

# Conditions aux limites pour le calcul de conductivité thermique effective des mousses

Z.K. Low<sup>1,2</sup>, N. Blal<sup>1</sup>, N. Naouar<sup>1</sup>,  
L. San Miguel<sup>2</sup>, D. Baillis<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univ Lyon, INSA-Lyon, CNRS UMR5259, LaMCoS, F-69621 Villeurbanne. {zi.low@insa-lyon.fr}

<sup>2</sup> Saint-Gobain Research Provence, F-84306 Cavaillon.

**Résumé** — Cette étude porte sur la justification du choix de condition aux limites pour calculer la conductivité thermique effective des mousses tomographiées non-périodiques et limitées en taille. Une condition aux limites mixte est étudiée dans le cadre de l'homogénéisation par éléments finis afin d'établir des critères de validité. La vitesse de convergence obtenue avec cette condition mixte est ensuite comparée à celles des conditions uniformes à travers des théorèmes variationnels. La simulation numérique sur un échantillon de mousse céramique tomographiée valide le choix de la condition mixte.

**Mots clés** — conductivité thermique, homogénéisation, conditions aux limites, mousses

## 1 Introduction

Les matériaux cellulaires de type mousse sont de plus en plus utilisés dans beaucoup de domaines [1, 2], et ce à très haute température dans le cas des mousses céramiques réfractaires (plus de 1200 °C). La bonne connaissance de leur conductivité thermique est alors primordiale, sachant que diverses morphologies (Figure 1) existent et peuvent avoir une forte influence sur les propriétés. Les difficultés liées à la mesure de conductivité effective des mousses à haute température (dues à l'influence du rayonnement, la résistance thermique de contact, etc.) poussent à développer la simulation numérique dans le but de compléter la caractérisation expérimentale, voire de s'en affranchir.

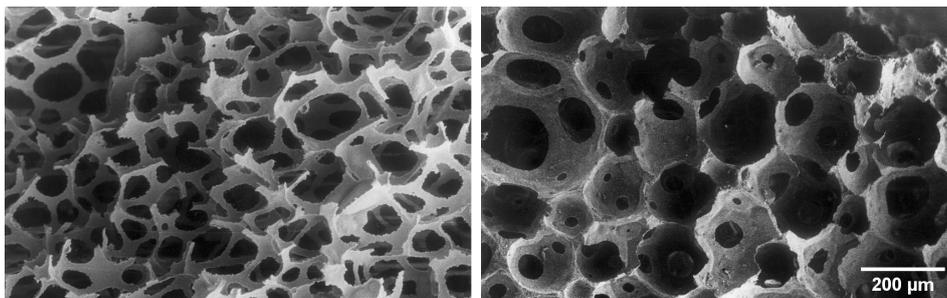


FIGURE 1 – Exemples de différentes morphologies des mousses céramiques [3].

Les mousses peuvent être assimilées à des matériaux biphasés composés de pores et d'une phase solide supposée homogène. En raison du fort contraste de propriétés entre les deux phases, la plupart des modèles analytiques basés seulement sur la porosité s'avèrent peu utiles pour cette classe de matériaux [4]. Le développement de la micro-tomographie à haute résolution a beaucoup facilité la compréhension fine de la relation entre la morphologie des mousses et leurs propriétés, en fournissant des microstructures réelles sur lesquelles les propriétés effectives peut être calculées.

En homogénéisation par éléments finis (EF), les conditions aux limites (CL) en flux et gradient uniformes [5] ne sont pas parfaitement adaptées aux modèles tomographiques. En présence des forts contrastes de propriétés, le volume du domaine de calcul nécessaire pour atteindre la convergence est souvent supérieur au volume tomographié [6]. Les CL périodiques mènent à une convergence beaucoup plus rapide, mais induisent forcément des erreurs dans des domaines tomographiés non-périodiques [7].

En fonction du maillage, la grande taille du modèle (souvent de l'ordre de  $10^6$ – $10^9$  nœuds) peut également être prohibitive. Une autre approche par transformée de Fourier rapide [8] s'affranchit de ce dernier problème car aucun maillage n'est nécessaire, mais ne résout pas les problématiques de la non-périodicité et la taille limitée du domaine.

Il a été démontré en mécanique [9] que certaines CL mixtes mènent à une convergence plus rapide que les CL en contrainte et déformation uniformes. Dans l'optique d'améliorer l'efficacité et la justesse de l'approche EF, la présente étude s'intéresse à une CL mixte dite du « transfert globalement unidirectionnel entre plans parallèles » (voir section 3.2). Cette CL est basée sur des méthodes expérimentales de référence [10], et est apparue dans de nombreux travaux sur la modélisation numérique en thermique des mousses [2, 11]. Cependant, il ne semble pas y avoir d'études justifiant l'utilisation de cette CL mixte dans le cadre de l'homogénéisation numérique.

Cet article vise d'abord à clarifier la compatibilité de cette CL mixte avec le principe de Hill [5], puis à comparer sa vitesse de convergence avec celles des CL uniformes via des théorèmes variationnels classiques. La simulation numérique sur un échantillon de mousse céramique tomographiée permet finalement de vérifier ces relations, et justifier l'utilisation de la CL mixte pour une meilleure prédiction de la conductivité effective à partir des modèles tomographiques.

## 2 Acquisition et analyse d'image 3D

La mousse caractérisée dans cette étude est un échantillon de NorFoam® de Saint-Gobain, mousse en alumine pure conçue pour l'isolation thermique à très haute température (de 1200 °C à 1700 °C). L'acquisition de l'image 3D a été faite par microtomographie aux rayons X sur le *Phoenix vltomelx s* de GE. Un volume de 4,5 mm × 4,5 mm × 4,5 mm a été tomographié et stocké sous forme de tranches d'images en niveaux de gris. Les étapes du traitement d'image sont illustrées sur la Figure 2. Le redimensionnement, le seuillage automatique [12] et le débruitage de chaque tranche ont été effectués sous le logiciel Fiji [13]. Il en résulte une image binaire avec une taille de voxel de 7 µm, soit 650 × 650 × 650 voxels dans tout le volume tomographié.

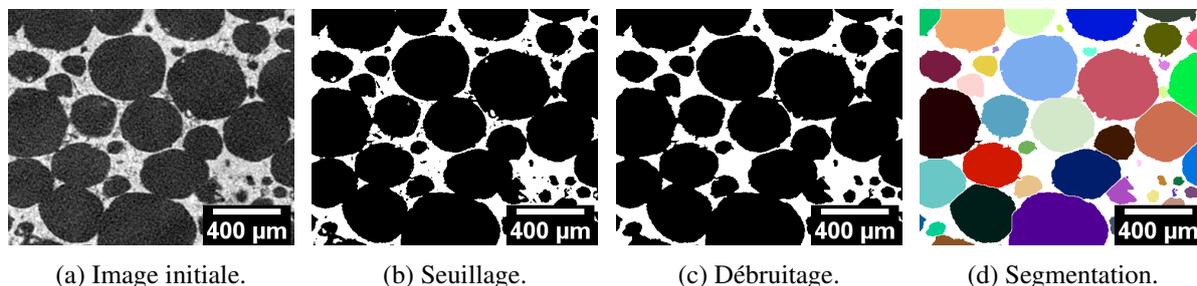


FIGURE 2 – Étapes de traitement d'image.

Pour connaître la distribution de taille de pores, le logiciel iMorph [14] a été utilisé pour effectuer une segmentation en 3D des pores par ligne de partage des eaux via des boules maximales. La fraction volumique de pores s'élève à  $76 \pm 2\%$ , et la distribution de taille présente une forme lognormale avec un pic à 135 µm. Une analyse de covariance [6] révèle une très légère anisotropie (de l'ordre de +5%) dans la direction normale aux tranches.

## 3 Étude théorique de la condition aux limites mixte

Dans cette section, le problème d'homogénéisation en conduction thermique pure, l'équivalent du principe de Hill [5] et les CL uniformes sont d'abord présentés. La CL mixte dite du « transfert globalement unidirectionnel entre plan parallèles » est ensuite examinée afin de connaître sa compatibilité avec le principe de Hill. Des théorèmes variationnels sont enfin employés pour comparer la vitesse de convergence des conductivités effectives calculées avec la CL mixte et les CL uniformes.

### 3.1 Définition du problème d'homogénéisation

La mousse est assimilée à un milieu biphasé dont chaque phase possède une conductivité thermique  $\underline{\lambda}$  connue et supposée constante en température. Dans le cas de la conduction pure en régime établi, sans source de chaleur volumique, la densité de flux thermique  $\underline{q}$  et la température relative  $\theta$  en chaque point du milieu sont reliés par la loi de Fourier (1) :

$$\underline{q} = -\underline{\lambda} \cdot \underline{\nabla}\theta \quad \text{avec} \quad \underline{\nabla} \cdot \underline{q} = 0 \quad (1)$$

Soit un domaine  $\Omega$  de la mousse ayant un volume total de  $V_\Omega$ , composé de points  $\underline{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$ . La frontière  $\partial\Omega$  du domaine est composée des surfaces infinitésimales  $d\underline{S} = \underline{n} \ dS$  orientées vers l'extérieur. L'objectif d'un calcul d'homogénéisation est la recherche de la conductivité thermique effective  $\underline{\lambda}_{\text{eff}}$  du domaine  $\Omega$  satisfaisant la loi de Fourier macroscopique (2), avec par définition  $\langle \underline{q} \rangle$  et  $\langle \underline{\nabla}\theta \rangle$  le flux et gradient moyens pondérés par le volume.

$$\langle \underline{q} \rangle = -\underline{\lambda}_{\text{eff}} \cdot \langle \underline{\nabla}\theta \rangle \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \langle \underline{q} \rangle = \frac{1}{V_\Omega} \iiint_{\Omega} \underline{q} \ dV = \frac{1}{V_\Omega} \iint_{\partial\Omega} \underline{x} (\underline{q} \cdot d\underline{S}) \\ \langle \underline{\nabla}\theta \rangle = \frac{1}{V_\Omega} \iiint_{\Omega} \underline{\nabla}\theta \ dV = \frac{1}{V_\Omega} \iint_{\partial\Omega} \theta \ d\underline{S} \end{cases} \quad (2)$$

Considérons ensuite la fonctionnelle  $\mathcal{D}_{th} = -\underline{q} \cdot \underline{\nabla}\theta$  représentant la dissipation d'entropie liée à la conduction thermique, définie à partir du deuxième principe de la thermodynamique [15]. Elle est analogue à l'énergie de déformation  $\underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}$ . En mécanique, le respect du principe de Hill [5] assure la conservation de l'énergie de déformation lors du changement d'échelle. En conduction thermique pure, c'est la dissipation d'entropie  $\mathcal{D}_{th}$  qui est conservée ; l'équivalent du principe de Hill s'écrit :

$$\langle \underline{q} \cdot \underline{\nabla}\theta \rangle = \langle \underline{q} \rangle \cdot \langle \underline{\nabla}\theta \rangle \iff \iint_{\partial\Omega} \left[ (\underline{q} \cdot \underline{n} - \langle \underline{q} \rangle \cdot \underline{n}) * (\theta - \langle \underline{\nabla}\theta \rangle \cdot \underline{x}) \right] dS = 0 \quad (3)$$

Tout chargement choisi pour le calcul de conductivité effective doit être compatible avec ce principe. Notamment, les CL en gradient de température uniforme (4) et en flux thermique uniforme (5) font partie des configurations qui respectent *a priori* le principe de Hill. Ces deux types de chargement conduisent à la même conductivité effective lorsque le domaine est un VER [5].

$$\forall \underline{G}_0 \text{ constant, } \theta|_{\partial\Omega} = \underline{G}_0 \cdot \underline{x} \implies \langle \underline{\nabla}\theta \rangle = \underline{G}_0 \\ \implies (\theta - \langle \underline{\nabla}\theta \rangle \cdot \underline{x})|_{\partial\Omega} = 0 \quad (4)$$

$$\forall \underline{F}_0 \text{ constant, } (\underline{q} \cdot \underline{n})|_{\partial\Omega} = \underline{F}_0 \cdot \underline{n} \implies \langle \underline{q} \rangle = \underline{F}_0 \\ \implies (\underline{q} \cdot \underline{n} - \langle \underline{q} \rangle \cdot \underline{n})|_{\partial\Omega} = 0 \quad (5)$$

Pour des raisons citées par Kanit *et al.* [6], sur une mousse tomographiée, l'écart entre les conductivités effectives retrouvées avec ces deux CL uniformes est souvent très important. Pour accélérer la convergence, des CL périodiques sont souvent utilisées [7, 8], or elles ne sont pas adaptées aux domaines tomographiés non-périodiques. Il est donc intéressant d'envisager l'utilisation d'autres CL, telle que celle du « transfert entre plans parallèles » étudiée dans la section suivante.

### 3.2 Analyse de la condition aux limites mixte

La configuration du « transfert globalement unidirectionnel entre plans parallèles » étudiée dans cette section est généralement utilisée en modélisation thermique des matériaux [2, 11]. Celle-ci est basée sur des méthodes expérimentales de référence (ex. [10]), qui consistent à imposer un faible écart de température entre deux faces parallèles d'une plaque et un flux normal nul ( $\underline{q} \cdot d\underline{S} = 0$ ) sur les autres faces (voir Figure 3). Une telle configuration permet de faire l'hypothèse en régime établi d'un transfert de chaleur globalement unidirectionnel au sein des deux éprouvettes.

La mise en équations suivante suppose que la direction principale du transfert de chaleur est  $\underline{e}_1$  en repère Cartésien  $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3\}$ . Soit  $\Omega$  un parallélépipède rectangle dont la diagonale principale est délimitée

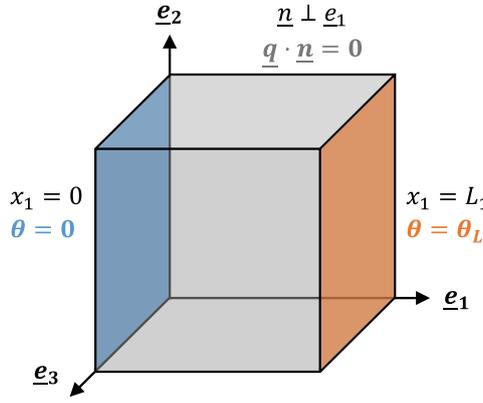


FIGURE 3 – Schéma de la condition mixte du « transfert globalement unidirectionnel entre plans parallèles ».

par les points  $(0,0,0)$  et  $(L_1, L_2, L_3)$ . La CL mixte s'écrit de façon formelle par :

$$\forall \underline{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \in \partial\Omega, \begin{cases} x_1 = 0 \implies \theta_{(0,x_2,x_3)} = 0 \\ x_1 = L_1 \implies \theta_{(L_1,x_2,x_3)} = \theta_L \\ \underline{n} \perp \underline{e}_1 \implies (\underline{q} \cdot \underline{n})_{(\underline{x})} = 0 \end{cases} \quad (6)$$

Où  $\theta_L$  est une constante positive représentant l'écart de température (en K) entre les faces chaude et froide. À savoir que  $\theta = 0$  signifie simplement que la température imposée est la température de référence, qui peut être choisie arbitrairement (puisque la conductivité est supposée constante avec la température). Le gradient et flux moyens obtenus par application de cette condition mixte s'écrivent :

$$\langle \underline{\nabla}\theta \rangle = \frac{1}{V_\Omega} \begin{bmatrix} \iint \{\theta_{(x_1,L_2,x_3)} - \theta_{(x_1,0,x_3)}\} dx_1 dx_3 \\ \iint \{\theta_{(x_1,x_2,L_3)} - \theta_{(x_1,x_2,0)}\} dx_1 dx_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\langle \underline{q} \rangle = \frac{1}{V_\Omega} \begin{bmatrix} \iint L_1 * \{\underline{q}_{(L_1,x_2,x_3)} \cdot \underline{e}_1\} dx_2 dx_3 \\ \iint x_2 * \{\underline{q}_{(L_1,x_2,x_3)} - \underline{q}_{(0,x_2,x_3)}\} \cdot \underline{e}_1 dx_2 dx_3 \\ \iint x_3 * \{\underline{q}_{(L_1,x_2,x_3)} - \underline{q}_{(0,x_2,x_3)}\} \cdot \underline{e}_1 dx_2 dx_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} \quad (8)$$

Le principe de Hill doit être vérifié pour que la conductivité effective calculée à partir de (7) et (8) soit valable. Le développement de l'équation (3) dans le présent cas donne :

$$\langle \underline{q} \rangle \cdot \langle \underline{\nabla}\theta \rangle - \langle \underline{q} \cdot \underline{\nabla}\theta \rangle = f_2 g_2 + f_3 g_3 = 0 \quad (9)$$

Dans le cas général, aucun des termes s'annule, et seule une vérification *a posteriori* de l'équation (9) permet de valider la conductivité effective calculée. Cependant, le principe de Hill pourrait être vérifiée *a priori* si les deux conditions suivantes sont réunies :

1. La matrice de conductivité effective est *orthotrope dans le repère considéré*, c'est-à-dire la matrice de  $\underline{\lambda}_{\text{eff}}^M$  est diagonale. L'équation (9) se simplifie alors à :

$$\lambda_{\text{eff},22}^M * g_2^2 + \lambda_{\text{eff},33}^M * g_3^2 = 0 \quad (10)$$

2. Deux faces latérales opposées ont des champs de température « semblables », autrement dit,  $g_2 = g_3 = 0$  (la moyenne spatiale de la différence de température est nulle).

Pour la plupart des mousses, ces conditions pourraient être réalisées par un choix soigneux du repère et du volume tomographié. En effet, la première est valable si le matériau possède une microstructure (statistiquement) orthotrope dans le repère considéré, alors que la deuxième hypothèse serait valable si la porosité est répartie de façon (statistiquement) homogène dans le matériau. La validité de ces dernières pour la mousse NorFoam® étudiée sera vérifiée par les résultats de simulation dans la section 5.1.

### 3.3 Convergence de la conductivité effective en fonction des conditions aux limites

Pour un domaine de taille inférieure au VER, les conductivités effectives calculées avec les CL uniformes et la CL mixte ne sont pas identiques (la compatibilité de la CL mixte avec le principe de Hill est admise dans cette section). À l'aide du cadre d'analyse proposé par Hazanov et Huet [9], les conductivités effectives issues de ces trois CL (voir Tableau 1 pour un résumé des notations employées) peuvent être comparées. Le critère de comparaison (11) défini au sens quadratique a été utilisé :

$$\underline{\lambda}_A \leq \underline{\lambda}_B \quad \equiv \quad \forall \underline{g}, \quad (\underline{\lambda}_A \cdot \underline{g}) \cdot \underline{g} \leq (\underline{\lambda}_B \cdot \underline{g}) \cdot \underline{g} \quad (11)$$

TABLEAU 1 – Résumé des notations liées aux conditions aux limites considérées.

Type de CL	Symbole	Équation	Solution
CL en gradient de température $\underline{G}_0$ uniforme	$G$	(4)	$(\theta_{\text{sol}}^G, \underline{q}_{\text{sol}}^G)$ donnant $\underline{\lambda}_{\text{eff}}^G$
CL en flux thermique $\underline{F}_0$ uniforme	$F$	(5)	$(\theta_{\text{sol}}^F, \underline{q}_{\text{sol}}^F)$ donnant $\underline{\lambda}_{\text{eff}}^F$
CL mixte du « transfert entre plans parallèles »	$M$	(6)	$(\theta_{\text{sol}}^M, \underline{q}_{\text{sol}}^M)$ donnant $\underline{\lambda}_{\text{eff}}^M$

Soit un domaine  $\Omega$  de taille inférieure ou égale au VER soumis à une CL notée « X », qui admet  $(\theta_{\text{sol}}^X, \underline{q}_{\text{sol}}^X)$  comme unique solution au chargement. Définissons la famille  $\{\theta_{\text{adm}}^X, \underline{q}_{\text{adm}}^X\}$  des champs *admissibles* au chargement X, c'est-à-dire ceux qui respectent la CL donnée mais qui ne correspondent pas forcément à l'unique solution au chargement. Les théorèmes variationnels classiques [5] s'énoncent :

$$\forall \theta_{\text{adm}}^X, \underline{q}_{\text{adm}}^X, \quad \begin{cases} \Pi_{(\theta_{\text{adm}}^X)}^X \geq \Pi_{(\theta_{\text{sol}}^X)}^X & \text{avec} \quad \Pi_{(\theta)}^X = \frac{V_\Omega}{2} * \langle -\underline{q} \cdot \nabla \theta \rangle + \iint_{\partial\Omega_q} \theta * (\underline{q}_{\text{ext}}^X \cdot \underline{n}) \, dS \\ \Gamma_{(\underline{q}_{\text{adm}}^X)}^X \geq \Gamma_{(\underline{q}_{\text{sol}}^X)}^X & \text{avec} \quad \Gamma_{(\underline{q})}^X = \frac{V_\Omega}{2} * \langle -\underline{q} \cdot \nabla \theta \rangle + \iint_{\partial\Omega_\theta} \theta_{\text{ext}}^X * (\underline{q} \cdot \underline{n}) \, dS \end{cases} \quad (12)$$

Où  $\partial\Omega_\theta$  et  $\partial\Omega_q$  sont les parties de  $\partial\Omega$  sur lesquelles la température  $\theta_{\text{ext}}^X$  et la densité de flux thermique  $\underline{q}_{\text{ext}}^X$  ont été respectivement imposés.  $\Pi^X$  et  $\Gamma^X$  sont des quantités entropiques analogues à l'énergie potentielle et l'énergie complémentaire en mécanique [5].

Sachant que  $\Pi_{(\theta_{\text{sol}}^X)}^X = -\Gamma_{(\underline{q}_{\text{sol}}^X)}^X$  pour tout couple de  $(\theta_{\text{sol}}^X, \underline{q}_{\text{sol}}^X)$  quelconque, deux observations peuvent être faites :

1.  $\underline{q}_{\text{sol}}^M$  est un champ admissible au chargement en gradient uniforme possédant la solution  $\underline{q}_{\text{sol}}^G$ .
2.  $\theta_{\text{sol}}^M$  est un champ admissible au chargement en flux uniforme possédant la solution  $\theta_{\text{sol}}^F$ .

Il est alors possible d'en déduire les relations suivantes :

$$V_\Omega \leq \text{VER} \implies \begin{cases} \min \left\{ \Gamma_{(\underline{q}_{\text{sol}}^M)}^G \right\} = -(\underline{\lambda}_{\text{eff}}^M \cdot \underline{G}_0) \cdot \underline{G}_0 \geq -(\underline{\lambda}_{\text{eff}}^G \cdot \underline{G}_0) \cdot \underline{G}_0 \implies \underline{\lambda}_{\text{eff}}^M \leq \underline{\lambda}_{\text{eff}}^G \\ \min \left\{ \Pi_{(\theta_{\text{sol}}^M)}^F \right\} = -\underline{F}_0 \cdot \left( (\underline{\lambda}_{\text{eff}}^M)^{-1} \cdot \underline{F}_0 \right) \geq -\underline{F}_0 \cdot \left( (\underline{\lambda}_{\text{eff}}^F)^{-1} \cdot \underline{F}_0 \right) \implies \underline{\lambda}_{\text{eff}}^F \leq \underline{\lambda}_{\text{eff}}^M \end{cases} \quad (13)$$

Les inégalités dans (13) deviennent des égalités uniquement lorsque le domaine considéré est un VER. Il serait également utile d'évoquer l'existence d'une taille de domaine critique  $V_{\Omega^*}$  au-delà de laquelle les différentes conductivités calculées convergent uniformément vers celle du VER :

$$V_\Omega \geq V_{\Omega^*} \implies \begin{cases} \underline{\lambda}_{\text{VER}}^G \leq \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega}^G \leq \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega^*}^G \\ \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega^*}^F \leq \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega}^F \leq \underline{\lambda}_{\text{VER}}^F \\ \left\| \underline{\lambda}_{\text{eff}}^M - \underline{\lambda}_{\text{VER}}^M \right\| \leq \min \left\{ \left( \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega}^G - \underline{\lambda}_{\text{VER}}^G \right), \left( \underline{\lambda}_{\text{VER}}^F - \underline{\lambda}_{\text{eff},\Omega}^F \right) \right\} \end{cases} \quad (14)$$

La dernière relation dans (14) justifie la convergence plus rapide de la conductivité effective calculée avec la CL mixte qu'avec les CL en gradient et flux uniformes. Ce résultat sera validé avec les résultats de simulation dans la section 5.2. Rappelons que la compatibilité de ce chargement mixte avec le principe de Hill a été admise dans cette section, hypothèse qui peut et doit être systématiquement vérifiée à partir des résultats de chaque calcul.

## 4 Simulation numérique sur la mousse tomographiée

En raison de la grande taille du volume tomographié (275 millions de voxels), des calculs sont effectués sur des sous-domaines cubiques découpés du volume. Trois tailles de sous-domaine ont été étudiées (de 2,2 à 17,6 millions d'éléments par sous-domaine). Ces volumes sont plus de 100 fois supérieures à la portée intégrale [6], ce qui permet de faire l'hypothèse d'une taille supérieure à la « taille critique de convergence » évoquée dans (14).

Chaque sous-domaine de mousse tomographiée est discrétisé en éléments linéaires (P1) hexaédriques, avec un élément par voxel. Chaque élément est attribué une conductivité thermique constante isotrope correspondant à celle du matériau à 25 °C [1, 16]. La conduction pure tridimensionnelle en régime établi (exemple sur la Figure 4) est simulée sous le logiciel Abaqus/Standard 6.14-5. L'équation de chaleur (1) est résolue en chaque point avec un solveur itératif de type Krylov préconditionné. Pour un domaine à 8 millions d'éléments, le temps de calcul du tenseur de conductivité effective est de trois heures sur une machine quatre-cœurs à 2,20 GHz.

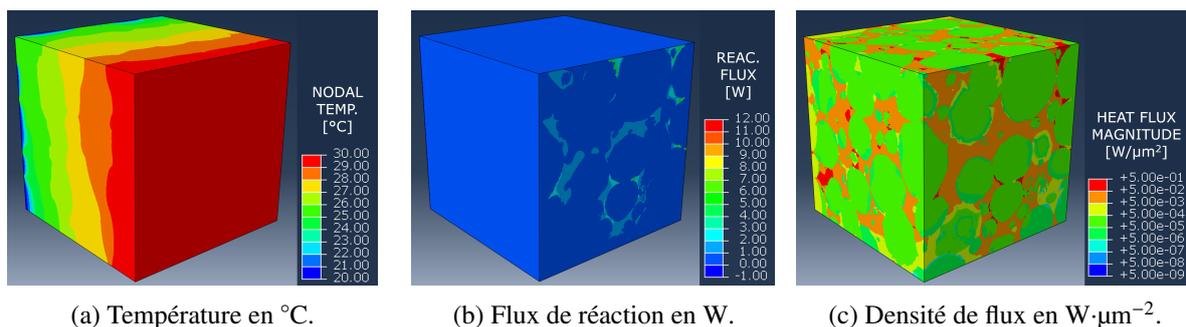


FIGURE 4 – Champs simulés avec la condition mixte sur un sous-domaine de 17,6 millions d'éléments.

## 5 Résultats de simulation

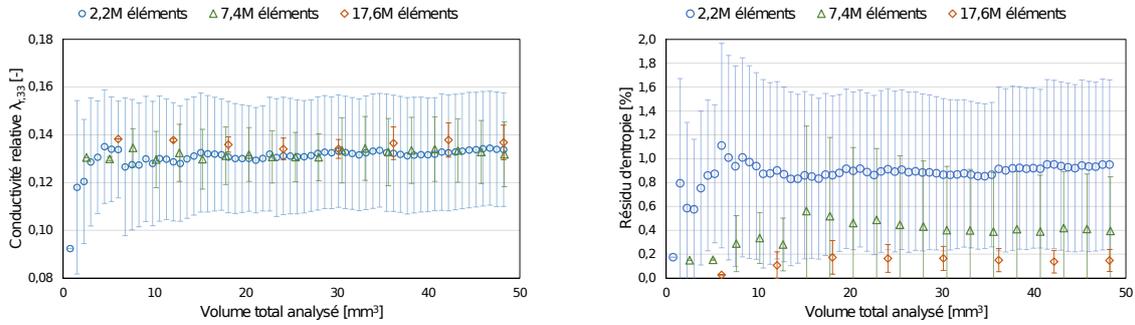
Les résultats de simulation sur la mousse NorFoam® permettent de vérifier dans un premier temps la compatibilité de la CL mixte par rapport aux critères de validité énoncés, puis de comparer les conductivités effectives obtenues avec les CL mixte et uniformes. Les conclusions tirées justifient le choix de la CL mixte pour une meilleure prédiction de la conductivité effective des mousses tomographiées.

### 5.1 Pertinence de la condition aux limites mixte

Selon le théorème de la division du domaine [17], la propriété effective d'un grand domaine peut être estimée à travers la moyenne stochastique des propriétés effectives de sous-domaines. Sur la Figure 5(a), pour chacune des tailles de sous-domaine considérées, les moyennes stochastiques de la conductivité relative (conductivité effective divisée par la conductivité de la phase solide [4]) obtenue avec la CL mixte sont tracées en fonction du volume total analysé (nombre de sous-domaines multiplié par leur volume). À partir d'un volume total analysé de  $25 \text{ mm}^3$ , les courbes se rejoignent, ce qui est cohérent avec le théorème de la division du domaine.

Deux critères ont été proposés dans la section 3.2 pour une vérification *a priori* du principe de Hill par la CL mixte. Dans le cas de la mousse NorFoam®, le premier critère est vérifié (matrice de conductivité diagonale), tandis que le second (répartition statistiquement homogène de la porosité) doit être vérifié pour des sous-domaines suffisamment grands. À travers la moyenne stochastique du résidu d'entropie (écart en % entre les entropies macroscopique et microscopique (9)) tracée sur la Figure 5(b), une vérification *a posteriori* est faite. L'évolution de ce résidu, qui s'annule lorsque les entropies macroscopique et microscopique sont égales, montre en effet que le principe de Hill est quasiment vérifié à partir d'un volume de 7,4 millions d'éléments (résidu inférieur à 1%).

Sur les deux sous-figures, les écarts-type stochastiques (représentés par les barres d'erreur) diminuent avec une augmentation de la taille de sous-domaine. Cette évolution est attendue car plus les sous-domaines sont grands, plus ils doivent être représentatifs du milieu entier.



(a) Évolution de la conductivité relative directionnelle.

(b) Évolution du résidu d'entropie.

FIGURE 5 – Moyennes stochastiques en fonction du volume total analysé pour différentes tailles de sous-domaines (en millions d'éléments). Les barres d'erreurs indiquent l'écart-type stochastique.

## 5.2 Comparaison des conductivités effectives calculées avec différentes conditions aux limites

Les conductivités relatives calculées sur tous les sous-domaines à 7,4 millions d'éléments par les CL uniformes et mixte sont comparées sur la Figure 6. Ce choix permet de mettre en évidence l'effet d'une très faible variation de la porosité (quelques % liée à la répartition spatiale hétérogène des pores) sur la conductivité effective. Puisque l'anisotropie du matériau caractérisée dans la section 2 est faible, ces conductivités sont comparées aux bornes de Hashin-Shtrikman (aussi connues sous le nom de Maxwell-Eucken en thermique), qui sont des bornes théoriques strictes pour des domaines isotropes.

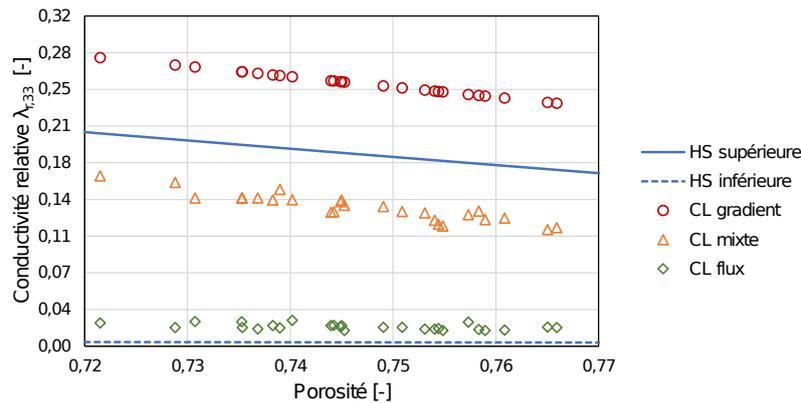


FIGURE 6 – Conductivités relatives calculées avec différentes conditions aux limites (gradient uniforme, flux uniforme, et mixte), comparées avec les bornes de Hashin-Shtrikman (HS) [5].

Les résultats sont cohérents avec les relations établies dans (13). En raison du fort contraste de propriétés entre l'air et la phase solide, l'écart entre les conductivités calculées avec les CL uniformes ainsi que celui entre les bornes de Hashin-Shtrikman sont très importants [4, 6]. La convergence est également très lente pour la CL en gradient uniforme (conductivité dépassant la borne supérieure de Hashin-Shtrikman même avec des sous-domaines plus grands). Ces résultats confirment la conclusion de la section 3.3 que la CL mixte donne une meilleure vitesse de convergence que les CL uniformes.

## 6 Conclusions et perspectives

Pour le calcul de conductivité thermique effective des mousses tomographiées, la pertinence d'une condition aux limites mixte dite du « transfert globalement unidirectionnel entre plans parallèles » a été étudiée. Un développement théorique montre que cette condition aux limites respecte le principe de Hill lorsque le domaine de calcul est orthotrope dans le repère considéré, et que la porosité est répartie de manière homogène dans le volume. La convergence de la conductivité effective calculée avec cette condition mixte est plus rapide qu'avec les conditions en flux et gradient uniformes. Ces conclusions sont validées par la simulation numérique sur une mousse céramique tomographiée, justifiant le choix de

cette condition mixte pour une meilleure prédiction de la conductivité effective des mousses.

À terme, des mesures expérimentales de conductivité effective pourraient être envisagées pour valider les résultats numériques de cette étude. Il serait également intéressant d'étudier l'applicabilité de cette condition mixte dans le cas des matériaux poreux à plus forte anisotropie.

## 7 Remerciements

Cette étude a été menée dans le cadre d'une convention CIFRE (n°2017/0775) établie entre le LaM-CoS et SGR Provence, et gérée par l'ANRT. Les auteurs souhaitent remercier J. Adrien (Mateis) ainsi que N. Raffin et Y. Millot (SGR Provence) de l'aide fournie lors de la micro-tomographie par rayons X.

## Références

- [1] R. Coquard, D. Baillis. *Modeling of Heat Transfer in Low-Density EPS Foams*, J. Heat Transfer, pp. 538-549, 2006.
- [2] S. Haussener, A. Steinfeld. *Effective Heat and Mass Transport Properties of Anisotropic Porous Ceria for Solar Thermochemical Fuel Generation*, Materials, pp. 192-209, 2012.
- [3] H.X. Peng, Z. Fan, J.R.G. Evans, J.J.C. Busfield. *Microstructure of ceramic foams*, J. Eur. Ceram. Soc., pp. 807-813, 2000.
- [4] W. Pabst, E. Gregorová. *Conductivity of porous materials with spheroidal pores*, J. Eur. Ceram. Soc., pp. 2757-2766, 2014.
- [5] J. Qu, M. Cherkaoui. *Fundamentals of Micromechanics of Solids*, John Wiley & Sons, Inc, 2006.
- [6] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin. *Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach*, Int. J. Solids Struct., pp. 3647-3679, 2003.
- [7] A. Wiegmann, A. Zemitis. *EJ-HEAT : A Fast Explicit Jump Harmonic Averaging Solver for the Effective Heat Conductivity of Composite Materials*, Berichte des Fraunhofer ITWM, 2006.
- [8] J.C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet. *A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast*, Int. J. Numer. Methods Eng., pp. 139-160, 2001.
- [9] S. Hazanov, C. Huet. *Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume*, J. Mech. Phys. Solids, pp. 1995-2011, 1994.
- [10] Organisation internationale de normalisation (ISO). *Isolation thermique - Détermination de la résistance thermique et des propriétés connexes en régime stationnaire - Méthode de la plaque chaude gardée*, ISO 8302 :1991(fr), 1991.
- [11] D. Baillis, R. Coquard. *Radiative and Conductive Thermal Properties of Foams*, Cellular and Porous Materials : Thermal Properties Simulation and Prediction, pp.343-384, 2008.
- [12] N. Otsu. *A threshold selection method from gray-level histograms*, IEEE Trans. Sys. Man Cybern., pp. 62-66, 1979.
- [13] J. Schindelin *et al.* *Fiji : an open-source platform for biological-image analysis*, Nature Methods, pp. 676-682, 2012.
- [14] E. Brun, J. Vicente, F. Topin, R. Occelli. *iMorph : A 3D morphological tool to fully analyze all kind of cellular materials*, Proc. CellMet'08, pp. 1-6, 2008.
- [15] I. Özdemir, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers. *Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids*, Int. J. Numer. Meth. Engng., pp. 185-204, 2008.
- [16] D.S. Smith, S. Fayette, S. Grandjean, C. Martin. *Thermal resistance of grain boundaries in alumina ceramics and refractories*, J. Am. Ceram. Soc., pp. 105-111, 2003.
- [17] C. Huet. *Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies*, J. Mech. Phys. Solids, pp. 813-841, 1990.