases liquide-solide.

Premièrement, le modèle des limites Hashin–Shtrikman (HS) a été étendu et appliqué sur un modèle de résistance. Un terme de corrélation est introduit pour prendre en compte les conductivités des phases constituants (liquide-solide) et les paramètres géométriques de la structure de mousse. Deuxièmement, un modèle parallèle effectif complexe qui est la combinaison des deux modèles Parallèle et Séries a été dérivé en introduisant la tortuosité effective de la phase solide. Ces résultats analytiques ont été comparés et validés avec les données expérimentales de la littérature avec succès.

Nomenclature

Greek symbols

λ_s	Conductivité intrinsèque de solide, W/mK
λ_s^*	Conductivité apparente de solide, W/mK
λ_f	Conductivité de fluide, W/mK
λ_{eff}	Conductivité effective thermique, W/mK
$\lambda_{parallel}$	Conductivité du modèle Parallèle, W/mK
λ_{series}	Conductivité du modèle Série, W/mK
$\lambda_{HS,Upper}$	Conductivité du modèle HS (haute), W/mK
$\lambda_{HS,Lower}$	Conductivité du modèle HS (basse), W/mK
ψ	Paramètre géométrique (-)
ε_n	Porosité nominale (-)

ε_o	Porosité (-)
Ω	Facteur de corrélation (-)

Latin symbols

M	Paramètre ajustable (Eq. 10, -)
N	Paramètre ajustable (Eq. 10, -)
S_T	Tortuosité effective de solide
S	Constante (-)
S'	Constante (-)

Abréviations

ETC	Conductivité effective thermique
HS	Hashin–Shtrikman

1. Introduction

Les mousses solides à cellules ouvertes constituent une classe relativement nouvelle de matériaux présentant une faible densité (forte porosité) et des propriétés thermiques, mécanique, électrique et acoustiques intéressantes. Ces matériaux sont donc bien adaptés pour le développement de composants optimisés en terme d'efficacité énergétique ou plus largement pour des échangeurs multifonctionnels par exemple pour le génie chimique [1-2].

De nombreux travaux sont consacrés à la mesure de la conductivité thermique effective (ETC) expérimentalement de telles structures [3-6]. Avec le développement des techniques d'imagerie 3D et des moyens de calcul de plus en plus d'auteurs se sont appuyés sur la reconstruction de la géométrie réelle ou idéalisée pour simuler les transferts conductifs dans ces mousses et déterminer leurs propriétés thermiques en utilisant des codes de calculs commerciaux ou "maison" basés sur diverses approches (volumes finis, éléments finis, Boltzmann sur réseau, etc. par exemple [7-11]).

Plusieurs corrélations décrivant les variations de conductivité effective en fonction de paramètres géométriques et thermo-physiques ont été proposées sur la base de ces travaux. Trois classes d'approches pour bâtir les corrélations apparaissent dans la littérature: (1)- depuis les valeurs mesurées (e.g. [3-4, 6]); (2)- à partir de données numériques à l'échelle du pore (e.g. [7-11]); (3)- à partir des données disponibles dans la littérature (e.g. [12-13]). De plus ces corrélations sont soit issues d'approches basées sur les limites asymptotiques de la conductivité soit à partir d'idéalisation de la structure à l'échelle du pore.

Pour prédire la conductivité thermique effective des mousses solides, nous devons commencer par répondre à 4 questions : (1) Quel est le sens de la conductivité thermique et de la tortuosité de la phase solide ? (2) La porosité seule peut-elle suffire pour décrire les variations de l'ETC, (3) Les limites série et parallèles sont-elles des bases suffisantes pour bâtir un modèle de conductivité thermique ? (4) Comment introduire la tortuosité dans les corrélations ?

Dietrich et al., [6] utilisent la porosité pour décrire l'influence de la structure en association avec un paramètre $b = 0.51$ qui a été ajusté empiriquement à partir des résultats de conductivité obtenus sur une série de mousses céramiques. Edouard [12] a utilisé quelques paramètres morphologiques de la matrice solide pour ajuster une corrélation basée sur une cellule périodique cubique qui ne reprend donc pas la structure de la mousse.

Mendes et al., [10] ont proposé une analyse de la conductivité de mousses solides saturées par un fluide (immobile) quelconque à partir des données obtenues pour la phase solide seule. Leur travail montre que la conductivité effective obtenue en l'absence de fluide contient l'ensemble des données structurelles utiles pour la prédiction de l'ETC en présence d'un fluide. Ces auteurs ont étudié divers modèles simplifiés et concluent que les limites haute et basse du modèle Hashin–Shtrikman (HS) [14] permettent d'obtenir des résultats plus

fiables (valides sur une plus large gamme) et plus précis que les autres approches. Kumar et al., [8] et Kumar and Topin [9] ont montré que le rapport de conductivité des phases joue un rôle important dans la conductivité effective en équilibre thermique. Lorsque les conductivités des deux phases sont du même ordre de grandeur l'impact de la phase fluide devient important et nombre de corrélations usuelles [3-4,7] ne sont plus applicables (voir aussi ainsi Dietrich et al. [6]). Les corrélations proposées par ces auteurs sont basées sur la conductivité « intrinsèque » du matériau solide (λ_s^*) et ne tiennent pas compte des variations de ce paramètre inhérentes à la mise en forme du matériau lors de la fabrication de la matrice solide [6, 8-9]. De plus elles sont basées sur des structures périodiques qui peuvent différer fortement de la structure réelle des mousses.

Mendes et al., [11] ont unifié les modèles de Dietrich et al., [6] et proposé une corrélation utilisant deux paramètres ajustables a et b . Cependant leurs travaux sont basés sur les résultats obtenus pour la phase solide seule et ne donnent pas d'information sur la méthode de calcul finale pour la conductivité thermique de la matrice solide saturée par un fluide. Le paramètre a , varie dans la gamme 0.005 - 0.1 tandis que b est une fonction de la tortuosité effective de la matrice solide.

Nous présentons ici deux corrélations permettant de calculer la conductivité thermique effective ; la première est basée sur l'approche proposée par Mendes et al., [11] et la seconde s'appuie sur une combinaison de modèles série et parallèle tout en introduisant un modèle de tortuosité solide (S_T). Ce modèle, construit pour des brins solides de section constante, est applicable sur l'ensemble de la gamme de porosité ($0.60 \leq \varepsilon_o \leq 0.95$) et pour une large plage de rapport de conductivité des phases ($\lambda_s/\lambda_f=10-30000$) et a été validé grâce à des données expérimentales.

2. Développement du modèle d'ETC

2.1 Extension du modèle de Hashin–Shtrikman (HS)

Les conductivités série λ_{series} et parallèle $\lambda_{parallel}$ sont des limites absolues pour la conductivité effective d'un milieu à deux phases mais elles restent cependant très éloignées dès que le contraste de conductivité entre phases est significatif. Les limites du modèle HS constituent l'encadrement le plus resserré de la conductivité pour un milieu homogène et isotrope, elles sont données pour une conductivité solide supérieure à celle du fluide:

$$\lambda_{HS,Upper} = \lambda_s \left[\frac{2\lambda_s + \lambda_f - 2(\lambda_s - \lambda_f)\varepsilon_o}{2\lambda_s + \lambda_f + (\lambda_s - \lambda_f)\varepsilon_o} \right] \quad (1)$$

$$\lambda_{HS,Lower} = \lambda_f \left[\frac{2\lambda_f + \lambda_s - 2(\lambda_f - \lambda_s)(1 - \varepsilon_o)}{2\lambda_f + \lambda_s + (\lambda_f - \lambda_s)(1 - \varepsilon_o)} \right] \quad (2)$$

La conductivité effective étant comprise entre ses limites inférieure et supérieure, il est naturel de l'évaluer à partir de ces dernières et d'un paramètre ajustable Ω qui traduira l'influence de la forme de la matrice solide. Nous relierons ces quantités en utilisant équation 3:

$$\lambda_{eff} = \lambda_{HS,Upper}^{\Omega} \cdot \lambda_{HS,Lower}^{1-\Omega} \quad \Omega \geq 0, 0 \leq \Omega \leq 1 \quad (3)$$

qui est une moyenne géométrique entre les deux bornes. L'Equation 3 est résolue pour Ω en fonction de $\lambda_{HS,Upper}$, $\lambda_{HS,Lower}$ et λ_{eff} qui dépendent de des paramètres géométriques ε , ψ (voir : ref. [9]). La solution est :

$$\Omega = \frac{\ln(\lambda_{eff}) - \ln(\lambda_{HS,Lower})}{\ln(\lambda_{HS,Upper}) - \ln(\lambda_{HS,Lower})} \quad (4)$$

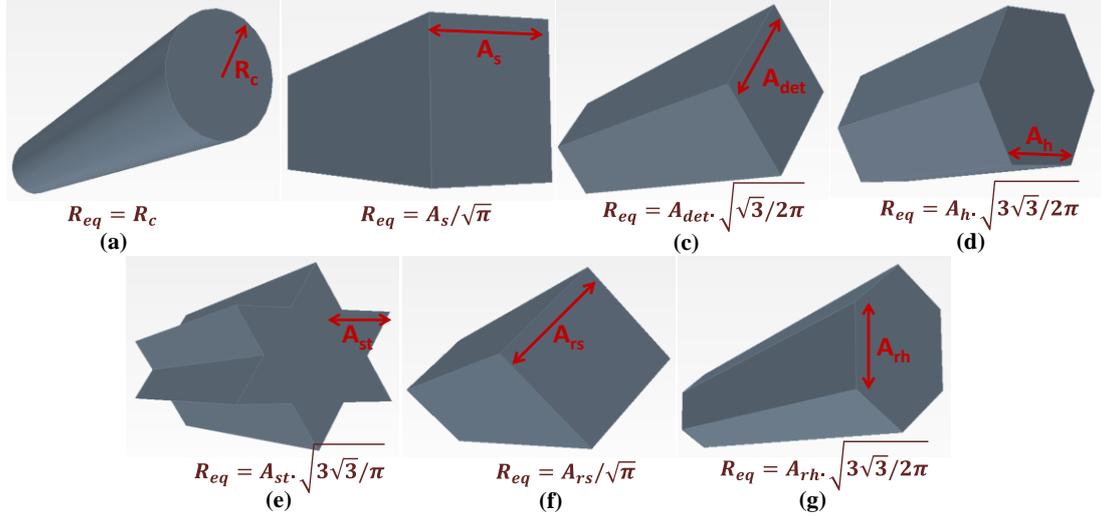


Figure 1. Vue de la structure idéalisée de la mousse et présentation des différentes formes de brin étudiées (a) Cercle (b) carré (c) Losange (d) Hexagone (e) Etoile (f) et (g) carré et Hexagone de différente orientation. La dimension caractéristique de chacune des sections est précisée.

Nous introduisons dans les équations 1 et 2 une relation entre la porosité, la surface spécifique et la forme de la matrice solide obtenue précédemment pour une structure de type ‘cellule de Kelvin’. La structure élémentaire de la mousse est idéalisée comme un octaèdre tronqué avec des brins de forme diverses (cf. Figure 1 et [8-9,13]) :

$$\psi = 1 - \varepsilon_o = \left(12\pi\alpha_{eq}^2\beta + \frac{32}{3}\pi\alpha_{eq}^3 \right) / 8\sqrt{2} \quad (5)$$

$$\lambda_{HS,Upper} = \lambda_s \left[\frac{2\lambda_s + \lambda_f - 2(\lambda_s - \lambda_f)(1 - \psi)}{2\lambda_s + \lambda_f + (\lambda_s - \lambda_f)(1 - \psi)} \right] \quad (6)$$

$$\lambda_{HS,Lower} = \lambda_f \left[\frac{2\lambda_f + \lambda_s - 2(\lambda_f - \lambda_s)\psi}{2\lambda_f + \lambda_s + (\lambda_f - \lambda_s)\psi} \right] \quad (7)$$

avec, $\psi = \zeta\alpha_{eq}^2\beta + \chi\alpha_{eq}^3$, ζ et χ sont des valeurs dépendant de la forme de brins ; α_{eq} et β sont la taille et la longueur de brin pour toutes formes de brin.

Pour une valeur donnée de porosité ε_o , les valeurs de $\lambda_{HS,Upper}$ et $\lambda_{HS,Lower}$ sont uniques ce qui fixe la valeur de λ_{eff} pour un paramètre Ω donné. L’influence de la forme de la matrice solide et du contraste de conductivité sont donc reportée dans ce paramètre qui a été identifié à partir de la base de donnée de conductivité λ_{eff} générée numériquement par simulation directe à l’échelle du pore par Kumar and Topin [9] en utilisant les équations 4,5 et 6 dans lesquelles nous introduisons le paramètre $S = \ln(\psi^{2.25} \cdot \lambda_s / \lambda_f)$. La figure 2 présente les variations de Ω en fonction de S pour une large gamme de porosité (0.6-0.95), les diverses formes de brins décrites sur la figure 1 et des rapports de conductivité des phases variant entre 10-30000.

Les valeurs obtenues se rassemblent sur une courbe unique et Ω croit avec S en suivant une forme sensiblement quadratique. Cette allure n’a pas de sens physique mais est simplement choisie comme la fonction la plus simple représentant convenablement les données calculées et, à partir des données présentées sur la figure 2 nous obtenons :

$$\Omega = -0.0028S^2 + 0.0395S + 0.8226 \quad (8)$$

L'erreur (dispersion) sur la conductivité effective induite par le lissage des données originales est évaluée selon la relation 8 :

$$RMSD = 10^{RMS(ELOG)} - 1 \quad \text{with } ELOG = \log\left(\frac{\lambda_{eff}}{\lambda_f}\right)_{calc} - \log\left(\frac{\lambda_{eff}}{\lambda_f}\right)_{exp} \quad (9)$$

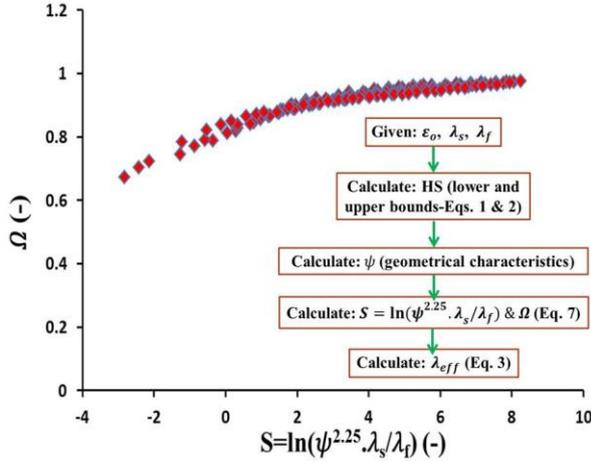


Figure 2. Variations de Ω (-) en fonction de S (-). Le regroupement des données provient de la similitude des champs de température dans tout les cas à l'équilibre thermique.

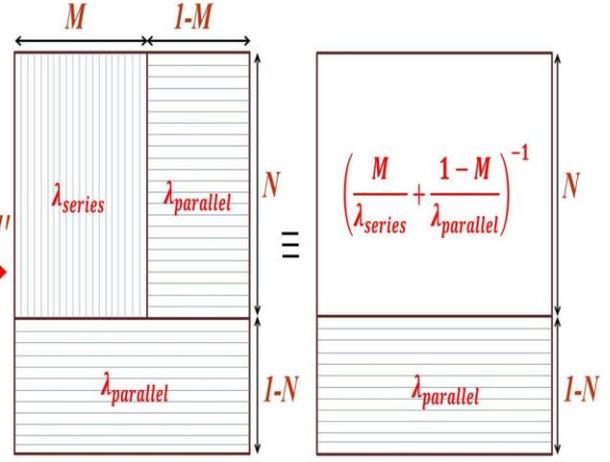


Figure 3. Schéma explicatif du modèle (Equation 10) de conductivité thermique effective proposé par Mendes et al., [11].

Nous avons obtenu une déviation moyenne (RMSD) de 0.0455 (ou 4.55%) sur les valeurs de conductivités issues de notre base de données originale, ce modèle est donc applicable sur toute la plage de valeur explorée qui recouvre la quasi-totalité des mousses solides (régulières) existant à l'heure actuelle et ce quelle que soit la nature du corps saturant la matrice solide.

2.2 Introduction d'une tortuosité de la matrice solide dans la formulation d'ETC

Nous proposons de nous baser sur le modèle de combinaison de milieux série et parallèle proposé par Dietrich et al., [6] et Mendes et al., [11] dans le cas des mousses solides pour introduire une tortuosité de la phase solide. L'extension de l'approche décrite sur la figure 3 et l'équation 10 est basée sur l'introduction d'une longueur effective de la phase solide contribuant significativement au transfert de chaleur.

$$\lambda_{eff} = N \cdot \left[\left(\frac{M}{\lambda_{series}} + \frac{1-M}{\lambda_{parallel}} \right)^{-1} \right] + (1-N) \cdot \lambda_{parallel} \quad (10)$$

La tortuosité effective (S_T) sera donc celle du chemin principal assurant la transmission de la chaleur. En supposant le milieu homogène, on peut considérer que la fraction utile de solide pour la transmission de la chaleur est constante et (S_T) sera donc proportionnelle à la tortuosité du solide. Le facteur de proportionnalité dépendra, pour une matrice donnée du rapport de conductivité.

Considérons une structure solide idéalisée immergée dans un fluide immobile et incluse dans un bloc d'arête L dans la direction principale du flux et de surface latérale W^2 (figure 4). La phase solide présente une longueur totale l et une section droite (supposée constante) w^2 . Dans ces conditions, S_T peut-être simplement déduite des paramètres de base décrivant la mousse, en particulier, la fraction volumique de solide ($1 - \epsilon_0$) ainsi que décrit par l'équation 11. Mendes et al., [11] ont ainsi relié simplement N (cf. eq 10) et S_T :

$$1 - \varepsilon_o = \frac{l w^2}{L W^2} \Rightarrow S_T = \frac{8(1 - \varepsilon_o)}{\pi \alpha_{eq}^2} \& N = 1 - \frac{1}{S_T^2} \quad (11)$$

avec, $S_T = \frac{l}{L}$, $W = 2\sqrt{2}L_c$, L_c est la distance entre 2 nœud de l'octaèdre tronqué représentant la structure de la mousse (Kumar and Topin [9]).

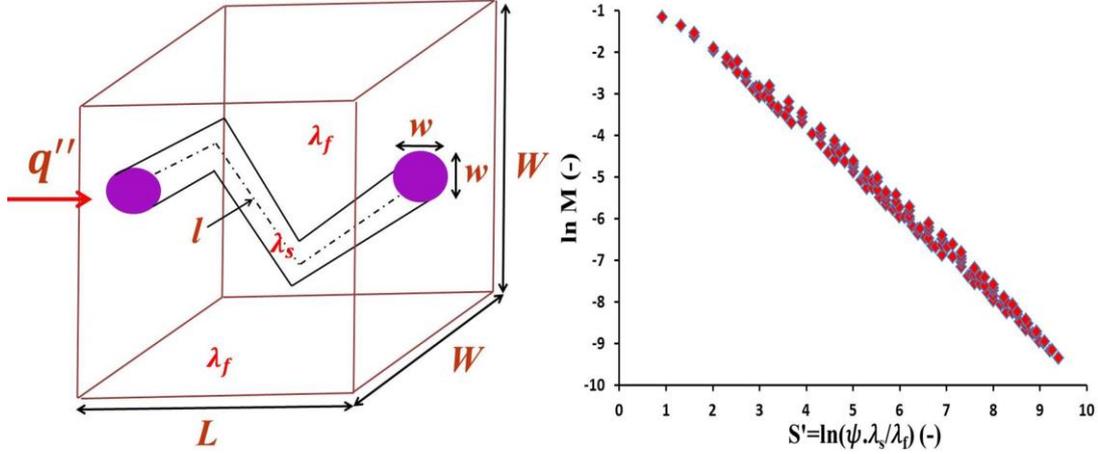


Figure 4. Gauche: Schéma de la structure de la matrice solide idéalisée (seule la part utile au transfert est représentée). Droite: Variation de M (-) en fonction de S' (-), illustrant le regroupement des données

En utilisant les valeurs de N données par 11 et l'expression N nous avons identifié les valeurs du paramètre M qui traduit l'influence du rapport de conductivité (ainsi que des aspects géométriques) pour l'ensemble des données de conductivité issues de nos simulations. Par analogie avec les approches déjà utilisée nous reportons les variations de M en fonction de $S' = \ln(\psi \cdot \lambda_s / \lambda_f)$ (Figure 4) ; les valeurs obtenues se rassemblent sur une courbe sensiblement unique qui a été 'fittée' sous la forme arbitraire suivante:

$$M = \text{Exp}(-0.007S'^2 - 0.9172S') \quad (12)$$

Ce lissage permet d'obtenir une dispersion moyenne de 6.24% ce qui est très satisfaisant.

3. Comparaison et validation

Les corrélations développées ici ont tout d'abord été comparées au jeu de données initiales issues de nos calculs numériques direct de Kumar and Topin [9] puis validées face aux données expérimentales de Dietrich et al., [6].

3.1 Comparaison des conductivités issues des modèles et des simulations numériques

Comparées aux données numériques les deux corrélations traduisent très bien la conductivité thermique effective du milieu pour l'ensemble des formes de brins et sur toute la plage de porosité. Ceci montre la robustesse de ces approches et permet d'envisager leur extension à des situations plus complexes (variation de forme ou de porosité au sein du milieu). Les valeurs issues du modèle « HS-bound » restent à $\pm 5\%$ des valeurs de référence mais se répartissent au-dessus et au-dessous de celles-ci. Les erreurs les plus importantes sont obtenues pour les porosités les plus faibles ($\varepsilon_o < 0.70$) pour lesquelles les approximations géométriques sont plus délicates du fait de la complexité de la forme des jonctions entre brins.

L'accord entre les valeurs issues du modèle série-parallèle modifié par la prise en compte de la tortuosité et les valeurs numérique est excellent, l'erreur maximale observée étant de

4%. Ceci montre la validité de l'approche développée et permet d'envisager de déterminer plus directement (i.e. sans lissage à partir des données de conductivité) des valeurs de tortuosité effective sur la base de tortuosités mesurées directement).

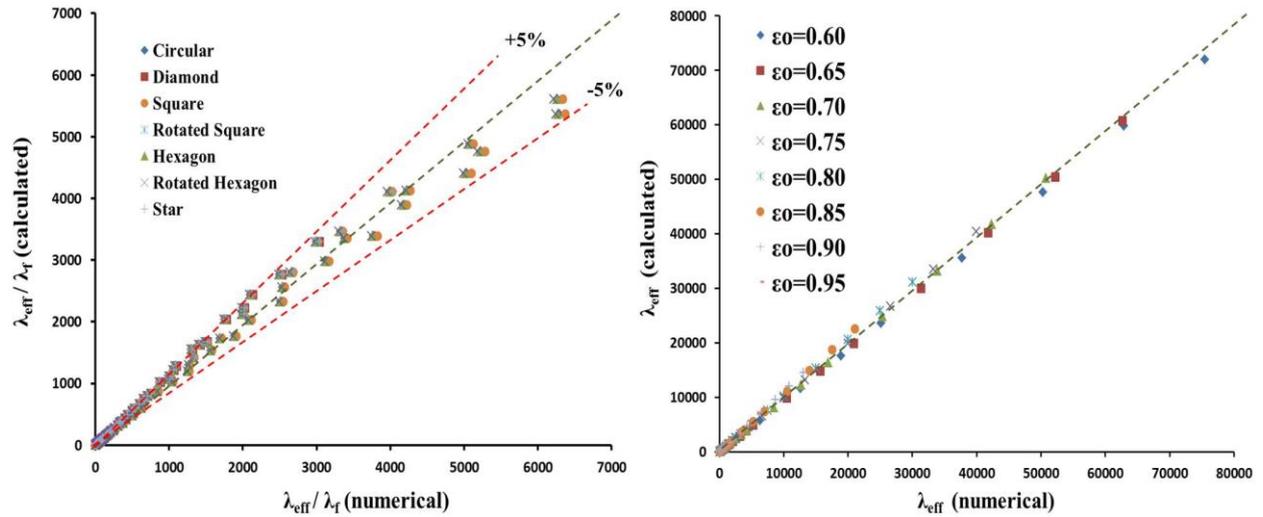


Figure 4. Comparaison de valeur d'ETC numériques et issues de la corrélation pour différentes formes de brins et porosités: Gauche- Modèle « HS-bound ». Droite -Combinaison serie- parallele.

Matériel	Expériences				Analytique			
	ε_n	λ_{eff}/λ_f	Ω	M	Ω (Eq. 8)	λ_{eff}/λ_f (Eq. 3)	M (Eq. 13)	λ_{eff}/λ_f (Eq. 10)
Al_2O_3	0.75	112.39	0.929	0.005919	0.938	120	0.006076	111
		89.49	0.917	0.006770	0.926	89	0.007761	84
	0.80	92.79	0.919	0.006532	0.928	93	0.007529	87
		90.01	0.918	0.006783	0.927	90	0.007682	85
		93.42	0.917	0.006096	0.926	89	0.007801	83
0.85	67.67	0.902	0.008527	0.911	64	0.010161	62	
Mullite	0.75	22.01	0.890	0.029533	0.899	22	0.032186	21
		13.47	0.876	0.060710	0.885	18	0.039230	17
	0.80	15.48	0.875	0.045793	0.884	17	0.039945	17
		18.28	0.874	0.030883	0.883	17	0.040688	16
		15.4	0.872	0.044132	0.881	17	0.041459	16
0.85	11.94	0.858	0.057965	0.866	13	0.050296	13	
OBSiC	0.75	70.43	0.920	0.009264	0.929	73	0.009970	68
		52.16	0.909	0.012985	0.918	56	0.012258	54
	0.80	56.53	0.909	0.010954	0.918	56	0.012258	54
		57.09	0.909	0.010717	0.918	56	0.012258	54
		48.52	0.910	0.015380	0.919	58	0.011977	55
0.85	36.2	0.891	0.018710	0.900	40	0.016416	39	

Table 1. Conductivité thermique effective, λ_{eff} de mousses céramiques de Al_2O_3 , Mullite et OBSiC de différentes taille de pore et plusieurs porosités. Comparaison expérience-analytique.

3.2 Comparaison avec des valeurs expérimentales de la littérature

Nous avons effectué deux comparaisons sur la base du jeu de données de Dietrich et al., [6]. Dans un premier temps nous avons calculé les paramètres Ω et M à partir des données de conductivité associées aux équations Eqs. 8 et 13. Puis nous avons utilisé les données géométriques et thermo-physiques des matériaux constitutifs avec les équations 3 et 10 pour calculer les conductivités effectives. L'ensemble des résultats est regroupé dans la table 1.

Les écarts entre les valeurs de M et Ω sont de 3.34% et 1.06% respectivement. , pour la conductivité effective nous avons des écarts de 5.04% (HS-bound) et de 2.49% pour le modèle serie-parallèle étendu. Ceci montre que les approches développées ici sont efficaces pour prédire la conductivité thermique dès lors qu'un minimum de paramètres géométriques du milieu sont connus. Le fait que les corrélations puissent être utilisées pour prédire la conductivité ou les paramètres du modèle illustre leur robustesse.

4. Conclusion

Nous avons développé deux corrélations pour la conductivité effective de mousses solide basées sur (1) une approche « HS-bound » et (2) une combinaison série-parallèle. Il a été démontré que les paramètres géométriques et de phase solide sont les paramètres principaux avec le rapport de conductivité des phases pour déterminer la conductivité effective du milieu. Les deux modèles sont validés par rapport aux valeurs numériques et expérimentales rapportées dans la littérature et prédisent la conductivité thermique avec une marge d'erreur de $\pm 5\%$.

Références

- [1] Lu, T. J., Stone, H. A., Ashby, M. F., "Heat transfer in open-cell metal foams", *Acta Mater*, 46 (10), pp. 3619-3635 (1998).
- [2] Kim, S. Y., Paek, J. W., Kang, B. H., "Flow and heat transfer correlations for porous fin in a plate-fin heat exchanger", *ASME J. Heat Transfer* 122(3), pp. 572-578 (2000).
- [3] Paek, J.W., Kang, B.H., Kim, S.Y., Hyun, J.M., "Effective thermal conductivity and permeability of aluminum foam materials", *Int. J. Thermophysics*, 21, pp. 454-464 (2000).
- [4] Bhattacharya, A., Calmidi V. V., Mahajan, R. L., "Thermophysical properties of high porosity metal foams", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 45, pp. 1017–1031 (2002).
- [5] Solorzano, E., Reglero, J.A., Rodriguez-Perez, M.A., Lehmhus, D., Wichmann, M.,A., De Saja, J.A., "An experimental study on the thermal conductivity of aluminium foams by using the transient plane source method" *Int. J. Heat Mass Transfer*, 51, pp. 6259–6267 (2008).
- [6] Dietrich, B., Schell, G., Bucharsky, E.C., Oberacker, R., Hoffmann, M.J., Schabel, W., Kind, M., Martin, H., "Determination of the thermal properties of ceramic sponges" *Int. J. Heat Mass Transf*, 53 (1), pp. 198–205 (2010).
- [7] Coquard, R., Baillis, D., "Numerical investigation of conductive heat transfer in high-porosity foams" *Acta Materialia*, 57 (18), pp. 5466-5479 (2009).
- [8] Kumar, P., Topin, F., Vicente, J., "Determination of effective thermal conductivity from geometrical properties: Application to open cell foams" *Int. J. Therm. Sci*, 81, pp. 13-28 (2014).
- [9] Kumar, P., Topin, F., "Simultaneous determination of intrinsic solid phase conductivity and effective thermal conductivity of Kelvin like foams" *Appl. Therm. Eng*, 71 (1), pp. 536-547 (2014).
- [10] Mendes, A.A.M., Ray, S., Trimis, D., "A simple and efficient method for the evaluation of effective thermal conductivity of open-cell foam-like structures" *Int. J. Heat Mass Transf*, 66, pp. 412-422 (2013).
- [11] Mendes, A.A.M., Ray, S., Trimis, D., "An improved model for the effective thermal conductivity of open-cell porous foams" *Int. J. Heat Mass Transfer*, 75, pp. 224-230 (2014).
- [12] Edouard, D., "The effective thermal conductivity for "slim" and "fat" foams" *AICHE*, 57 (6), pp. 1646–1651 (2011).
- [13] Kumar, P., Topin, F., "The geometric and thermohydraulic characterization of ceramic foams: An analytical approach" *Acta Mater*, 75, pp. 273-286 (2014).
- [14] Hashin, Z., Shtrikman, S., "A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials" *J. Appl. Phys.* 33 pp. 3125-3131 (1962).