

# Techniques de génération de mousses virtuelles pour le calcul de conductivité thermique effective

Z.K. LOW<sup>a,b</sup>, N. BLAL<sup>a</sup>, N. NAOUAR<sup>a</sup>, L. SAN MIGUEL<sup>b</sup>, D. BAILLIS<sup>a</sup>

a. Univ Lyon, INSA-Lyon, CNRS UMR5259, LaMCoS, F-69621 Villeurbanne. {zi.low@insa-lyon.fr}

b. Saint-Gobain Research Provence, F-84306 Cavaillon.

## Résumé :

*L'influence de la technique de génération sur la conductivité thermique effective des mousses virtuelles est étudiée dans ce travail, qui vise à améliorer la simulation des mousses de porosités intermédiaires (entre 60% et 85%) fabriquées par moussage direct, possédant généralement des pores sphéroïdaux. Des mousses virtuelles générées avec deux algorithmes récents – l'un basé sur l'enlèvement des sphères et l'autre sur la construction du squelette à partir des cellules de Voronoï – sont comparées avec une mousse réelle tomographiée. Les paramètres morphologiques des mousses réelles et virtuelles sont extraits et comparés par analyse d'images, et des calculs d'homogénéisation en conduction thermique pure sont effectués par méthode des éléments finis. La morphologie et la conductivité thermique effective des mousses virtuelles générées sont en bon accord avec celles de la mousse réelle, ce qui valide la simulation de ce type de mousse par les deux algorithmes considérés.*

**Mots clefs : Mousse, Modélisation, Microstructure, Conductivité thermique, Homogénéisation**

## 1 Introduction

Grâce à leurs propriétés thermiques et mécaniques intéressantes, les mousses sont de plus en plus utilisées dans beaucoup de domaines, et ce jusqu'à très haute température (plus de 1200 °C) dans le cas des mousses céramiques réfractaires. Dans la simulation numérique de leurs propriétés effectives macroscopiques, une modélisation réaliste de la morphologie des pores est nécessaire pour bien tenir compte des phénomènes locaux [1]. Bien que la tomographie à rayons X permette de fournir directement des reconstructions numériques de mousses réelles, l'approche plus versatile consiste à générer des volumes élémentaires représentatifs (VER) à partir des paramètres morphologiques prescrits, ce qui permet de réaliser plus facilement des études paramétriques sur la microstructure [2].

La plupart des travaux passés portent sur la modélisation des mousses de haute porosité (plus de 80% [2]) dont la morphologie squelettique est souvent générée à partir des cellules aléatoires de Voronoï [3], approche basée sur la modélisation des mousses de savon [4]. De nombreuses stratégies ont été développées afin de reproduire les détails morphologiques fins sur la phase solide [5, 6]. Cette approche a également été employée dans les mousses céramiques de plus basses porosités (ex. 68% [7]) lorsqu'elles sont fabriquées par imprégnation d'une préforme poreuse : la préforme étant typiquement une mousse polymère de haute porosité ouverte, sa morphologie squelettique est reproduite dans la céramique finale [8]. En revanche, moins de travaux ont été faits sur les mousses fabriquées par moussage direct [9, 10], dans

lesquelles une transition d'une structure squelettique vers une structure à pores sphéroïdaux peut être observée à porosités intermédiaires (entre 85% et 60% selon la Figure 1). Ces mousses sont souvent simulées par l'enlèvement de sphères d'une matrice solide [5, 10, 11], approche plus simple imposant toutefois une sphéricité parfaite qui n'existe pas dans les mousses réelles.

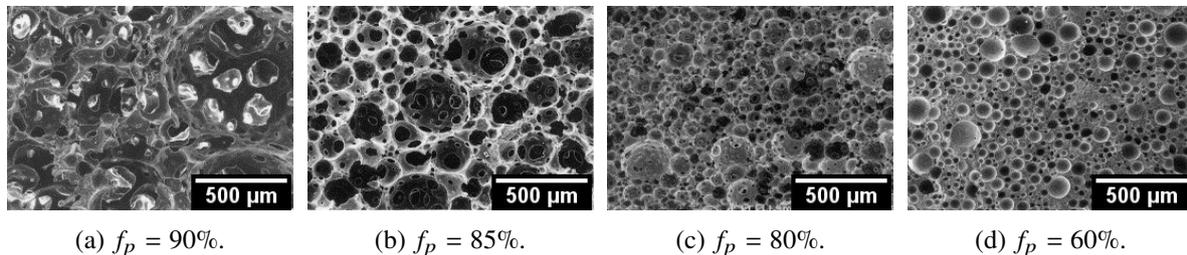


FIGURE 1 – Mousses d'alumine de différentes porosités  $f_p$  fabriquées par moussage direct [9].

Pour les mousses céramiques fabriquées par moussage direct, une technique de génération de VER basée sur les cellules de Voronoï stabilisées [4] est proposée dans ce travail. Inspirée des algorithmes qui sont jusqu'ici limités à des mousses de porosités supérieures à 90% [6, 12], elle permet de n'utiliser qu'une seule technique pour simuler une gamme très large de porosités, en reproduisant fidèlement la transition entre les deux morphologies à porosités intermédiaires. En prenant comme référence la reconstruction tomographique d'une mousse d'alumine ayant une porosité de 76% fabriquée par moussage direct, des mousses virtuelles sont générées avec la technique proposée (construction du squelette solide à partir des cellules de Voronoï), puis comparées à celles obtenues avec un algorithme récent basé sur l'enlèvement des sphères [5]. La comparaison est faite non seulement sur les paramètres morphologiques, mais aussi sur la conductivité effective calculée par méthode des éléments finis, afin d'étudier l'impact de la technique de génération sur les propriétés simulées.

## 2 Méthodes numériques

### 2.1 Analyse tomographique d'une mousse de référence

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). Une reconstruction 3D de dimensions physiques de 4,5 × 4,5 × 4,5 mm<sup>3</sup> a été obtenue par microtomographie aux rayons X. Le seuillage automatique et le débruitage de l'image ont été effectués sous le logiciel Fiji [13] pour obtenir une image binaire d'une taille de voxel de 7 μm (Figure 2a). Les paramètres morphologiques de la mousse sont caractérisés avec le logiciel d'analyse d'images iMorph [14] et résumés dans le Tableau 1 (section 3). La distribution de taille de pores peut être décrite par une loi lognormale. La variance de cette loi, la porosité cible et le nombre de pores par unité de volume sont retenus comme paramètres d'entrée aux algorithmes de génération de VER.

### 2.2 Algorithmes de génération de mousses virtuelles

Un empilement périodique de sphères polydispersées, point de départ pour la plupart des algorithmes de génération [3, 5, 11], a été généré à partir de la variance et le nombre de pores par unité de volume fournis. Avec la porosité comme cible, deux algorithmes de génération de mousses virtuelles sont utilisés pour générer des mousses périodiques aléatoires :

- *Algorithme A (par enlèvement de sphères)*. Dans cet algorithme proposé par Cunsolo *et al.* [5], les sphères sont d’abord soumises à un processus de gonflement et secousse, puis soustraites d’une matrice solide représentée par des voxels. Un filtrage gaussien et seuillage de l’image permet d’atteindre la porosité cible. La microstructure obtenue (Figure 2b) est visuellement très similaire à la mousse réelle.
- *Algorithme B (par construction du squelette solide)*. Cet algorithme, inspiré des travaux passés sur des mousses de porosité supérieure à 90% [6, 12], a été adapté pour les mousses à porosités intermédiaires. Des cellules de Laguerre-Voronoi stabilisée sont d’abord générées à partir des centres des sphères. Un squelette de très haute porosité est ensuite créé par l’ajout de bâtonnets fins aux arêtes des cellules. Sous la contrainte de minimisation de l’énergie d’interface [15], le squelette est enfin dilaté jusqu’à atteindre le volume poreux ciblé. Les mousses ainsi générées (Figure 2c) sont aussi similaires à la mousse réelle. Contrairement à celles obtenues avec l’Algorithme A, la sphéricité des pores n’est pas imposée.

Les paramètres morphologiques des mousses virtuelles ont aussi été caractérisés par analyse d’images 3D [14] et comparés avec ceux de la mousse réelle tomographiée dans le Tableau 1 (section 3).

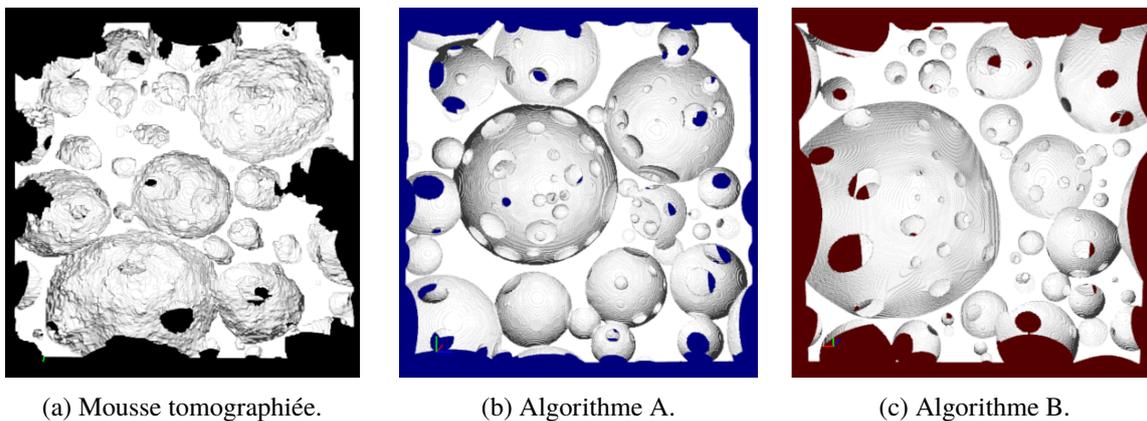


FIGURE 2 – Morphologies de la mousse réelle et des mousses virtuelles générées avec les deux algorithmes (échantillons de  $2 \times 2 \times 2 \text{ mm}^3$ ).

### 2.3 Calcul de conductivité thermique effective

Dans le cas de la conduction thermique pure en régime établi sans source volumique de chaleur, la loi de Fourier relie le vecteur de flux thermique  $\mathbf{q}$  et le gradient de température  $\nabla\theta$  en tout point du milieu :  $\mathbf{q} = -\lambda \cdot \nabla\theta$ , où  $\lambda$  est la conductivité thermique locale (supposée isotrope et constante avec la température). Pour un domaine hétérogène  $\Omega$  donné, l’objectif d’un calcul d’homogénéisation est la recherche de la conductivité thermique effective  $\lambda_{\text{eff}}$  satisfaisant la loi de Fourier macroscopique (1) :

$$\langle \mathbf{q} \rangle = -\lambda_{\text{eff}} \cdot \langle \nabla\theta \rangle \quad \text{avec} \quad \langle X \rangle = \frac{1}{V_{\Omega}} \iiint_{\Omega} X \, dV \quad (1)$$

Les conditions aux limites doivent être choisies de manière à ce que la dissipation d’entropie soit conservée lors du changement d’échelle :  $\langle \mathbf{q} \cdot \nabla\theta \rangle = \langle \mathbf{q} \rangle \cdot \langle \nabla\theta \rangle$  [16]. Pour des domaines de taille quelconque, la meilleure estimation de la conductivité effective est obtenue avec les conditions aux limites périodiques [16] données par l’équation (2). Ces dernières ne sont toutefois pas adaptées aux domaines non-périodiques tels que les mousses tomographiées, pour lesquelles les travaux passés [1, 17] emploient

souvent les conditions aux limites mixtes données par l'équation (3). Des justifications de ces conditions mixtes pour le calcul de conductivité effective sur des mousses tomographiées ont récemment été apportées [18].

Soit un domaine parallélépipédique de dimensions  $L_1 \times L_2 \times L_3$  défini dans le repère  $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ , sur lequel un gradient de température macroscopique  $G_0 \mathbf{e}_i$  (dont  $i \in \{1, 2, 3\}$ ) est imposé suivant l'une des trois directions principales. Les conditions aux limites périodiques (2) sont utilisées pour calculer la conductivité effective des mousses virtuelles :

$$\forall j \in \{1, 2, 3\}, \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_j, \begin{cases} \theta(\mathbf{x}) = \theta(\mathbf{x} - L_j \mathbf{e}_j) + G_0 L_j & \text{si } i = j \\ \theta(\mathbf{x}) = \theta(\mathbf{x} - L_j \mathbf{e}_j) & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (2)$$

Où  $\partial\Omega_j$  est la face du cube de vecteur normal  $+\mathbf{e}_j$ .

Pour les mousses réelles tomographiées, les conditions mixtes (3) sont utilisées :

$$\forall j \in \{1, 2, 3\}, \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_j, \begin{cases} \theta(\mathbf{x}) = G_0 L_j \text{ et } \theta(\mathbf{x} - L_j \mathbf{e}_j) = 0 & \text{si } i = j \\ \mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}_j = \mathbf{q}(\mathbf{x} - L_j \mathbf{e}_j) \cdot (-\mathbf{e}_j) = 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3)$$

La conduction thermique pure dans ces mousses a été simulée par méthode des éléments finis sous Abaqus/Standard 6.14-5 (solveur itératif). Des éléments linéaires (P1) hexaédriques de même taille que les voxels ont été utilisés pour mailler les deux phases, permettant de limiter l'erreur de discrétisation à moins de 4% selon une étude de sensibilité au maillage.

### 3 Résultats et discussion

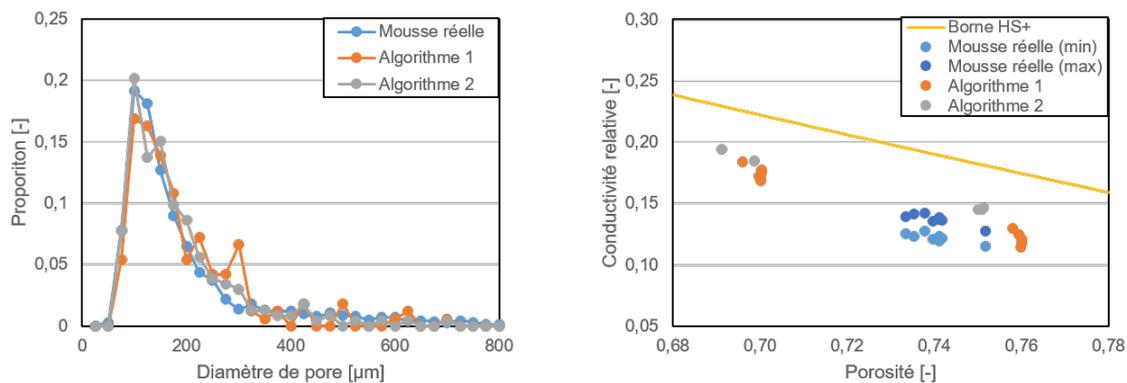
Les principaux paramètres morphologiques obtenus par analyse d'images 3D sont résumés dans le Tableau 1 et permettent de valider quantitativement la morphologie des mousses générées. En particulier, l'Algorithme B fournit une meilleure estimation de la surface spécifique de la mousse tomographiée (écart de -7% par rapport à -16% avec l'Algorithme A), ce qui montre la capacité d'une approche basée sur la minimisation de l'énergie d'interface à simuler des surfaces plus réalistes.

TABLE 1 – Paramètres morphologiques principaux des mousses.

Paramètre morphologique	Mousse réelle	Algorithme A	Algorithme B
Porosité [%]	$76 \pm 2$	$76 \pm 1$	$76 \pm 1$
Surface spécifique [ $m^2/m^3$ ]	$10\,900 \pm 100$	$9200 \pm 100$	$10\,100 \pm 100$
Tortuosité phase solide [-]	$1,038 \pm 0,001$	$1,041 \pm 0,001$	$1,032 \pm 0,001$

La Figure 3a montre également que la distribution de taille de pores de la mousses réelle a été reproduite fidèlement dans les mousses virtuelles. Il est à noter que lors de la génération de mousses virtuelles, seuls la variance de la loi lognormale, la porosité finale et le nombre de pores sont imposés. Les pores étant libres de se dilater pour atteindre la porosité cible, l'accord trouvé sur les diamètres n'est pas anodin, et confirme la robustesse des deux algorithmes.

Sur la Figure 3b, les conductivités relatives (conductivités effectives pondérées par la conductivité de la phase solide) des différentes réalisations de mousses virtuelles sont comparées à celles de différents sous-domaines prélevés au sein de la reconstruction tomographique de la mousse réelle. L'influence



(a) Distribution de taille.

(b) Conductivité effective.

FIGURE 3 – Comparaison des propriétés des mousses réelles et virtuelles.

d'une petite variation de porosité est également mise en évidence, avec la borne supérieure de Hashin-Shtrikmann (HS+) comme référence.

La conductivité calculée sur les mousses virtuelles sont isotropes, tandis que ceux sur les mousses tomographiées révèlent une légère anisotropie, illustrée par les courbes *min* et *max* sur la Figure 3b. Les valeurs de conductivité des mousses virtuelles générées restent toutefois très proches de celles des mousses réelles, et la variation entre les différentes réalisations est du même ordre que l'anisotropie dans les mousses réelles. Ces résultats confirment que les deux algorithmes de génération considérés dans cette étude conviennent à la prédiction de la conductivité thermique des mousses, malgré les différences dans les approches employées.

## 4 Conclusion

Des mousses virtuelles générées avec deux approches différentes – par enlèvement des sphères et par construction d'un squelette solide à partir des cellules de Voronoï – ont été comparées avec une mousse réelle d'une porosité de 76% fabriquée par moussage direct. Le bon accord sur les paramètres morphologiques et conductivité thermique effective valident la simulation de ce type de mousse par les deux approches considérées. L'approche basée sur des cellules de Voronoï permet notamment d'avoir des surfaces plus réalistes. La variation des propriétés effectives liée à la nature aléatoire de la microstructure est du même ordre que l'anisotropie dans la mousse réelle. Cette variabilité mérite une analyse plus approfondie avec des outils statistiques [19] afin de trouver le meilleur compromis entre taille et nombre de réalisations et précision de résultats. Il serait également intéressant d'effectuer plus d'études paramétriques avec les deux algorithmes afin de clarifier la pertinence de ces approches pour d'autres gammes de porosité ou de tailles de pores.

## Références

- [1] D. Baillis, R. Coquard, Radiative and Conductive Thermal Properties of Foams, in: A. Öchsner, G.E. Murch, M.J.S. de Lemos (ed.), Cellular and Porous Materials: Thermal Properties Simulation and Prediction, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008, pp. 343–384.

- [2] J.H. Randrianalisoa, R. Coquard, D. Baillis, Microscale direct calculation of solid phase conductivity of Voronoi's foams, *Journal of Porous Media*, 16:5 (2013) 411–426.
- [3] J. Randrianalisoa, D. Baillis, C.L. Martin, R. Dendievel, Microstructure effects on thermal conductivity of open-cell foams generated from the Laguerre–Voronoi tessellation method, *International Journal of Thermal Sciences*, 98 (2015) 277–286.
- [4] A.M. Kraynik, D.A. Reinelt, F. van Swol, Structure of random monodisperse foam, *Physical Review E*, 67:031403 (2003) 1–11.
- [5] S. Cunsolo, D. Baillis, N. Bianco, Improved Monte Carlo methods for computational modelling of thermal radiation applied to porous cellular materials, *International Journal of Thermal Sciences*, 137 (2019) 161–179.
- [6] A. Kopanidis, A. Theodorakakos, E. Gavaises, D. Bouris, 3D numerical simulation of flow and conjugate heat transfer through a pore scale model of high porosity open cell metal foam, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 53 (2010) 2539–2550.
- [7] S. Guévelou, B. Rousseau, G. Domingues, J. Vicente, C. Caliot, Representative elementary volumes required to characterize the normal spectral emittance of silicon carbide foams used as volumetric solar absorbers, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93 (2016) 118–129.
- [8] A.R. Studart, U.T. Gonzenbach, E. Tervoort, L.J. Gauckler, Processing Routes to Macroporous Ceramics: A Review, *Journal of the American Ceramic Society*, 86:6 (2006) 1771–1789.
- [9] P. Sepulveda, J. G. P. Binner, Processing of Cellular Ceramics by Foaming and in situ Polymerisation of Organic Monomers, *Journal of the European Ceramic Society*, 19 (1999) 2059–2066.
- [10] H.X. Peng, Z. Fan, J.R.G. Evans, J.J.C. Busfield, Microstructure of ceramic foams, *Journal of the European Ceramic Society*, 20 (2000) 807–813.
- [11] N.J. Dyck, A.G. Straatman, A new approach to digital generation of spherical void phase porous media microstructures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 81 (2015) 470–477.
- [12] B. Buffel, F. Desplentere, K. Bracke, I. Verpoest, Modelling open cell-foams based on the Weaire–Phelan unit cell with a minimal surface energy approach, *International Journal of Solids and Structures*, 51 (2014) 3461–3470.
- [13] J. Schindelin *et al.*, Fiji: an open-source platform for biological-image analysis, *Nature Methods*, 9:7 (2012) 676–682.
- [14] E. Brun, J. Vicente, F. Topin, R. Occelli. iMorph: A 3D morphological tool to fully analyze all kind of cellular materials, in: *Proceedings of the 2nd International Symposium on Cellular Metals for Structural and Functional Applications (CELLMET 2008)*, Dresden, Germany, 2008, pp. 1–6.
- [15] K.A. Brakke, The Surface Evolver, *Experimental Mathematics*, 1:2 (1992) 141–165.
- [16] I. Özdemir, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers, Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73 (2008) 185–204.
- [17] M.A.A. Mendes *et al.*, Measurement and simplified numerical prediction of effective thermal conductivity of open-cell ceramic foams at high temperature, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 102 (2016) 396–406;
- [18] Z.K. Low, N. Blal, N. Naouar, L. San Miguel, D. Baillis., in: *14ème Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2019)*, Hyères, France, 2019, pp. 1–8.

- [19] 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, *International Journal of Solids and Structures*, 67:3 (2003) 3647–3679.