

Table des matières

Introduction Générale	xvii
I Phénoménologie et Modèles	1
1 Transferts dans la tuyère et composites C/C	3
1.1 Écoulement et transferts en tuyère	3
1.1.1 Caractéristiques globales de l'écoulement	3
1.1.2 Écoulement au cœur de la tuyère	5
1.1.3 Transferts pariétaux	8
1.2 Composites C/C Ablatifs	17
1.2.1 Organisation Multi-échelle du carbone	17
1.2.2 Observation microscopique	21
1.3 Conclusion	25
2 Définition de la stratégie de modélisation	27
2.1 Description globale du processus	27
2.1.1 Conservation des espèces	28
2.1.2 Conservation de la quantité de mouvement	29
2.2 Échelles et couplages	30
2.2.1 Échelles spatiales	30
2.2.2 Paramètres caractéristiques de l'étude	31
2.2.3 Échelles temporelles	37
2.3 Modèles d'ablation	39
2.3.1 Modèles de transfert et de récession	40
2.3.2 Modèle pour la géométrie du composite	47
2.4 Changements d'échelle : objectifs et outils	48
2.4.1 Notion de milieu effectif	48
2.4.2 Surface effective pour les composites C/C des cols de tuyères .	48
2.4.3 Approches de changement d'échelle	49
2.5 Plan d'étude	52
II Modélisation de surfaces réactives hétérogènes	55
3 Modélisation de surfaces non-récessives	57

3.1	Surface lisse	58
3.1.1	Modèle étudié	59
3.1.2	Construction théorique de la réactivité effective	61
3.1.3	Mise en œuvre numérique	65
3.1.4	Résultats	67
3.1.5	Discussion	71
3.2	Surface rugueuse	73
3.2.1	Condition effective pour le champ de vitesse	74
3.2.2	Réactivité effective	78
3.2.3	Comparaison simulation directe-milieu effectif	81
3.3	Conclusion	86
4	Étude analytique de surfaces récessives	89
4.1	Régime réactif	91
4.1.1	Évolution morphologique	92
4.1.2	Vitesse stationnaire et réactivité effective	94
4.1.3	Régime Transitoire	95
4.1.4	Optimisation des fils et baguettes en régime réactif	96
4.2	Ablation sous flux 1D	98
4.2.1	Équation d'évolution de la surface	98
4.2.2	Surface homogène	99
4.2.3	Surface hétérogène	102
4.3	Conclusion	109
5	Étude numérique de surfaces récessives	111
5.1	Code de simulation numérique	111
5.1.1	Méthode numérique	112
5.1.2	Validation	121
5.2	Expérimentation numérique	125
5.2.1	Comportement instationnaire	126
5.2.2	Réactivité effective stationnaire	131
5.2.3	Autres géométries	134
5.3	Conclusion	140
III	Applications aux composites C/C	143
6	Identification des réactivités élémentaires	145
6.1	Position du problème inverse	146
6.2	Identification des paramètres morphologiques	147
6.3	Calcul de la réactivité effective	149
6.4	Simulations	153
6.5	Conclusion	156

7 Application à l'échelle mésoscopique	157
7.1 Matériaux 4D atypiques	157
7.1.1 Matrice effective	157
7.1.2 Comportement du composite	161
7.2 Comparaison d'architectures tissées	163
7.2.1 Comparaison des composites	163
7.2.2 Comportement ablatif	164
7.3 Conclusion	168
Conclusion Générale	169
Annexes et Bibliographie	175
A Simulation de l'ablation sous flux 1D	175
A.1 Description transitoire	175
A.1.1 Évolution de chaque point de la surface	175
A.1.2 Application du principe de Huygens à l'évolution de singularités	177
A.2 Simulations Numériques	180
Nomenclature	190
Bibliographie	195

Table des figures

1.1	Evolution de la vitesse en fonction du nombre de Mach.	6
1.2	Régimes d'écoulement le long de l'axe de la tuyère.	7
1.3	Evolution des propriétés du gaz en fonction du nombre de Mach.	8
1.4	Distribution de la vitesse moyenne dans la couche limite	9
1.5	Limites des domaines visqueux et turbulent	9
1.6	Viscosité turbulente	10
1.7	Lois proposées dans la littérature pour la vitesse de récession du carbone et domaine modèle.	13
1.8	Distribution de la température moyenne dans la couche limite au niveau du col en fonction de la distance à la paroi.	15
1.9	Enthalpies des réactions d'oxydation en fonction de la température. .	16
1.10	Échelles structurales du matériau composite.	18
1.11	Structure cristalline du graphite.	19
1.12	Structure turbostratique.	19
1.13	Types de bords de plans de graphène.	20
1.14	Procédés de fabrication des composites C/C	22
1.15	Architecture des matériaux C/C SPS	23
1.16	Matériaux 4D-1	24
1.17	Matériaux tissés	25
2.1	Représentation du processus d'ablation d'un col de tuyère.	27
2.2	Paroi réactive Σ	29
2.3	Schématisation des transferts se déroulant à l'échelle mésoscopique et microscopique.	31
2.4	Couplages entre les différents phénomènes majeurs et intensité mise en évidence à ce stade d'étude.	35
2.5	Position du problème microscopique et mésoscopique dans l'espace des paramètres.	38
2.6	Échelle des temps caractéristiques des phénomènes aux échelles microscopique et mésoscopique.	39
2.7	Profils linéaires de concentration dans une couche limite laminaire. (Haut de la couche limite en $z = 0$)	45
2.8	Changements d'échelle.	49
2.9	Représentation multi-échelle d'un milieu poreux périodique de réactivité non uniforme.	50
2.10	Couplages retenus pour les différents cas d'ablation traités.	53

3.1	Couplages retenus dans le cadre de l'étude d'une surface lisse non-récessive	58
3.2	Iso-contours de concentration et distribution de vitesse au dessus d'une paroi hétérogène.	59
3.3	Domaine élémentaire Ω_i	63
3.4	Graphe de la fonction f dans la construction de la solution de Blasius	66
3.5	Profil de la variable s sur Σ	68
3.6	Iso-contours de s en fonction de Da	68
3.7	Iso-contours de s en fonction de Pe	69
3.8	Iso-contours de s en fonction de Re	69
3.9	Effets des nombres de Damköhler et Reynolds sur la réactivité effective pour $\tilde{K} = 3$, $Sc = 1$ et $\phi_f = 0.5$	70
3.10	Effets des nombres de Reynolds et de Schmidt sur la réactivité effective pour $\tilde{K} = 3$ et $\phi_f = 0.5$	70
3.11	Réactivité effective en fonction de \tilde{K}	71
3.12	Comparaison entre les points obtenus par simulation pour $Da = 10^3$, $Pe = 0$ et la moyenne harmonique pour $\phi_f = 0.5$	72
3.13	Couplages retenus dans l'étude d'une paroi rugueuse non-récessive.	74
3.14	Milieu rugueux Ω et milieu effectif Ω_{eff}	74
3.15	Iso-contours de χ	77
3.16	Distribution de χ_y	78
3.17	Réactivité effective obtenue pour la cellule en hémiellipse en fonction du nombre Reynolds local Re_μ pour différents nombres de Damköhler moyens $\langle Da \rangle$ et différents nombres de Schmidt Sc avec $\tilde{K} = 6$	81
3.18	Lignes de courant pour le flux total N	82
3.19	Maillages utilisés pour le système rugueux et le système effectif.	83
3.20	Isocontours de $u = 2, 4, 6, 8, 10, 12 m.s^{-1}$ pour le système rugueux et le système effectif pour $Re = 50$ et $l_\mu/L = 2.5 10^{-2}$	84
3.21	Distribution de u	84
3.22	Isocontours $\frac{c}{C_0}$	85
4.1	Repères et déplacements utilisés dans les modèles de surface récessive.	90
4.2	Couplages retenus dans l'étude d'une paroi récessive.	91
4.3	Paroi récessive Σ	92
4.4	Représentation de l'évolution d'un système fibre-matrice avec $\frac{k_m}{k_f} = \frac{4}{3}$.	93
4.5	Représentation des profils obtenus pour $\tilde{K} = 2, 5, 10$ (Résultats obtenus par simulation numérique).	94
4.6	Évolution de la réactivité effective au cours du temps pour $\tilde{K} = 4$ et $\phi_f = 0.5$	96
4.7	Observation MEB d'une fibre d'un composite C/C (extrait de Duffa et al. (2005)).	99
4.8	Système de coordonnées et représentation d'une surface stationnaire.	101
4.9	Représentation du profil d'une surface hétérogène stationnaire.	103

4.10	Profil stationnaire du composite obtenu par le modèle 1D pour $\phi_f = 0.75$, $\tilde{K} = 4$ et $Da_m = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10, 10^2 \dots$	106
4.11	Réactivité effective analytique dans le cas 1D en fonction du nombre de Damköhler défini par rapport à la matrice pour un taux de fibre $\phi_f = 0.5$.	109
5.1	Couplages implantés dans le modèle numérique.	111
5.2	Représentation de l'interface à l'échelle des voxels.	115
5.3	Erreur entre le flux calculé par DiAbl3D et le modèle analytique pour une surface homogène.	122
5.4	Comparaison entre les champs de concentrations calculés par DiAbl3D et Comsol.	123
5.5	Simulation de l'évolution d'un cube en régime diffusif ($Da = 10^3$).	124
5.6	Évolution morphologique en régime réactif avec $\tilde{K} = 6$.	124
5.7	Comparaison entre le rapport des surfaces calculé par DiAbl3D et le modèle analytique.	125
5.8	Évolution d'un système fibre-matrice avec $\frac{k_m}{k_f} = 4$, $Da_m = 4$ et iso-contours de concentration associés.	127
5.9	Champs de concentration initial et final.	128
5.10	Évolution de la réactivité effective k_{eff} en fonction du temps normalisé par la durée τ_K du transitoire en régime réactif, dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.	129
5.11	Comparaison entre le profil stationnaire obtenu par simulation et le profil donné par le modèle 1D pour $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.	129
5.12	Évolution des surfaces de chaque phase ramenées à la surface totale initiale en fonction du temps normalisé par la durée τ_K du transitoire en régime réactif, dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.	130
5.13	Évolution des surfaces de la fibre ramenées à la surface totale initiale avec $\tilde{K} = 4$ et $\phi_f = 0.5$ en fonction du nombre d'itérations pour différents nombre de Damköhler.	131
5.14	Évolution de la réactivité effective k_{eff} en fonction du temps normalisé par la durée $\tau_K (Da_m = 2)$ du transitoire en régime réactif pour différents nombre de Damköhler , dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$.	132
5.15	Réactivité effective stationnaire en fonction du nombre de Damköhler et du contraste \tilde{K} donnée par la simulation numérique et par le modèle 1D (courbes grisées).	132
5.16	Réactivité effective en fonction du nombre de Damköhler et du taux de fibre ϕ_f pour $\tilde{K} = 4$ donnée par la simulation numérique et par le modèle 1D (courbes grisées).	133
5.17	Représentation des flux au-dessus de la paroi hétérogène.	133
5.18	Évolution d'un fil à 45° en régime réactif avec $\tilde{K} = 3$.	135
5.19	Profil stationnaire d'un fil à 45° en régime réactif avec $\tilde{K} = 3$.	136
5.20	Évolution du rapport des surfaces en régime réactif pour différentes morphologies avec $\tilde{K} = 3$ et $\phi_f = 0.75$.	136

5.21	Motif du composite avec les renforts parallèles à la surface.	137
5.22	Réactivité effective moyenne d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité effective d'un composite avec les renforts orthogonaux à la surface dans le cas diffusif ($Da \gg 1$).	138
5.23	Réactivité effective d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité de la matrice dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$	139
5.24	Moyenne courante de la réactivité effective d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité de la matrice dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$	140
5.25	Évolution morphologique d'un composite avec les renforts parallèles à la surface dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$	141
6.1	Cliché MEB d'une baguette ablatée.	148
6.2	Cliché MEB de la zone d'interphase.	148
6.3	Cellule élémentaire représentant le motif périodique de la baguette. .	149
6.4	Coefficient de diffusion effectif dans le cas du 4D de référence.	151
6.5	Domaine des réactivités identifiées par approche inverse pour les critères $k_{eff} \in [2.2, 2.6] m.^{-s}$ et $\Theta \in [25^\circ, 35^\circ]$	154
6.6	Morphologie stationnaire et lignes de courant pour le flux diffusif colorées par $\frac{c}{C_0}$, obtenues pour $k_i = 3.4 m.s^{-1}$ et $k_f = 0.4 m.s^{-1}$ avec $D = 7.8 m^2.s^{-1}$	155
6.7	Comparaison simulation-observation	155
7.1	Modélisation de la matrice poreuse et champ de concentration initial. .	159
7.2	Évolution de la matrice poreuse dans le cas du composite 4D atypique. .	160
7.3	Évolution de la réactivité effective de la matrice du composite 4D atypique.	160
7.4	Champ de concentration simplifié dans le cas de l'étude mésoscopique du composite 4D atypique.	161
7.5	Évolution morphologique du composite 4D atypique $k_b = 2.4 m.s^{-1}$, $k_M = 4.8 m.s^{-1}$, $\Upsilon_b = 6.6 mol.m^{-3}$, $\Upsilon_b = 6.6 10^{-6} m^3.mol^{-1}$ et $\Upsilon_M = 7.9 10^{-6} m^3.mol^{-1}$	162
7.6	Comparaison de la reconstruction de la surface à partir de la simulation 3D représentée figure 7.5 avec l'observation.	162
7.7	Évolution de la réactivité effective du composite 4D atypique.	163
7.8	Tomographie du matériau A.	164
7.9	Tomographie du matériau B	165
7.10	Morphologie initiale du matériau A et morphologie après $0.5 mm$ de recul moyen.	166
7.11	Morphologie initiale du matériau B et morphologie après $0.5 mm$ de recul moyen.	166
7.12	Isosurface $\frac{c}{C_0} = 10^{-3}$ pour le matériau B après $0.5 mm$ de recul pour $T = 1850 K$ (bleu) et $T = 3000 K$ (rouge).	167

A.1	Représentation paramétrique de v et \mathcal{W} avec $h/\mathcal{L} = 2$.	178
A.2	Angle ϑ_0 en fonction de $\frac{h}{\mathcal{L}}$.	179
A.3	Exemple de reconstruction d'une surface évoluée par la méthode de Huygens.	180
A.4	Évolution des différentes singularités.	181
A.5	Évolution d'un profil en arc de cercle avec $\mathcal{L} = h$.	182
A.6	Évolution de la hauteur moyenne d'une surface initialement convexe avec $\mathcal{L} = h$.	183
A.7	Simulation de l'évolution d'un créneau avec $\mathcal{L} = 2$.	184

Liste des tableaux

1.1	Composition à l'équilibre des produits de combustion Borie et al. (1990).	4
1.2	Conditions typiques dans la veine, au niveau du col de la tuyère.	10
1.3	Cinétiques issues de la littérature.	13
1.4	Données thermodynamiques pour les réactions.	15
2.1	Composition des produits de combustion.	44
2.2	Composition du mélange équivalent.	44
3.1	Conditions de calcul pour la comparaison des milieux rugueux et effectifs.	83
5.1	Variations des bornes d'intégration en x en fonction de y	119
7.1	Vitesse de récession moyenne pour un recul moyen de 2 mm.	167
A.1	Classification des singularités et Comportement évolutif.	180

Introduction Générale

Contexte

La propulsion solide est utilisée pour les moteurs-fusées les plus puissants comme les accélérateurs d'Ariane V ou les missiles stratégiques. Durant les dernières décennies le développement des nouvelles générations de propergols solides a conduit à une augmentation constante de la température des gaz de combustion. Celle-ci dépasse maintenant les 3500 K . A de tels niveaux de sollicitation, peu de matériaux conservent leur état solide. A cette température élevée, s'ajoutent des contraintes chimiques par la présence d'espèces oxydantes.

Dans de telles conditions d'utilisation le choix des matériaux s'avère très restreint. Parmi les quelques concurrents restants, les composites thermostructuraux carbone-carbone présentent plusieurs avantages relatifs Borie et al. (1990) :

- Bon rapport tenue mécanique à haute température sur densité ;
- Faible coefficient de dilatation ;
- Industriabilité de pièces de grande taille et de forte épaisseur.

Malgré ces atouts, l'ensemble des contraintes thermo-chimiques entraîne une altération récessive des pièces de col ou *ablation*. Cette récession crée un couplage fort entre l'évolution du solide et l'écoulement des fluides au dessus de lui, ainsi que dans les échanges thermiques entre ces deux milieux.

L'ablation de la paroi intervient à l'échelle de la pièce et vient donc modifier la géométrie de la tuyère elle-même. La récession intervient aussi sur l'état de surface microscopique des pièces de col.

Le principal effet de l'ablation est géométrique. Lors d'un tir, l'ablation provoque une augmentation de la section du col. On a donc une baisse de la poussée par rapport aux performances nominales du propulseur.

Le dimensionnement des pièces dans une optique d'économie de poids est un enjeu majeur en aérospatiale. Ceci nécessite donc la connaissance quantitative des phénomènes ablatifs. Cette approche commence par l'examen du point où l'ablation est la plus critique, c'est-à-dire le col de tuyère. Comme nous l'avons déjà mentionné, l'ablation intervient à différentes échelles et présente des couplages forts entre des milieux différents. Ceci, ajouté au caractère récent des matériaux et des applications, explique les lacunes actuelles sur ce sujet.

Travaux et Outils existants

L'étude de l'ablation a déjà fait l'objet de nombreux travaux. La plupart d'entre eux sont des études militaires et font partie d'une littérature non-ouverte. On expose ici brièvement les outils dont dispose aujourd'hui Snecma Propulsion Solide pour calculer l'ablation des composites C/C en tuyère. On donne ensuite un aperçu des travaux ouverts s'approchant le plus de notre problématique.

Outils et Modèles Snecma Propulsion Solide

Snecma Propulsion Solide est l'entreprise qui conçoit, met au point et fabrique les pièces de col pour les accélérateurs d'Ariane V et les missiles stratégiques français. La problématique de l'ablation des composites C/C fait donc partie des centres d'intérêt majeurs de l'entreprise.

Snecma Propulsion Solide dispose actuellement d'une chaîne complexe de calcul permettant de décrire l'ablation dans les tuyères. Cette chaîne se révèle particulièrement performante dans la description du comportement de nombreux matériaux. Elle repose sur les éléments suivants :

- Un calcul de type fluide parfait au cœur de la veine ;
- Un calcul de couche limite ;
- Un calcul de thermochimie à la paroi fluide-solide.

Ces éléments sont actuellement partiellement découplés. Le résultat de l'ensemble permet ensuite d'effectuer le calcul thermique global de la tuyère.

Le bon fonctionnement de la chaîne repose notamment sur une bonne évaluation des paramètres physico-chimiques du fluide et du solide. Alors qu'elle utilise des modèles très avancés pour la description de la phase fluide, la chaîne actuelle présente des faiblesses dans la description du matériau qui sont dues à plusieurs approximations :

- Il n'y a pas de calcul explicite de l'évolution de la rugosité.
- La réactivité locale du composite n'est fonction que des propriétés macroscopiques du matériau (type d'architecture, densité macroscopique) et non des propriétés micro (fibres, type et épaisseur des dépôts matriciels). Or, le cas de parois réactives non-récessives a déjà fait l'objet de plusieurs études Juhasz and Deen (1991); Wood et al. (2000); Valdes-Parada et al. (2006). Ces travaux montrent que la loi qui associe la réactivité effective aux réactivités intrinsèques est non-linéaire. L'utilisation d'une loi simple comme la moyenne harmonique peut alors conduire à une mauvaise estimation des flux consommés.
- Les réactivités intervenant dans le calcul de la chimie hétérogène sont issues de recalages à partir de tirs expérimentaux. La chaîne de calcul ne permet alors que difficilement de prévoir la résistance à l'ablation d'un matériau très différent d'un matériau déjà tabulé. Ainsi, il est difficile d'anticiper l'impact de l'utilisation de nouvelles fibres dans une architecture connue ou d'une nouvelle architecture à partir de fibres connues.

De plus, les essais permettant d'identifier les réactivités sont de plus en plus difficiles

à réaliser à cause de leur coût mais aussi des contraintes de sécurité qu'ils requièrent.

Études Ouvertes

De nombreuses études portant sur l'ablation se focalisent sur les transferts se déroulant dans la partie fluide, on citera parmi les plus récentes : Kuo and Keswani (1986); Chelliah et al. (1996); Milos and Chen (1997). La description du matériau et de sa réactivité y sont alors plus que sommaires : matériau homogène, isotrope. A l'inverse, les études qui se placent du point de vue du matériau n'offrent aucune description du couplage dynamique fluide/solide : Rodriguez-Mirasol et al. (1995); Luo et al. (2002); Han et al. (1995). Une étude très complète de l'ONERA Borie et al. (1990) dont une partie des résultats est reprise dans Borie et al. (1988) a été conduite durant la décennie 80. Cette étude regroupe de nombreux travaux tant expérimentaux que de modélisation concernant l'ablation. Elle aboutit aux résultats suivants :

- H_2 ne contribue pas de façon significative aux réactions d'ablation (résultat commun avec Kuo and Keswani (1986)).
- L'accroissement de la rugosité d'un composite peut amener à l'accroissement d'un facteur 1,7 du flux de chaleur convectif.
- En fin de tir, le phénomène d'ablation est contrôlé majoritairement, mais non exclusivement, par la diffusion des espèces dans la couche limite. Cela signifie qu'il y a toujours une compétition entre les phénomènes de transport et chimiques à la paroi, en dépit de la haute température de celle-ci.

Cette étude n'a cependant pas permis d'identifier expérimentalement ou par simulation l'impact du caractère hétérogène du composite sur le phénomène ablatif.

Une thèse a été conduite par Talandier (1994) sur l'ablation appliquée aux corps de rentrée atmosphérique. Cette étude visait à la constitution d'un code de calcul pour la conception des protections thermiques d'un véhicule type Hermès. Les différences entre les deux applications, tant au niveau des conditions physico-chimiques que des matériaux étudiés, rendent difficile l'exploitation dans notre étude de ces résultats. Après étude de ces modèles, il apparaît alors qu'une procédure de calcul annexe, permettant de calculer la réactivité apparente du composite ou *réactivité effective* par couplage fluide/solide permettrait d'affiner la conception des cols composites des tuyères.

Objectifs spécifiques de l'étude

Comme nous venons de le voir, des modèles nombreux et complexes offrent déjà une description très complète du comportement de la phase fluide dans la tuyère. Malheureusement la description du matériau et de sa récession y est très sommaire. Le but de notre étude est donc de construire un premier modèle d'ablation où apparaissent les couplages résultant du caractère récessif et hétérogène du composite.

Il faut pour cela mettre sur pied un modèle d'ablation en cohérence avec les caractéristiques des composites C/C et avec la physique rencontrée dans les tuyères. Le modèle étant original, il correspondra initialement à la complexité minimale permettant d'étudier les couplages recherchés. La description de la phase fluide y sera notamment simplifiée. Ce modèle sera ensuite implanté sous forme informatique pour constituer un outil numérique. L'outil que nous cherchons à concevoir devra permettre :

- De décrire les échanges chimiques qui se produisent à la surface des composites en tenant compte :
 1. De l'architecture du composite : paramètres de tissage, disposition des baguettes ;
 2. De la nature des composants élémentaires du composite : type de fibres, taille et mode de dépôt ;
 3. De la modification dynamique de la géométrie et de la température de la surface.
- D'orienter le choix des matériaux en permettant d'évaluer des résistances relatives à l'ablation de plusieurs matériaux.

Présentation du mémoire

L'ablation est un phénomène faisant intervenir de nombreux couplages et échelles. Comme nous le montrerons par la suite, il n'est pas encore possible de traiter l'ensemble des phénomènes et des échelles dans un seul et même modèle. La modélisation passe alors par une approche multi-échelle et le développement de modèles partiels de complexité croissante. Notre but étant de comprendre quels sont les paramètres qui contrôlent l'ablation, nous essayerons autant que faire se peut de développer des modèles analytiques pour le comportement effectif de la surface du composite.

Le développement de ces modèles passe par une étude de la phénoménologie de l'ablation des composites C/C dans les col de tuyères utilisées pour la propulsion solide. Ainsi la première partie de ce mémoire est consacrée à l'étude, d'une part, des phénomènes physico-chimiques qui se déroulent au niveau du col de la tuyère et d'autre part à une description de l'organisation et des propriétés ablatives des composites C/C. L'analyse croisée de ces deux milieux permet de dégager les échelles et les couplages qui caractérisent le phénomène d'ablation. Cette analyse conduit à la construction de plusieurs sous-modèles de surfaces ablatives dont le comportement effectif est étudié par la suite. Le caractère turbulent de la couche limite à l'échelle millimétrique rend très complexe l'étude de cette échelle. Nous nous attacherons alors à l'étude microscopique de l'ablation dans les modèles qui sont développés dans les parties deux et trois, l'échelle supérieure étant abordée dans la troisième partie.

Ainsi, dans une deuxième partie du texte, un premier chapitre est consacré à un premier sous-modèle d'ablation concernant les surfaces non-récessives. Ceci correspond au cas de surfaces où la rugosité n'évolue pas au cours du temps. Dans ce

cas, il nous a été possible de coupler le transport convectif avec le caractère non-uniforme de la paroi. Cette étude débute par la modélisation par prise de moyenne volumique du comportement effectif de surfaces lisses. Les tendances obtenues sont ensuite confirmées par l'étude du cas d'une surface rugueuse non-récessive. Ce cas est l'occasion d'illustrer une méthode de construction d'une surface effective au sens du transfert de masse mais aussi du transfert de quantité de mouvement. Ces études ont permis de montrer le faible impact de la convection sur le comportement effectif de ces surfaces. Ceci justifie l'absence d'écoulement dans l'étude du couplage avec la récession présenté dans les chapitres 4 et 5.

Dans ces chapitres, la vitesse de l'écoulement est alors nulle et la surface est récessive. La paroi du composite évolue, les parties les plus réactives reculant plus rapidement jusqu'à atteindre un équilibre morphologique. La paroi présente alors un faciès qui ne se modifie plus et recule uniformément. Ce modèle plus proche du comportement du matériau durant l'ablation fait l'objet de plusieurs approches. Le cas où les gradients de concentration entre les phases du composite sont absents est tout d'abord abordé. Ce cas permet d'étudier analytiquement le régime transitoire et stationnaire de l'ablation. Des morphologies proches de celles observées sur les matériaux ablatés sont exhibées. Dans le chapitre suivant les gradients surfaciques ne sont plus nuls mais unidimensionnels. Dans ce cas, on démontre l'existence et la morphologie des profils stationnaires rugueux correspondant à une surface homogène ainsi que pour une surface hétérogène. Le cas tridimensionnel fait ensuite l'objet d'une mise en œuvre numérique complète.

Dans une quatrième partie les outils et approches développés sont appliqués au cas des composites C/C. Une estimation des réactivités des composants élémentaire par approche inverse est tout d'abord exposée. L'ablation à l'échelle de l'architecture des composites est abordée par l'exemple d'un matériau mal infiltré. Le comportement en ablation de composites tissés est ensuite illustré à travers la comparaison de deux matériaux d'architectures différentes.

Première partie

Phénoménologie de l'ablation dans
les cols de tuyères C/C
et
Modèles d'ablation

Chapitre 1

Transferts dans la tuyère et composites C/C

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

Notre étude porte sur les couplages qui se déroulent entre la phase fluide et le composite qui forme la paroi de la tuyère. Ce chapitre propose une description du comportement du mélange gazeux qui parcourt la tuyère. On dégage ici les caractéristiques majeures des échelles et des transferts qui se déroulent au niveau du col de la tuyère.

1.1.1 Caractéristiques globales de l'écoulement

La tuyère est la partie terminale du propulseur. Elle relie la chambre de combustion à l'atmosphère. Elle permet l'accélération des produits de combustion du propergol solide et contribue ainsi à la poussée. Bien que la composition et le comportement du fluide soient complexes, des modèles simples permettent de dégager les grandes lois de l'écoulement en tuyère pour la propulsion solide. La tuyère permet la conversion de l'énergie thermique de la combustion en énergie cinétique. La conversion optimale est obtenue lorsque la transformation est assimilable à la détente isentropique du mélange gazeux. Cette transformation est celle qui offre le meilleur rendement thermodynamique puisqu'elle ne comporte aucune dissipation thermique ou visqueuse.

La tuyère est parcourue par un mélange gazeux s'écoulant à grande vitesse. Nous décrivons ici la composition de ce mélange et l'impact de sa vitesse élevée sur les caractéristiques de l'écoulement.

Composition

Le mélange gazeux obtenu en sortie de la chambre de combustion est le siège de réactions en phase homogène entre ces différents composants. Le mélange étant très chaud, nous pouvons faire l'hypothèse que les réactions sont très rapides vis-à-vis de la vitesse macroscopique du gaz. Le mélange obtenu est alors celui correspondant

à l'équilibre chimique local en fonction de la température et de la pression. Une composition type au col de tuyère est donnée par le tableau 1.1 extrait de Borie et al. (1990). Le mélange a une masse molaire moyenne de 18.64 g.mol^{-1} pour une température de 3400 K et une pression $p = 29.3 \text{ atm}$.

Espèces	Fraction molaire	Masse molaire (g/mol)
H_2	31.3	2
CO	23.2	28
HCl	14.7	36.5
H_2O	12.5	18
N_2	8.6	14
H	4.8	1
Cl	1.5	35.5
CO_2	1.2	44

TAB. 1.1 – Composition à l'équilibre des produits de combustion Borie et al. (1990).

Le but de la tuyère est d'offrir la poussée maximale *i.e.* le flux de quantité de mouvement maximal. Pour augmenter la poussée, nous montrerons par la suite qu'il faut augmenter la température des produits de combustion. Pour cela, une certaine proportion d'aluminium est introduite dans le propergol. Celui-ci est transformé par une combustion fortement exothermique en alumine Al_2O_3 . Cette alumine forme un nuage de gouttelettes qui sont emportées par l'écoulement des gaz. La masse de l'alumine liquide représente jusqu'à un tiers de la masse totale expulsée. Dans les tuyères étudiées l'alumine reste au cœur de la veine. Le mélange des gaz et de l'alumine sera traité comme un fluide équivalent.

Turbulence de l'écoulement

Nous nous plaçons au col. Comme nous le verrons, la vitesse est alors de l'ordre de $v \approx 1000 \text{ m.s}^{-1}$. La longueur caractéristique de l'écoulement L est le diamètre du col. Pour la tuyère de l'accélérateur d'Ariane 5, nous avons $L = 0.8 \text{ m}$. Nous obtenons le nombre de Reynolds suivant :

$$Re = \frac{v L}{\nu} = \frac{v_s L \rho_g}{\mu} \approx 3.10^5 \quad (1.1)$$

De cela, nous tirons deux conclusions :

- A l'échelle de la section du col, les effets visqueux sont négligeables par rapport aux effets inertIELS. Le fluide se comporte ainsi globalement comme un fluide parfait.
- Les perturbations tourbillonnaires ne sont plus totalement dissipées par les effets visqueux. L'écoulement devient alors turbulent.

Il existe ainsi dans la tuyère, deux zones dans lesquelles l'écoulement doit être étudié par des outils différents. La première zone correspond au cœur non-visqueux de la

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

veine. La seconde recouvre la zone de proche paroi où se produisent les échanges fluide-solide.

1.1.2 Écoulement au cœur de la tuyère

Dans la veine, le nombre de Reynolds est suffisamment grand pour que les gaz soient assimilés à un gaz parfait simple. Il peut alors être représenté par un écoulement Aubrun (2003) par tranches homogènes. Ainsi, les propriétés du fluide ne dépendent que d'une coordonnée, s , l'abscisse suivant l'axe de la tuyère. Ce modèle permet d'effectuer une étude simple mais riche en informations, de l'écoulement au cœur de la tuyère. On considère ici le régime stationnaire du fonctionnement du moteur-fusée.

L'indice G note les grandeurs se reportant au fluide dans la chambre de combustion. Ces grandeurs sont appelées propriétés génératrices de l'écoulement Chassaing (2000).

Variation de la section de veine

Sous les hypothèses formulées plus haut, la continuité du fluide est décrite par l'équation suivante Chassaing (2000) :

$$\frac{d\rho_g}{\rho_g} + \frac{dv}{v} + \frac{dS_v}{S_v} = 0 \quad (1.2)$$

où ρ_g, v, S_v sont respectivement la masse volumique du gaz, la vitesse du fluide et la section de la veine à l'abscisse s de la tuyère. Si on assimile la transformation du mélange à la détente isentropique d'un gaz parfait, la conservation de la quantité de mouvement, amène à :

$$\frac{dS_v}{S_v} = (Ma^2 - 1) \frac{dv}{v} \quad (1.3)$$

où Ma est le nombre de Mach défini par $Ma = \frac{v}{v_s} = v \sqrt{\frac{\rho_g}{\gamma_g p}}$. L'équation 1.3 se réfère à la section du tube de courant de l'écoulement. Ainsi, pour ne pas provoquer de frottements ou de décollement de la veine, la section de la tuyère doit se confondre parfaitement avec celle du tube de courant désiré. Ces deux sections seront donc confondues dans la suite de cette partie.

Par ailleurs, en utilisant la conservation de l'enthalpie totale on obtient :

$$\frac{v^2}{v_{s,G}^2} = \frac{1}{\frac{\gamma_g - 1}{2} + \frac{1}{Ma^2}} \quad (1.4)$$

dont le graphe est donné en figure 1.1. Pour notre écoulement la vitesse et le nombre de Mach évoluent dans le même sens.

Remarque : La vitesse maximale théorique est obtenue lorsque la gaz en sortie est infiniment froid. En utilisant la conservation de l'enthalpie entre la chambre de combustion à vitesse nulle et la sortie à température nulle, on a alors $v_{max} = \sqrt{2C_p T_G} = \sqrt{\frac{2}{\gamma_g - 1}} v_{s,G}$. On comprend donc l'intérêt d'augmenter la température de combustion des propergols.

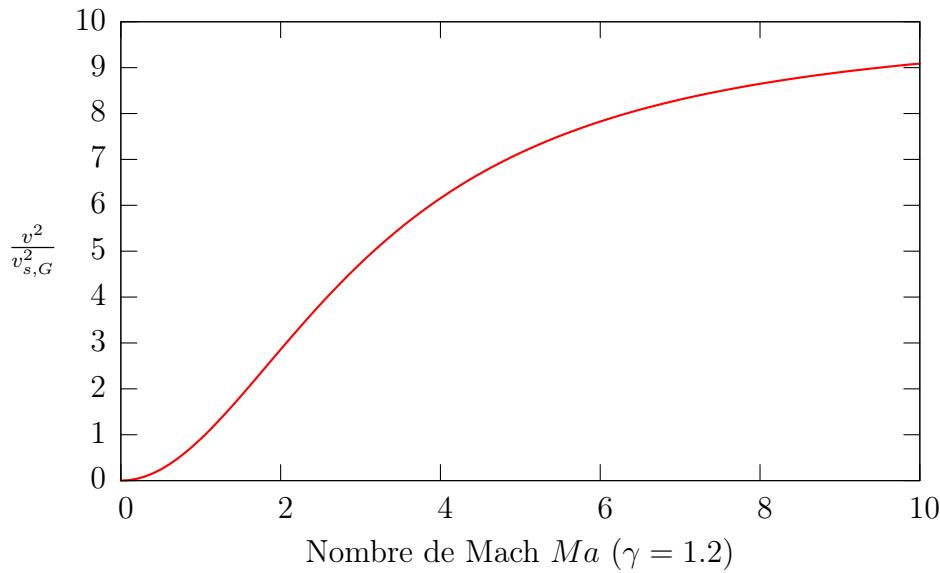


FIG. 1.1 – Evolution de la vitesse en fonction du nombre de Mach.

Régimes d'écoulement

Le but de la tuyère est d'accélérer les gaz issus de la combustion soit $\frac{dv}{v} > 0$ pour tout s . Voici comment se décompose cette accélération.

Convergent : Dans la chambre de combustion, nous avons : $v \approx 0$ et donc $Ma \approx 0$. L'équation de continuité impose $S_v \rightarrow \infty$. La paroi initiale de la tuyère est donc orthogonale à l'axe. Nous avons ainsi initialement $Ma^2 - 1 < 0$. La relation 1.3 impose alors $dS_v < 0$. La tuyère présente alors une partie convergente.

Col : Dans la partie convergente, Ma augmente. Le calcul de dv à partir de l'équation 1.3 montre une singularité pour un nombre de Mach égal à un. Par ailleurs, on souhaite toujours avoir $dv > 0$. Il faut donc $dS_v = 0$. La tuyère présente donc un col, minimum de section, où l'écoulement est sonique.

Divergent : Au col, nous avons $Ma = 1$ et $dv > 0$. Au delà du col, nous avons donc $Ma > 1$. L'accélération se poursuivant, la relation 1.3 impose alors $dS_v > 0$.

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

La tuyère présente alors une partie divergente où l'écoulement est supersonique¹. L'ensemble des régimes est représenté schématiquement sur la figure 1.2. Une tuyère fonctionnant suivant les principes énoncés ici est appelée *tuyère de Laval*.

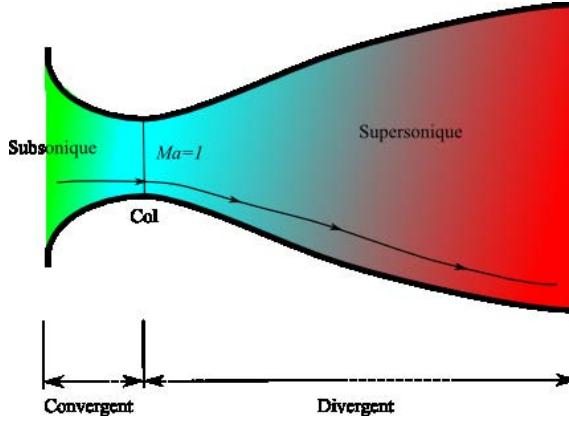


FIG. 1.2 – Régimes d'écoulement le long de l'axe de la tuyère.

Propriétés du fluide le long de la tuyère et valeurs au col

Si on considère la conservation de l'enthalpie du fluide, on obtient l'évolution de la température en fonction du nombre de Mach soit Chassaing (2000) :

$$\frac{T}{T_G} = \left(1 + \frac{\gamma_g - 1}{2} Ma^2\right)^{-1} \quad (1.5)$$

En utilisant la loi des gaz parfaits et la loi d'isentropicité, on obtient :

$$\frac{\rho_g}{\rho_{g,G}} = \left(1 + \frac{\gamma_g - 1}{2} Ma^2\right)^{\frac{-1}{\gamma_g - 1}} \quad (1.6)$$

$$\frac{p}{p_G} = \left(1 + \frac{\gamma_g - 1}{2} Ma^2\right)^{\frac{-\gamma_g}{\gamma_g - 1}} \quad (1.7)$$

Le graphe de ces fonctions est donné par la figure 1.3.

Nous pouvons ainsi calculer les propriétés du fluide au col ($Ma = 1$). Nous obtenons :

$$\begin{cases} T_{col} &= 0.91 T_G \\ \rho_{col} &= 0.62 \rho_G \\ p_{col} &= 0.57 p_G \end{cases} \quad (1.8)$$

Les considérations que nous avons faites jusqu'ici étaient basées sur une transformation idéale d'un gaz idéal. Des valeurs typiques des propriétés dans la veine au niveau du col sont données tableau 1.2. Dans cette partie, nous avons étudié le cœur de la veine avec un modèle de gaz parfait. Nous avons vu qu'il évolue alors de façon découpée des caractéristiques de la paroi.

¹En écoulement supersonique la vitesse de groupe est supérieure à la vitesse de phase. L'information ne peut alors pas remonter l'écoulement. Dans le divergent, le comportement du fluide est découpé des conditions en-deçà du col.

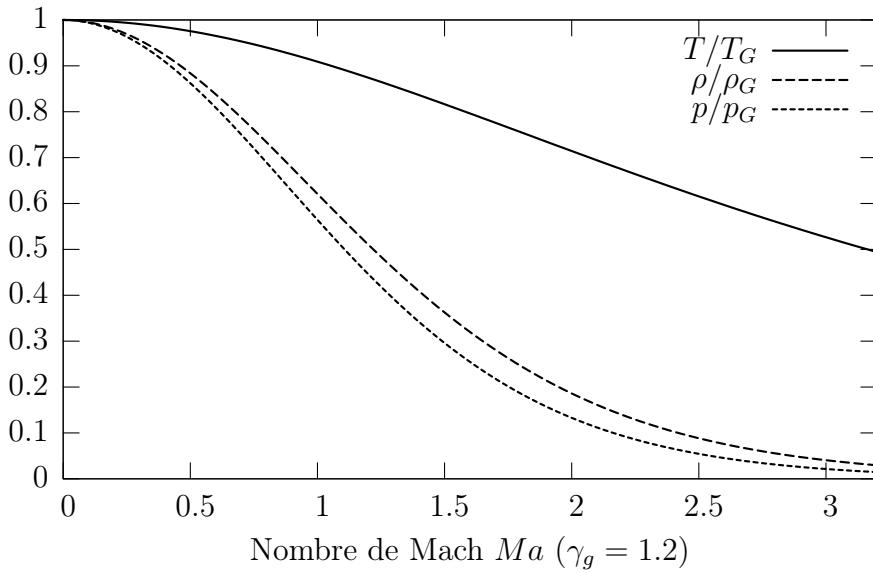


FIG. 1.3 – Evolution des propriétés du gaz en fonction du nombre de Mach.

1.1.3 Transferts pariétaux

Proche de la paroi, la vitesse décroît, le comportement du fluide est complexe et est le siège d'échanges entre le fluide et le composite. Nous étudions ici les caractéristiques des échanges de quantité de mouvement, de masse et de chaleur.

Quantité de mouvement

Le mélange des produits de combustion est visqueux ($\mu = 10^{-4} \text{ Pa.s}$). Sa vitesse à la paroi est donc nulle. Il existe ainsi une zone proche de la paroi où la vitesse de l'écoulement est trop faible pour rendre les effets visqueux totalement négligeables. Dans cette *couche limite* les gradients sont importants. La couche limite de vitesse est définie par convention Chassaing (2000) comme le lieu des points où la vitesse est inférieure à 99 % de la vitesse attribuée au cœur de la veine à la même abscisse.

Pour illustrer notre cas, des résultats de calcul CLICApoix (1999) sont présentés figure 1.4. Ces calculs illustrent le profil de vitesse tangentielle moyenne proche de la paroi. La rugosité conduisant à la vitesse donnée figure 1.4, correspond à la rugosité maximale rencontrée dans les tuyères. Les conditions correspondant aux différents calculs sont données par le tableau 1.2. Ces paramètres sont des valeurs représentatives des conditions typiquement rencontrées dans les applications considérées. Il faut noter que le code CLIC a pour vocation le calcul de l'écoulement à l'échelle de la couche limite. Dans le cas d'une surface rugueuse, les valeurs qu'il fournit pour $y < 10 \mu\text{m}$ sont des artifices de calcul. Leur analyse physique doit donc être faite avec précaution.

La figure 1.4 donne une épaisseur de couche limite de vitesse de l'ordre de 2 mm. Sur la figure 1.5, les mêmes champs de vitesse sont représentés avec une échelle

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

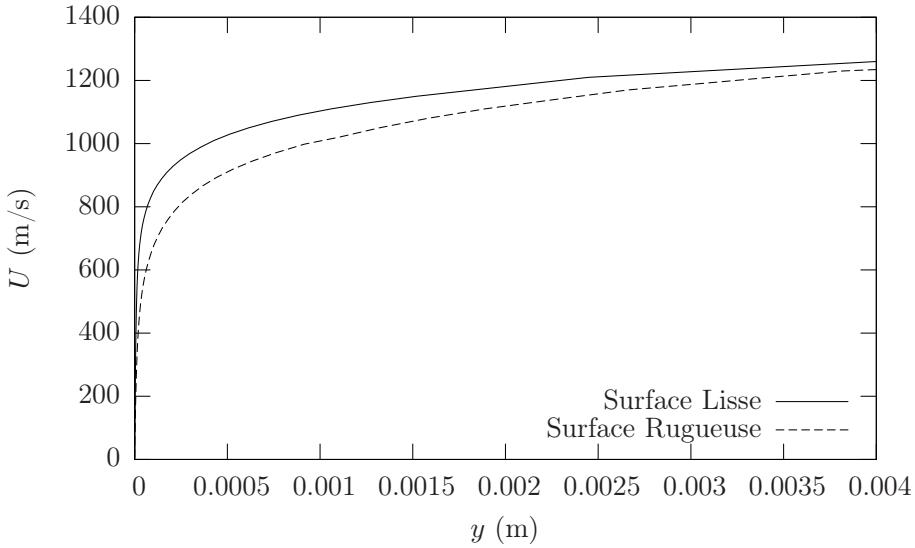


FIG. 1.4 – Distribution de la vitesse moyenne dans le sens de l’écoulement dans la couche limite pour des parois lisse et rugueuse (Calcul CLIC Aupoix (1999))

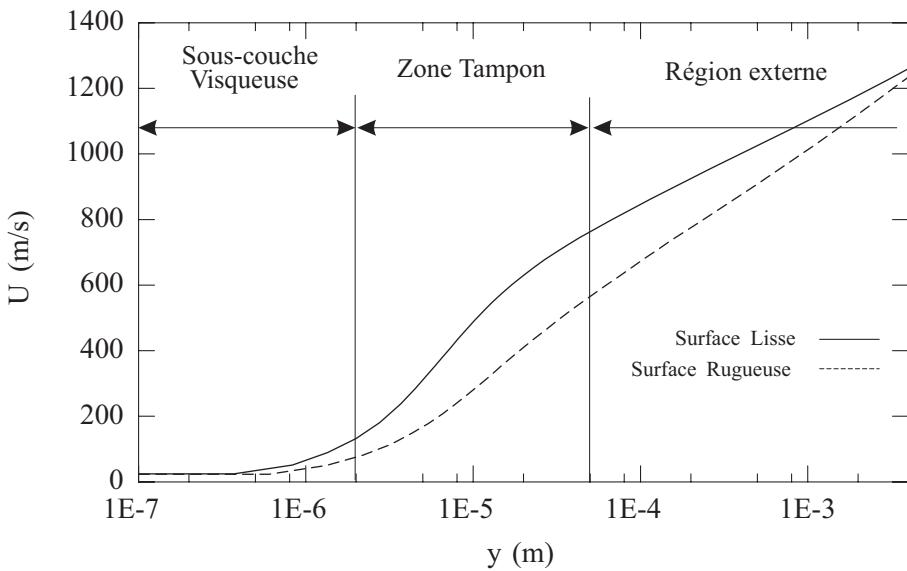


FIG. 1.5 – Limites des domaines visqueux et turbulent (même calcul que figure 1.4)

logarithmique. On constate que pour $y < 10^{-5}$, il existe une zone où les effets visqueux redeviennent comparables aux effets inertIELS. On parle alors de sous-couche visqueuse. Sur cette même figure, on vérifie que le profil de vitesse est logarithmique pour $y > 0.1 \text{ mm}$. Ce profil est donné par un coefficient de transport linéaire. Dans le cas turbulent, les modèles font intervenir une viscosité turbulente qui traduit les effets des tourbillons. On vérifie sur la figure 1.6 que le profil de viscosité turbulente est linéaire. On voit la croissance du coefficient turbulent est rapide et que pour $y \approx 50 \mu\text{m}$, on a déjà $\mu^{(t)} = 10 \mu$.

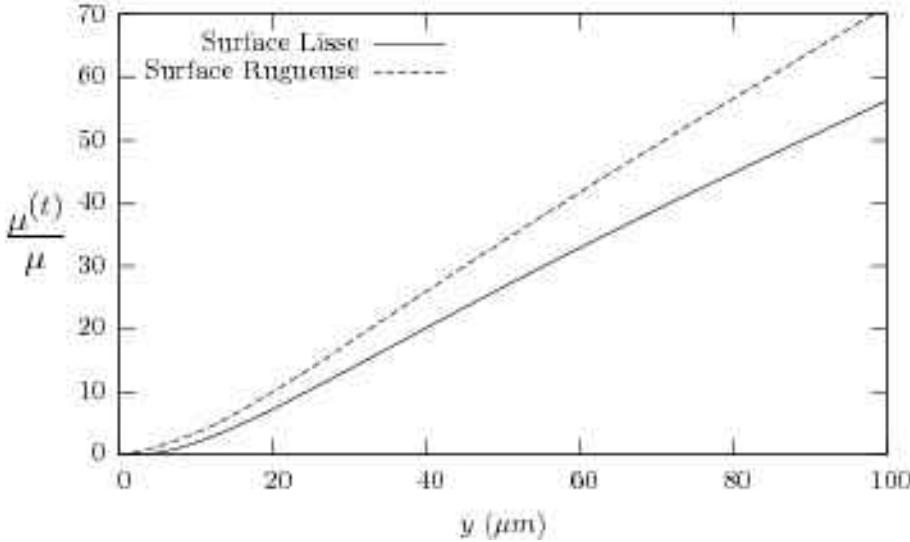


FIG. 1.6 – Distribution de la viscosité turbulente proche de la paroi

Grandeur	Mesure	Unité
T	3424	K
p	4.63	MPa
ρ_g	4.93	$kg.m^{-3}$
M	30.1	$g.mol^{-1}$
v	1030	$m.s^{-1}$
μ	$0.925 \cdot 10^{-4}$	$Pa.s$
C_p	1987	$J.kg^{-1}.K^{-1}$

TAB. 1.2 – Conditions typiques dans la veine, au niveau du col de la tuyère.

Nous faisons l'hypothèse que le fluide équivalent est newtonien. Dans le cas lisse présenté figure 1.4, le cisaillement à la paroi est :

$$\tau_p = \mu \partial_y v = 12 \text{ kPa} \quad (1.9)$$

Cette contrainte est très faible, en comparaison à la contrainte à rupture des matériaux considérés. L'érosion mécanique de la paroi ne se produit que lorsque la paroi présente déjà des aspérités. Un fort gradient de pression apparaît entre l'amont et l'aval de la rugosité. Des contraintes apparaissent dans la protubérance et cause une rupture locale du matériau. L'érosion est alors responsable d'une partie de la perte de masse du matériau. Cependant, un tel mécanisme d'érosion purement mécanique ne semble pas pouvoir être à l'origine de cette rugosité. De plus, dans les tuyères considérées, les impacts d'alumine sur la paroi sont faibles. En nous appuyant sur ces deux constats, nous choisissons de négliger les effets mécaniques sur la perte de masse.

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

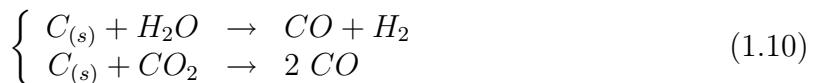
Transfert de masse

La paroi est le siège de plusieurs réactions qui amènent à la gazéification du solide. L'identification des cinétiques et des mécanismes d'oxydation n'était pas un des objectifs de cette étude. Les données utilisées sont donc issues des travaux déjà réalisés sur le sujet. A l'échelle supérieure du matériau les études sont nombreuses, on citera notamment : Cairo et al. (2003); Chen et al. (1999); Gao et al. (2004); Glime and Cawley (1995); Han et al. (1995); Jacobson et al. (1999); Jiqiao et al. (2002); Luo et al. (2002); Nagle and Strickland-Constable (1962); Vix-Guterl et al. (2003). Une attention sera portée plus particulièrement sur les études portant sur l'oxydation en tuyère : Golovina (1980); Borie et al. (1990); Kuo and Keswani (1986); Chelliah et al. (1996); Milos and Chen (1997). Ces études permettent dans un premier temps d'identifier les espèces responsables de la gazéification du carbone dans les tuyères. Elles fournissent de plus des jeux de vitesse de recul en fonction de la pression partielle en oxydant qui nous permettent d'obtenir les cinétiques des réactions.

Il y a un accord important Borie et al. (1990); Kuo and Keswani (1986); Milos and Chen (1997) sur les hypothèses selon lesquelles :

- La perte de masse est très majoritairement due à l'oxydation du carbone par H_2O et CO_2 ;
- L'érosion mécanique par l'impact d'alumine est négligeable dans les tuyères modernes.
- La sublimation du carbone est, elle aussi, négligeable. La température atteinte par le matériau n'est pas suffisante pour les pressions considérées.

La perte de masse obéit donc aux deux bilans réactionnels hétérogènes suivants :



De plus, pour une majorité d'auteurs depuis Libby and Blake (1981), les cinétiques de ces deux réactions sont considérées égales. Sous cette hypothèse, comme la concentration en vapeur d'eau dans la veine est dix fois celle en dioxyde de carbone, on a une perte de masse causée en grande majorité par H_2O . La mesure des cinétiques de réaction à haute température est un exercice délicat. La difficulté globale du processus est la conjugaison de plusieurs étapes nécessaires mais difficiles à atteindre :

1. L'obtention d'une paroi thermiquement homogène pour des températures supérieures à 2500 K ;
2. La mesure de cette température ;
3. La mesure de la pression partielle en oxydant à la surface du matériau ;
4. La mesure de la perte de masse du matériau ;
5. La connaissance de la surface du matériau.

Il s'ajoute à cela le caractère exponentiel des lois cinétiques qui rend d'autant plus imprécises les conclusions tirées des mesures. De plus, il est bon de remarquer que les matériaux testés ne sont jamais les mêmes entre deux études.

Les jeux de cinétiques les plus récents et les plus pertinents vis-à-vis du contexte sont comparé dans le tableau 1.3. L'étude de Libby and Blake (1981) porte sur des particules de carbone, celles de Chelliah et al. (1996) et Golovina (1980) portent sur des graphites. L'étude de Borie et al. (1990) porte sur du 4D Snecma Propulsion Solide oxydé en tuyère.

Alors que Libby and Blake (1981); Golovina (1980); Chelliah et al. (1996) se placent en régime limité par la réaction pour déterminer les cinétiques, Borie et al. (1990) se place dans un régime mixte diffusion/réaction. Dans ce cas la concentration en oxydant à la paroi doit être déterminée. Deux dépouillements sont possibles, soit à couche limite figée en composition, soit à couche limite à l'équilibre termochimique. Les lois proposées par Libby and Blake (1981), Golovina (1980) et Chelliah et al. (1996) portent sur des matériaux simples alors que celles proposées par Borie et al. (1990) se réfèrent à l'échelle macroscopique d'un composite. Comme nous le montrerons par la suite, une telle loi résulte d'un double changement d'échelle à partir des propriétés microscopiques du matériau.

Tous les auteurs proposent des lois de type Arrhenius pour la vitesse de recul de la paroi V_a . La loi proposée par Chelliah et al. (1996) ressort du lot par deux aspects :

1. Les cinétiques proposées pour chaque réaction sont différentes ;
2. L'ordre des réactions est 1/2. Cet ordre fractionnaire qui n'apparaît qu'ici, peut être dû à des limitations diffusives. La limitation par la réaction n'est alors pas atteinte et la concentration pariétale diminue d'autant que la température augmente. Nous ne retenons donc pas ce modèle fractionnaire et nous prenons $a = 1$.

Afin de pouvoir comparer les différentes lois expérimentales, on les réécrit sous un formalisme unique :

$$V_a = \frac{A}{\rho_s} p_{ox}^a e^{-E_a/\mathcal{R}T_s} \quad (1.11)$$

Nous comparons les différentes cinétiques de recul sur le graphe 1.7². On note qu'entre 2000 et 3000 K, les lois couvrent deux ordres de grandeur. De plus, il est bon de remarquer que sur l'ensemble du domaine, à une température donnée, le rapport entre le maximum et le minimum de vitesse ne dépasse pas 50. Ceci est relativement satisfaisant compte tenu des remarques énoncées plus haut et même étonnant lorsque l'on note que dans une même étude (Borie et al., 1990) les incertitudes de mesures sur la vitesse de recul sont de l'ordre de 200 %. La méconnaissance des réactivités associées aux matériaux justifie le fait, qu'industriellement, elles sont obtenues par recalage à partir des vitesses de recul mesurées.

On introduit la réactivité k du matériau telle que localement :

$$V_a = \Upsilon_s k c_i \quad (1.12)$$

²On prend $p_{ox} = 1 \text{ atm}$ qui est l'ordre de grandeur de la pression utilisée dans les études comparées ici. Ceci permet de s'affranchir de l'ordre de la réaction.

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

Source	$A (kg.m^{-2}s^{-1}atm^{-a})$	a	$E_a (kcal/mol)$
Borie et al. (1990) CL Fig.	$4.25 - 4.48 \cdot 10^6$	1	20.07
Borie et al. (1990) CL Eq.	$2.12 - 2.23 \cdot 10^6$	1	18.52
Chelliah et al. (1996) H_2O	$4.8 \cdot 10^5$	0.5	68.8
Chelliah et al. (1996) CO_2	$9.0 \cdot 10^5$	0.5	68.1
Libby and Blake (1981)	$2.43 \cdot 10^3$	1	41.9
Golovina (1980)	158	1	40

TAB. 1.3 – Cinétiques issues de la littérature.

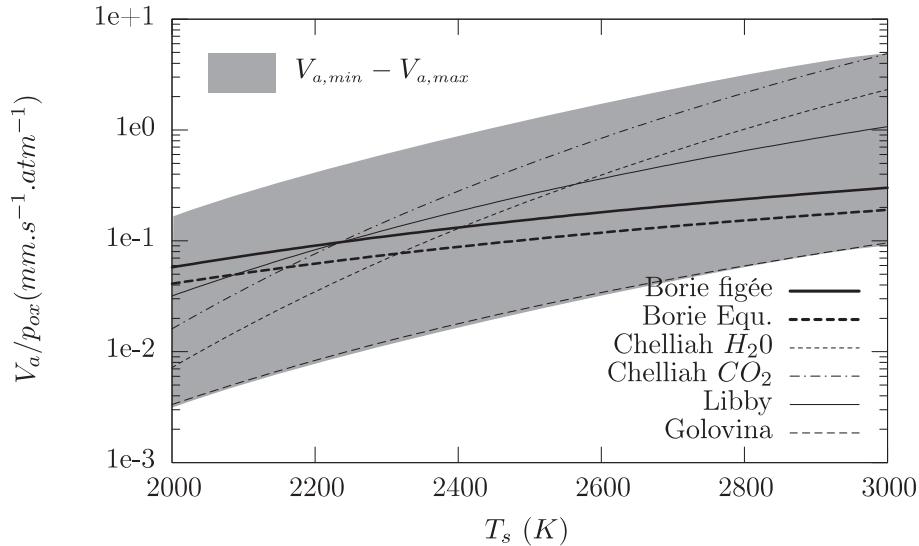


FIG. 1.7 – Lois proposées dans la littérature pour la vitesse de récession du carbone et domaine modèle.

avec Υ_s le volume molaire du solide. D'après la loi donnée au tableau 1.3, k s'identifie à :

$$k = \frac{A \mathcal{R}}{M_c} T_s e^{-E_a/\mathcal{R} T_s} \quad (1.13)$$

où M_c est la masse molaire du solide. Dans notre cas, $M_c = 12 \text{ g.mol}^{-1}$ est la masse molaire du carbone. On choisit d'écrire la réactivité de nos matériaux sous la forme :

$$k = K_s T_s e^{-E_a/RT_s} \quad (1.14)$$

On recherche alors, à partir des données bibliographiques, des bornes pour la réactivité du composite. Entre plusieurs types de carbones, le mécanisme réactionnel reste identique. L'énergie d'activation doit donc rester constante. Les différents carbones seront donc distingués par un coefficient K_s différent mais auront une même énergie d'activation. Le choix de K_s entre 1 et $50 \text{ m.s}^{-1}.K^{-1}$ et $E_a = 40 \text{ kcal/mol}$

permet d'obtenir une loi cinétique qui couvre bien l'espace défini sur le graphe 1.7. On peut alors en déduire les bornes globales pour k :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_{min}(2000 K) = 1 T_s \exp(-E_a/\mathcal{R}T_s) = 8.45 10^{-2} m.s^{-1} \\ k_{max}(3000 K) = 50 T_s \exp(-E_a/\mathcal{R}T_s) = 182 m.s^{-1} \end{array} \right. \quad (1.15)$$

On peut aussi définir les vitesses de récession associées, $V_{a,min}$, $V_{a,max}$. On fait figurer le domaine compris entre ces deux lois sur la figure 1.7.

L'ablation correspond à la consommation par une réaction hétérogène d'une partie de la pièce de col. Afin d'estimer les flux échangé sans connaître les concentrations pariétales, nous utilisons une mesure expérimentale de la vitesse de récession. Pour un composite C/C utilisé en col de tuyère dans les conditions précédentes, l'étude conduite par *Borie et al.* Borie et al. (1990) donne une vitesse de récession égale à :

$$V_{a,exp} = 0.3 \text{ mm/s} \quad (1.16)$$

La densité macroscopique du composite est $\rho_s = 1850 \text{ kg.m}^{-3}$ Borie et al. (1990). On en déduit le flux massique de carbone injecté dans la tuyère depuis la paroi :

$$j_{m,C} = \rho_s \cdot V_{a,exp} = 5.55 10^{-2} \text{ kg.m}^{-2}.s^{-1} \quad (1.17)$$

Si nous représentons la tuyère par un cylindre de rayon L et de longueur $L = 0.8 \text{ m}$, le débit massique injectée depuis la paroi vers la veine est :

$$\mathcal{D}_{m,i} = 2\pi L^2 J_{m,C} = 0.28 \text{ kg.s}^{-1} \quad (1.18)$$

Le débit des gaz de combustion dans la veine est lui :

$$\mathcal{D}_{m,g} = \rho_g \cdot v \cdot \pi \frac{L^2}{4} \approx 2500 \text{ kg.s}^{-1} \quad (1.19)$$

La réaction pariétale n'influe donc pas sur la masse globale transportée. Il faut cependant vérifier que cela reste vrai au niveau de chacune des espèces concernées par l'ablation. Si on considère, en première approximation, que l'ablation est décrite uniquement par l'oxydation du carbone par la vapeur d'eau pour former du monoxyde de carbone et du dihydrogène, on obtient les débits pariétaux suivants :

$$Q_{CO,i} = Q_{H_2,i} = -Q_{H_2O,i} = 24 \text{ mol.s}^{-1} \quad (1.20)$$

Ces débits sont à comparer à ceux qui traversent notre cylindre modèle. A partir de 1.19 et 1.1, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_{H_2O,g} = 42 10^3 \text{ mol.s}^{-1} \\ Q_{H_2,g} = 31 10^3 \text{ mol.s}^{-1} \\ Q_{CO,g} = 17 10^3 \text{ mol.s}^{-1} \end{array} \right. \quad (1.21)$$

Nous pouvons donc conclure que la réaction qui se produit à la surface n'influence pas la composition du fluide hors de la couche limite. Il n'y a pas d'appauvrissement en vapeur d'eau le long du col de la tuyère.

1.1 Écoulement et transferts en tuyère

Oxydant	$\Delta_r H_{298.15\text{ K}} (\text{kJ/mol})$	$\Delta_r G_{1200\text{ K}} (\text{kJ/mol})$
H_2O	133.80	-36.28
CO_2	172.42	-39.41

TAB. 1.4 – Données thermodynamiques pour les réactions.

Transfert de chaleur

Comme nous l'avons déjà dit, le mélange gazeux est un milieu très chaud. Nous considérons désormais les caractéristiques majeures des transferts thermiques qui se déroulent à la paroi et dans la couche limite.

Le champ de température correspondant au champ de vitesse présenté figure 1.4 est donné figure 1.8. On voit que le profil de température est plus complexe que celui de vitesse car le cisaillement lui-même est une source thermique. On remarque surtout que dans les cas lisses et rugueux, la température reste très uniforme avec $T \approx T_s \approx 3000\text{ K}$. La paroi du composite n'agit donc pas de façon remarquable comme un puits ou comme une source de température. Ceci correspond au fait que comme nous le verrons, l'énergie consommée par l'ablation est faible par rapport à celle transportée par le fluide.

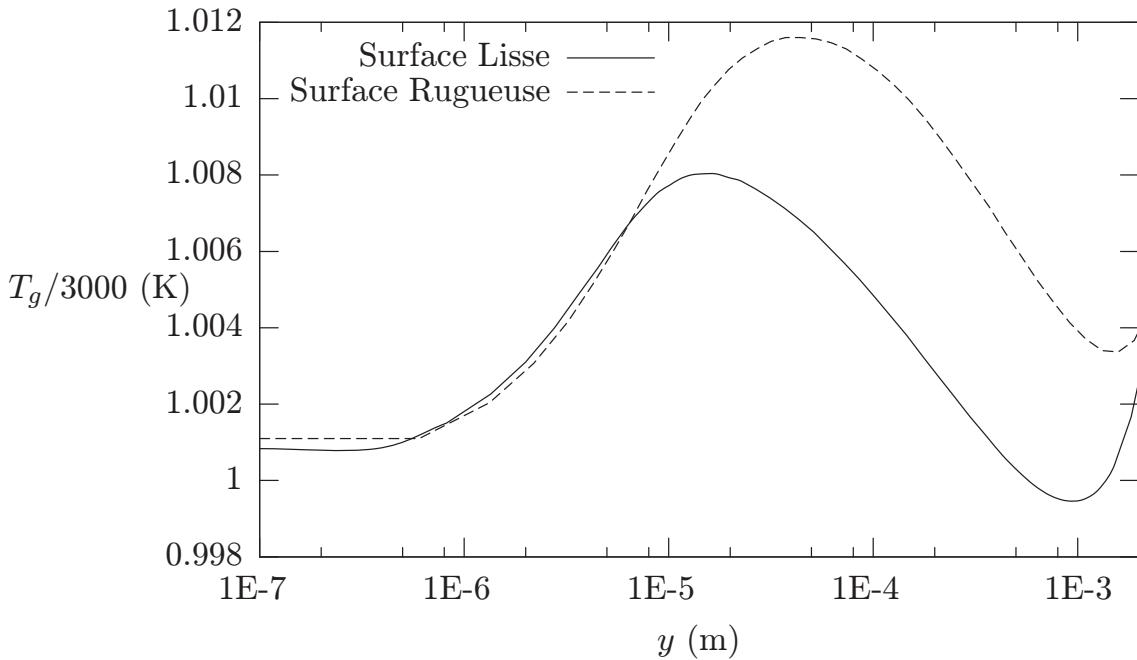


FIG. 1.8 – Distribution de la température moyenne dans la couche limite au niveau du col en fonction de la distance à la paroi.

Pour les deux réactions données plus haut, les données thermodynamiques sont résumées dans le tableau 1.4. Les variations d'énergie libre sont négatives. Les réactions sont donc bien spontanées. La thermodynamique donne :

$$\Delta_r H(T) = \Delta_r H^\circ + \int_{T^\circ}^T C'_p - C_p dT \quad (1.22)$$

avec C_p la capacité calorifique des réactifs et C'_p celle des produits gazeux. En utilisant les tables thermodynamiques Chase (1998), on peut calculer $\Delta_r H_{H_2O}$ et $\Delta_r H_{CO_2}$. La figure 1.9 nous permet de vérifier que les deux chaleurs de réactions sont positives jusqu'à 3000 K. Les réactions sont donc endothermiques.

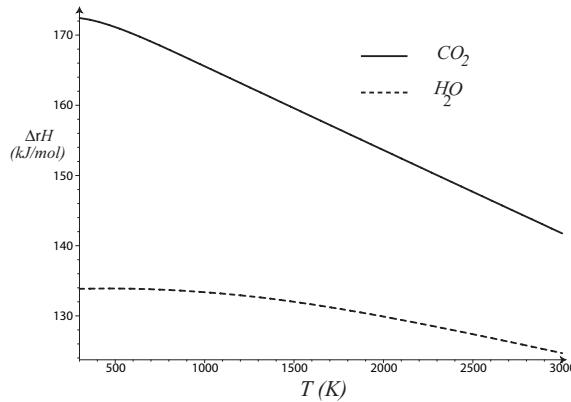


FIG. 1.9 – Enthalpies des réactions d'oxydation en fonction de la température.

Les réactions sont donc des puits de chaleur. En supposant à nouveau que seule la vapeur d'eau intervient dans l'ablation, le flux consommé est :

$$q_A = \frac{\delta_r H \cdot Q_{H_2O,i}}{2\pi L^2} \approx 715 \text{ kW.m}^{-2} \quad (1.23)$$

Borie et al. (1990) donne une densité de flux reçu $q_r \approx 8 \text{ MW.m}^{-2}$ au niveau du col. L'effet de l'ablation sur le transport thermique est donc faible.

Dans cette première partie, notre étude s'est portée sur la description des phénomènes qui se déroulent dans la phase fluide. On a pu observer que l'écoulement dans la tuyère se fait à grand nombre de Reynolds ($Re > 10^5$). Ceci a deux conséquences sur le comportement du fluide :

- A l'échelle de la tuyère, le comportement du fluide est non-visqueux et peut être décrit par la détente isentropique d'un gaz parfait.
- Proche de la paroi, il existe une couche limite turbulente d'épaisseur millimétrique. C'est dans ce milieu que se déroulent les transferts de masse, de chaleur et de quantité de mouvement.

De l'étude des transferts pariétaux, on retiendra plus particulièrement que :

- L'étude des transferts thermiques a montré que les gradients de température dans la couche limite sont faibles et ne jouent pas un rôle significatif sur l'ablation à l'échelle de la couche limite.
- L'étude du taux de cisaillement a montré que les contraintes subies par le matériau ne permettent pas de créer une rugosité à partir d'une paroi lisse.

- L'étude du transfert de masse a permis de dégager les mécanismes responsables de la perte de masse. On a identifié H_2O et CO_2 comme les réactifs et CO et H_2 comme les produits du processus ablatif. L'étude des cinétiques fournies par la littérature, a permis d'identifier la forme de la loi cinétique $k = K_s \exp\left(-\frac{E_a}{RT_s}\right)$ et d'estimer que $K_s \approx 1 - 50 \text{ m.s}^{-1}.K^{-1}$ et $E_a \approx 40 \text{ kcal.mol}^{-1}$. Enfin en nous appuyant sur la vitesse de recul expérimentale donnée par Borie et al. (1990), il a été possible de montrer que la réaction pariétale n'influe pas sur le débit et la composition du mélange gazeux à l'échelle du col.

Dans cette partie, nous avons traité la paroi composite comme une surface uniforme. Comme nous allons le voir à présent les composites C/C sont des milieux hétérogènes à plusieurs échelles.

1.2 Composites C/C Ablatifs

Les composites carbone/carbone sont des matériaux de la famille des composites à matrice céramique. Aux impuretés près, le carbone est le seul élément présent dans chacune des phases qui forment ces matériaux. Nous ne traitons pas ici le cas des composites ex-C/résine dont l'ablation fait intervenir un certain nombre de phénomènes physico-chimiques différents.

Les composites C/C offrent des qualités de bonne tenue mécanique jusqu'à plus de 2000°C. Ils sont donc employés en tant que disques de freins aéronautiques, protection thermique pour les corps de rentrée ainsi que dans les veines de moteurs-fusées pour la pièce de col.

Dans la partie précédente, la paroi a été traitée comme étant uniforme. Dans cette partie nous montrerons les structures carbonées qui apparaissent dans les composites C/C et quelles sont les causes de leurs différences de réactivités. Enfin, en nous appuyant sur l'observation de pièces de col ablatées en tuyère, nous cherchons à dégager, l'impact de ces non-uniformités sur le comportement ablatif du composite.

1.2.1 Organisation Multi-échelle du carbone

Dans cette partie, une description des différentes échelles du matériau est donnée depuis l'échelle atomique, celle des composants élémentaires jusqu'à l'architecture du composite lui-même. Les plus grandes échelles sont représentées figure 1.10. Les composites C/C sont constitués de plusieurs formes de carbone. Ces carbones diffèrent par leur organisation à l'échelle atomique, cristalline et micrométrique. Chacune de ces échelles va apporter une variabilité dans la réactivité locale du composite. Nous proposons ici de remonter les échelles en observant les différentes organisations du composite et l'impact de cette organisation sur la réactivité locale.

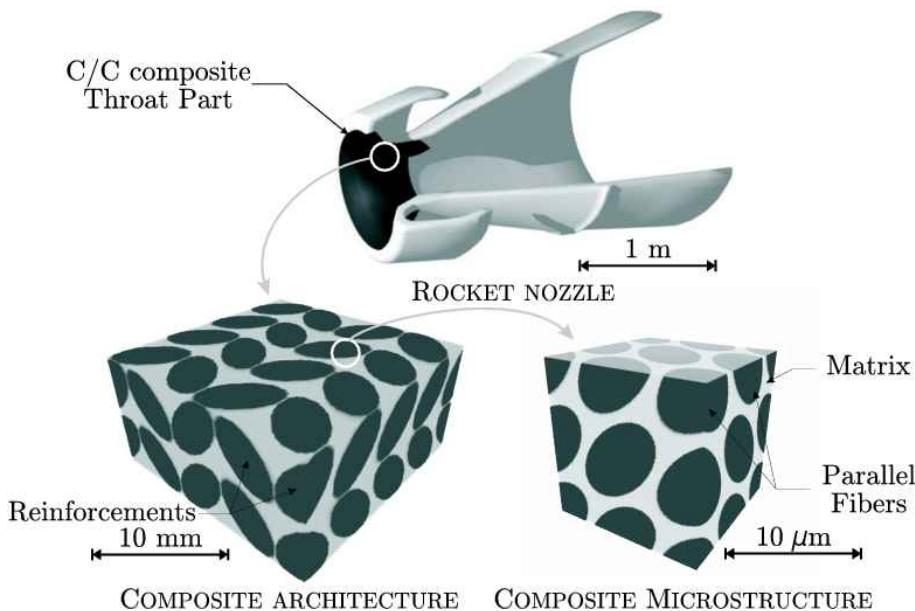


FIG. 1.10 – Échelles structurales du matériau composite.

Structure et réactivités des carbones à l'échelle cristalline

La structure électronique du carbone est $1s^22s^22p^2$. Il forme trois types de liaisons : sp , sp^2 , sp^3 ³ Bonnetain and Hoynant (1965). Les deux formes les plus usuelles de cristallisation du carbone sont le diamant (hybridation sp^3) et le graphite (hybridation sp^2). Aux températures et pressions usuelles, le graphite est la seule forme stable, le diamant étant métastable. Le graphite est formé de plans parallèles d'atomes de carbone comme illustré en figure 1.11. Les atomes forment des hexagones réguliers qui mettent en commun tous leurs sommets et arêtes.

La longueur du côté de l'hexagone élémentaire est 142 pm. La distance entre deux feuillets est $d_{002} = 335$ pm. La masse volumique ainsi obtenue pour le cristal est de $2.26 \cdot 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$.

Cette structure du graphite est une structure parfaitement régulière. Les carbones utilisés dans les composites C/C possèdent une structure proche de celle-ci, dite turbostratique.

La structure turbostratique est identique à celle du graphite à l'échelle des premiers voisins de chaque atome. Elle présente cependant un certain nombre de défauts qui déstabilisent l'ordre cristallin à l'intérieur d'un plan (dit plan de graphène) mais aussi entre les plans comme illustré en figure 1.12. Les défauts sont des lacunes atomiques et des rotations. Il en résulte une augmentation de la distance entre les plans. La densité du carbone turbostratique est donc inférieure à celle du graphite (Sauder, 2001).

L'un des points faibles des matériaux à base de carbone provient de leur oxy-

³On peut aussi mentionner le carbone sous forme de fullérènes C_{60} ou de nanotube. Ces deux formes sont moins présentes (pour le moment) dans les applications industrielles du carbone.

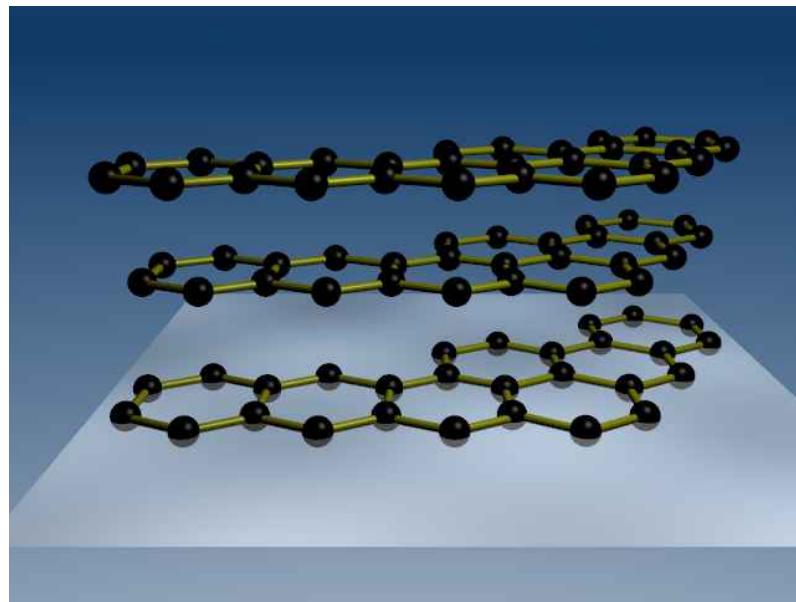


FIG. 1.11 – Structure cristalline du graphite.

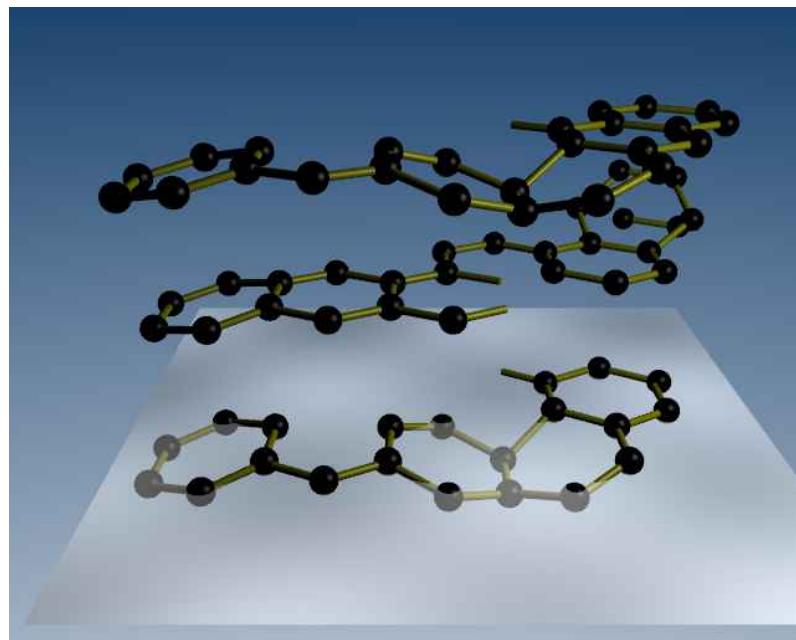


FIG. 1.12 – Structure turbostratique.

dation. À pression atmosphérique, le graphite s’oxyde notablement dès 400°C avec l’oxygène et dès 700°C avec H_2O ou CO_2 Duvivier (1997). Les oxydes de carbone formés sont gazeux. On assiste donc à une gazéification du matériau.

A l’échelle atomique, on peut distinguer plusieurs types de sites occupés par le carbone :

- Les atomes basaux engagés normalement dans un plan graphitique.

– Les atomes présents au niveau d'un défaut ou au bord d'un plan. Pour ces derniers, on différencie (*cf.* figure 1.13) :

- Les faces "zigzag"
- Les faces "fauteuil"

Les atomes basaux engagent tous leurs électrons non appariés avec leurs voisins. Ils sont donc moins réactifs que les atomes de bord de plan. De plus, il a été rapporté Duvivier (1997), que les faces "zigzag" sont plus réactives que les faces "fauteuil".

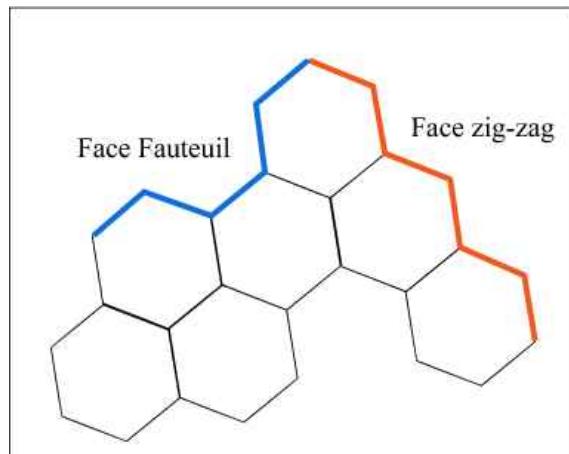


FIG. 1.13 – Types de bords de plans de graphène.

Fibres et Matrices carbonées

Les fibres de carbone sont des cylindres à base plus ou moins circulaire d'environ $4\mu m$ de rayon. Les fibres de carbone sont élaborées par la pyrolyse de précurseurs carbonés : cellulose, polyacrylonitrile (PAN) ou brai. Les brais sont des résidus visqueux, provenant de la distillation ou de l'évaporation partielle d'hydrocarbure ou d'autres matières organiques.

La plupart des fibres ont une structure turbostratique avec une distance d_{002} de l'ordre de 345 pm . Différentes structures de fibres sont possibles en fonction du précurseur et du procédé d'élaboration utilisé. Il en résulte des variations de la concentration et de la répartition des défauts dans les plans de graphène.

A l'échelle de la microstructure, les carbones présentent des taux de cristallinité différents. Ces effets ont été largement étudiés Rodriguez-Mirasol et al. (1995); Quli et al. (1998); Labruquière et al. (2001). Ces études montrent que plus la structure est organisée et se rapproche de celle du graphite moins sa réactivité est importante. On note aussi à cette échelle la présence de pores Jiqiao et al. (2002). Ces pores apparaissent lors de l'élaboration des différentes phases du matériau. Les pores sont principalement présents à la périphérie des fibres et dans la matrice. Cette porosité est due à des défauts de densification mais aussi à la dilatation différentielle des constituants.

1.2 Composites C/C Ablatifs

Les matrices des composites C/C sont elles aussi des carbones turbostratiques mais elles possèdent des propriétés relativement différentes de celles des fibres. Sauder (2001)

La matrice est obtenue par la densification d'une préforme fibreuse. Il existe deux procédés industriels de densification Lacoste et al. (2002) :

1. L'imprégnation par voie liquide. La préforme est imprégnée par un précurseur carboné : résine thermoplastique ou thermodurcissable ou par un brai. Le précurseur est pyrolysé aux alentours de 1000°C . La répétition de cycles imprégnation-carbonisation favorise la qualité et l'uniformité de la matrice.
2. L'infiltration en phase vapeur (CVI). Le crackage d'hydrocarbure gazeux est réalisé à la surface de la préforme chauffée. On obtient alors un carbone pyrolytique ou *pyrocarbone*.

Dans les deux types de densification, les conditions opératoires et les précurseurs viennent modifier le type de carbone obtenu. Celui-ci présentera une densité de défauts d'autant plus faible que sa structure se rapproche de celle graphite.

Dans les composites C/C, fibres et matrices subissent des traitements thermiques à haute température ($T > 2000\text{ K}$). Ces traitements favorisent une réduction des défauts structuraux. Les fibres et matrices ainsi obtenus se rapprochent du graphite, on parle de *graphitisation* (Manocha and Fitzer, 1998).

Architecture des composites C/C étudiés

Les composites C/C sont obtenus par la densification d'une préforme de fibres de carbone par une matrice. Les éléments qui constituent la préforme sont appelés renforts, chacun d'eux est composé de plusieurs centaines de fibres. Dans notre étude, on distingue deux types de matériaux suivant le type de renforts :

Tissés : Les préformes de ces matériaux sont des tissus 2D consolidés dans la direction transverse par aiguilletage. On parle alors de 2,5D. La préforme ainsi constituée est densifiée par CVI jusqu'à percolation.

4D L'architecture de ce matériau Snecma Propulsion Solide est une structure tridimensionnelle à quatre axes (Aubard et al., 2000). La préforme est constituée par des baguettes de section millimétrique orientées suivant les quatre diagonales d'un cube. Chaque baguette est un composite fibre de carbone/matrice organique. Une fois la préforme constituée, la matrice organique fugitive est pyrolysée. Le composite est densifié une première fois par un dépôt CVI de quelques micromètres. Une matrice est ensuite déposée par voie liquide en plusieurs cycles.

Une description des procédés de fabrication est donnée figure 1.14.

1.2.2 Observation microscopique de pièces de col ablatées

Les parties précédentes de ce chapitre ont fait apparaître que, à chaque échelle du matériau, celui-ci pouvait présenter des caractéristiques non-uniformes. Nous recherchons ici à déterminer, par l'observation des pièces ablatées, l'impact de ces

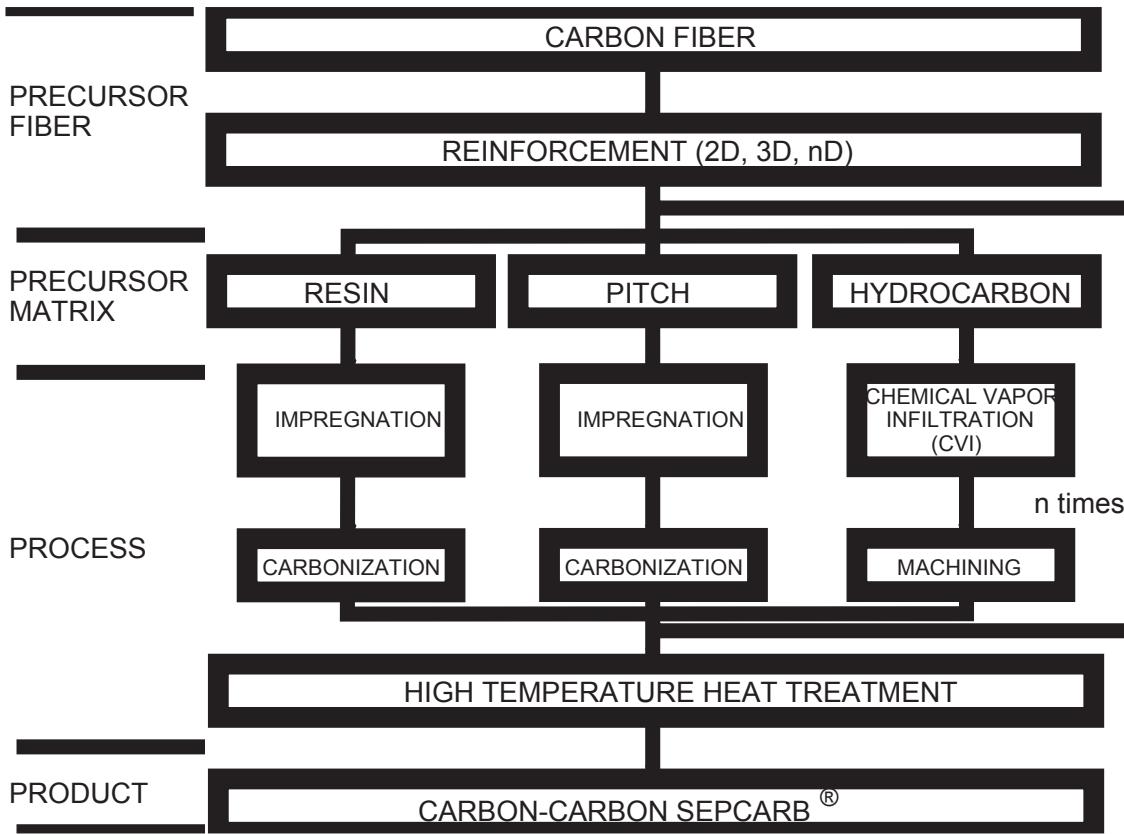


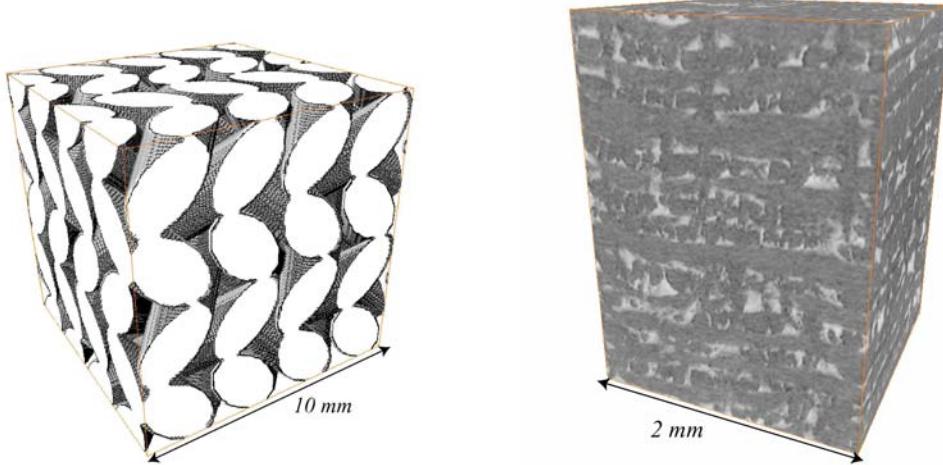
FIG. 1.14 – Représentation des procédés de fabrication des composites C/C Lacoste et al. (2002)

non-uniformités sur le comportement du composite. Dans cette partie les observations faites sur les composites nominaux de type 4D et tissés sont rassemblées. Ces observations sont réalisées à l'aide d'un MEB (Microscope Électronique à Balayage) avec le concours de concours de C. François, microscopiste Snecma Propulsion Solide . Les matériaux étudiés sont différents et ont connu des conditions de tir qui diffèrent. Par cette observation, nous cherchons à évaluer les différences de comportement entre les composants élémentaires du composite ainsi que les différences entre les matériaux. Les clichés les plus caractéristiques de l'état de surface observé sont rassemblés figures 1.16 et 1.17. A la fin du tir, un fin dépôt d'alumine se forme sur la paroi. La paroi est donc figée dans son état à chaud.

Observation

La figure 1.16 présente un montage multi-échelle de clichés MEB du composite 4D.

La première vignette présente une baguette entourée de matrice. On observe qu'il n'y a pas de rugosité importante à cette échelle. A partir de cette zone, on observe dans un premier temps la matrice qui entoure la baguette. L'image en bas



(a) Représentation de l'architecture d'un matériau 4D

(b) Matériau Snecma Propulsion Solide tissé : reconstruction 3D à partir d'une tomodensitométrie RX en absorption

FIG. 1.15 – Architecture des matériaux C/C Snecma Propulsion Solide utilisés en pièce de col

à gauche, montre que cette matrice présente des motifs en feuillets caractéristiques de la présence d'un carbone fortement graphité.

L'observation plus fine de la baguette donne la micrographie en haut à droite. La rugosité est alors importante et distribuée de manière uniforme sur la baguette. En observant l'échelle de la fibre on constate que la récession a été plus importante, dans une zone de l'ordre de $0.5 - 1 \mu\text{m}$ qui entoure les fibres, que pour les fibres ou la matrice massive. Ceci révèle la présence d'une interphase très réactive entre la fibre et la matrice. On constate de plus que les fibres sont épointées. On note qu'il est difficile de conclure sur un éventuel contraste de réactivité entre la matrice et les fibres. Il apparaît cependant que si ce contraste existe, il est bien inférieur à celui qui existe entre fibre et interphase.

Par ailleurs, l'observation microscopique du matériau ne montre aucune influence particulière du sens l'écoulement sur les rugosités. En effet, les baguettes émergeant en direction $(1, 1, 1)$ ou $(1, -1, 1)$ montrent des morphologies parfaitement identiques. De plus, les observations montrent que la porosité aux deux échelles est faible. Ceci est confirmé par une porosité moyenne de l'ordre de 3%.

Les observations réalisées sur le matériau tissé sont résumées par le montage présenté figure 1.17. Sur le plus faible grossissement, on observe que la matrice qui entoure les fils n'est plus visible qu'en profondeur. En observant, un fil d'aiguilletage orthogonal à la direction d'observation, sur les deux autres vignettes, on constate que la morphologie est proche de celle du 4D à la même échelle. Une nouvelle fois,

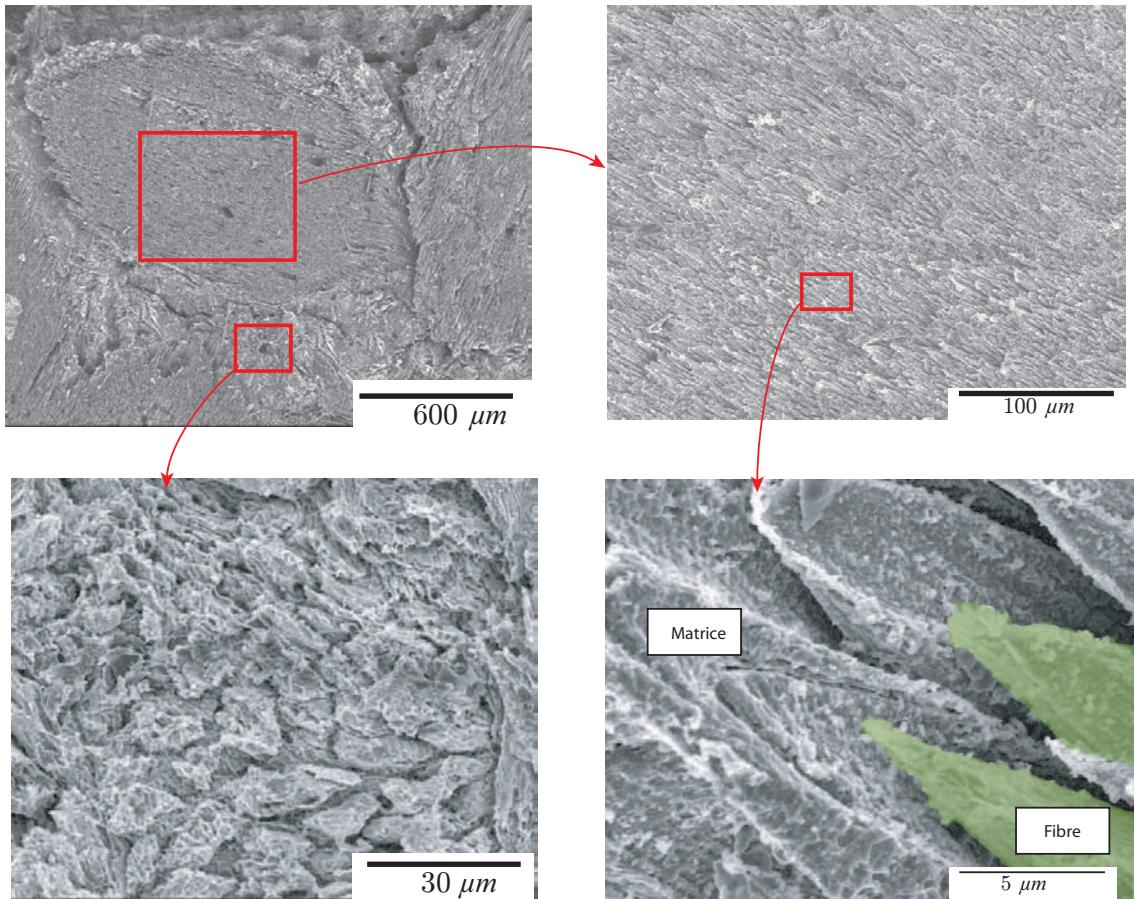


FIG. 1.16 – Aspect microscopique du matériau 4D-1

on relève que :

- Le recul débute autour des fibres. Il semble qu'il existe une interphase plus réactive que la fibre et la matrice. Cette hypothèse a déjà été démontrée dans une étude Labruquère et al. (2001) portant sur ce matériau.
- Les fibres sont pointues. La réactivité de la matrice et des fibres semble comparable.

A nouveau, l'observation MEB de la surface ablatée ne montre pas d'influence de la direction d'écoulement sur les morphologies observées. On note qu'à l'échelle millimétrique, le composite est un milieu poreux dont les pores ont une échelle caractéristique d'environ $50 - 100 \mu m$. La porosité macroscopique de ce matériau est de l'ordre de 10 %.

Analyse

A l'échelle microscopique, les deux types de matériaux présentent des morphologies proches. Ces morphologies traduisent les différences de récession entre les fibres et l'interphase de pyrocarbone qui l'entoure. Ainsi la rugosité semble provenir des contrastes de rugosité entre les divers constituants. Le lien entre réactivité et mor-

1.3 Conclusion

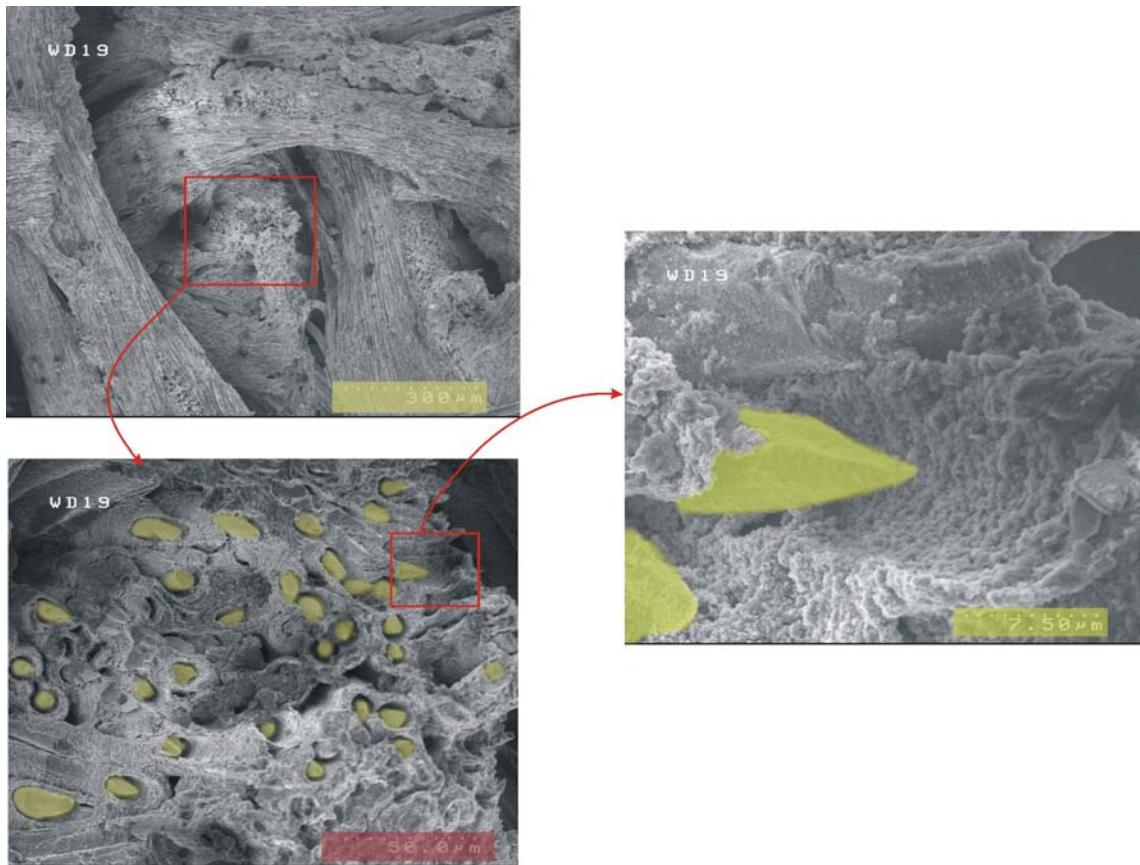


FIG. 1.17 – Observation MEB du matériau tissé

phologie sera l'une des questions centrale de la partie 4. L'existence de morphologies épinglees sera expliquée au chapitre 3 et utilisé au chapitre 6 pour obtenir les réactivités par une approche inverse.

En comparant les deux matériaux à l'échelle microscopique, les similitudes sont nombreuses. Ce n'est plus le cas lorsqu'ils sont observés à l'échelle de leur architecture. Les différences de comportement à l'ablation semblent alors imputables aux différences entre la structure 4D et celle tissée, plus qu'à des composants élémentaires différents.

1.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord étudié les phénomènes qui se déroulent dans la phase fluide de la tuyère au niveau du col. On a observé que l'écoulement dans la tuyère se déroule à nombre de Reynolds élevé. Les caractéristiques de l'écoulement à l'échelle de la veine sont proche de celles données par la détente isentropique d'un gaz parfait. Proche de la paroi, il existe une couche limite turbulente millimétrique où s'opèrent les échanges entre le fluide et la paroi. Notre étude des transferts a permis de montrer que :

- Les gradients de température dans la couche limite sont faibles et ne jouent pas un rôle significatif sur l'ablation à l'échelle de la couche limite.
- Les contraintes mécaniques subies par le matériau ne permettent pas de créer une rugosité à partir d'une paroi lisse.
- L'étude du transfert de masse a permis de dégager les mécanismes responsables de la perte de masse. On a identifié H_2O et CO_2 comme les réactifs et CO et H_2 comme les produits du processus ablatif.

Dans une seconde partie, nous avons pu observer que les composites C/C sont des milieux multi-échelle et que, à chacune des échelles caractéristiques, le matériau est composé de plusieurs phases carbonées différentes. Les observations réalisées n'ont pas montré d'influence significative de la direction de l'écoulement sur les morphologies d'ablation. On retiendra de plus que :

- A l'échelle mésoscopique, le 4D est un matériau dense où baguettes et matrice ont un comportement ablatif comparable. Le composite tissé est un milieu poreux où la matrice paraît plus réactive que les fils.
- A l'échelle microscopique, les deux matériaux ont une structure proche. Ils sont formés de fibres entourées d'une interphase plus réactive, elle-même entourée d'une matrice dont la réactivité apparaît proche de celle de la fibre.

Ces différentes observations vont nous permettre de définir les phénomènes et les couplages qui caractérisent l'ablation des composites C/C utilisés comme cols de tuyère. Cette définition permettra par la suite d'établir une stratégie de modélisation qui permettra de mieux comprendre le rôle de chacun des phénomènes dans le comportement récessif de la paroi composite.

Chapitre 2

Définition de la stratégie de modélisation

Les chapitres précédents étaient consacrés à l'étude des phases fluide et solide de notre problème. Nous pouvons maintenant proposer une description globale du processus d'ablation des composites C/C utilisés comme pièce de col de tuyère. Ce faisant, les paramètres caractéristiques des échelles spatiales et temporelles de l'étude ainsi que des couplages entre les différents phénomènes sont mis en évidence. On propose alors des modèles restreints d'ablation permettant de comprendre l'impact des différents couplages sur le comportement moyen à l'ablation.

2.1 Description globale du processus

Grâce aux études réalisées dans le chapitre précédent, plusieurs étapes peuvent être distinguées dans le processus d'ablation. En s'appuyant sur le schéma figure 2.1, on a successivement :

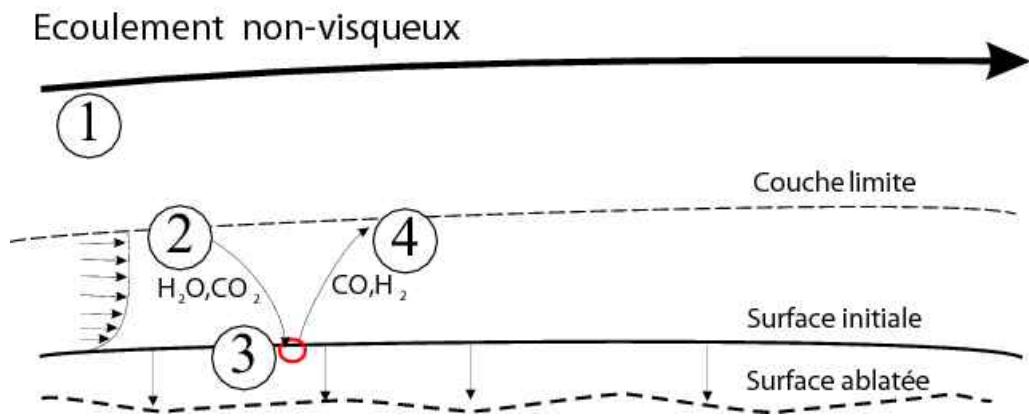


FIG. 2.1 – Représentation du processus d'ablation d'un col de tuyère.

1. Le transport des produits de combustion depuis la chambre de combustion jusqu'au niveau du col par l'écoulement non-visqueux.

2. La diffusion-convection des réactifs dans la couche limite.
3. La gazéification du composite par réaction hétérogène.
4. La diffusion-convection des produits de l'oxydation.

Bien que, pour une particule fluide, ces étapes se déroulent séquentiellement, il existe un couplage entre chacune d'elles. Suivant les arguments donnés au paragraphe 1.1.3, l'érosion mécanique est négligée dans tout le travail qui suit. Après l'étude faite au paragraphe 1.1.3, le système est considéré comme isotherme et l'aspect thermique n'est pas abordé avec plus de détails.

Durant le processus représenté figure 2.1, on assiste à une variation de la vitesse du fluide, au transport et à la réaction de plusieurs espèces. Ces réactions se déroulent à la paroi et entraînent une perte de masse du solide. On propose maintenant une forme générale pour le bilan de ces différentes quantités.

2.1.1 Conservation des espèces

Dans la phase fluide, la conservation de l'espèce i est donnée par Taylor and Krishna (1993) :

$$\partial_t c_i + \nabla \cdot \underline{N}_i = 0 \quad (2.1)$$

où $\underline{N}_i = c_i \underline{v}_i$ est le flux molaire de i et \underline{v}_i la vitesse de l'espèce i . La diffusion correspond au déplacement spontané des molécules sous l'effet des gradients de potentiel chimique (Taylor and Krishna, 1993). Lorsque la phase fluide est isotherme, les potentiels sont uniquement fonction des fractions molaires des espèces. La vitesse \underline{v}_i traduit la diffusion des espèces les unes par rapport aux autres mais aussi le déplacement global du mélange. En introduisant la vitesse molaire moyenne \underline{w} définie par :

$$\underline{w} = \sum_i x_i \underline{v}_i \quad (2.2)$$

où les x_i sont les fractions molaires définies par $x_i = \frac{c_i}{c_t}$ avec $c_t = \sum_i c_i$ qui est la concentration totale. On définit le flux diffusif par :

$$\underline{J}_i = c_t x_i (\underline{v}_i - \underline{w}) \quad (2.3)$$

De manière analogue aux flux en diffusion binaire, les flux diffusifs sont exprimés sous la forme d'une loi de Fick généralisée. La matrice de diffusion des coefficients binaires D_{ij} est obtenue par la théorie de Maxwell-Stefan (Taylor and Krishna, 1993). Le flux diffusif molaire de l'espèce i s'écrit alors :

$$\underline{J}_i = \sum_j -D_{ij} \nabla c_j \quad (2.4)$$

On note Σ la paroi réactive du matériau comme illustré figure 2.2. On note Ω le domaine qui contient le solide, le fluide et Σ . Cette paroi est le siège de plusieurs

2.1 Description globale du processus

réactions. Le flux de i consommé à la paroi est donné par la cinétique des réactions à la paroi :

$$J_i \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = \nu_i k_i c_i^{a_i} \quad (2.5)$$

où $\underline{n}_{\gamma\kappa} = -\underline{n}$ est la normale à l'interface dirigée du fluide vers le solide et les k_i , ν_i et les a_i sont les cinétiques, les coefficients stœchiométriques et l'ordre de réaction associés à la réaction de la paroi avec l'espèce i . La paroi réactive est récessive. Elle se déplace donc dans le repère lié à l'axe de la tuyère. On note \underline{v} , la vitesse normale de la paroi dans ce repère. La vitesse de l'espèce i par rapport à la paroi est alors $\underline{w} - \underline{v}$. La condition limite sur Σ associée est alors :

$$\left(\sum_j (-D_{ij} \nabla c_j) + c_i (\underline{w} - \underline{v}) \right) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = \nu_i k_i c_i^{a_i} \quad (2.6)$$

Dans notre cas, les réactifs sont H_2O et CO_2 . De plus, le matériau réagit mole à mole

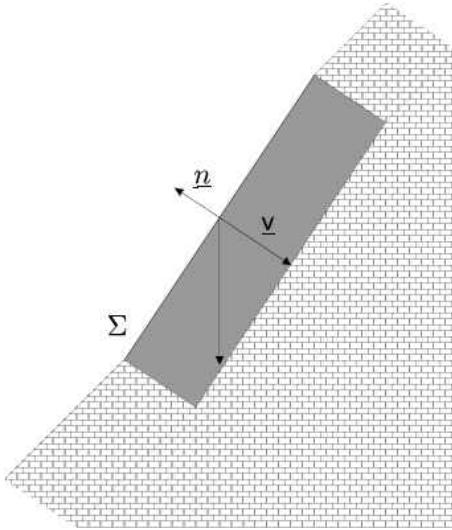


FIG. 2.2 – Paroi réactive Σ .

avec les oxydants et suivant une seule loi cinétique d'ordre 1 et de vitesse k . Dans le solide, il n'y a ni diffusion ni convection des molécules. On a donc simplement :

$$c_s \underline{v} \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = k (c_{H_2O} + c_{CO_2}) \quad (2.7)$$

En utilisant le volume molaire local $\Upsilon = \frac{1}{c_s}$, on obtient :

$$\underline{v} = \Upsilon k (c_{H_2O} + c_{CO_2}) \underline{n}_{\gamma\kappa} \quad (2.8)$$

2.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

En l'absence de forces volumiques, la conservation de la quantité de mouvement du fluide dans le référentiel lié à la tuyère est donnée de façon générale par l'équation

de Navier-Stokes qui, sous l'hypothèse de Newton-Stokes s'écrit Chassaing (2000) :

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \left(\Delta \underline{v} + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \cdot \underline{v}) \right) + \frac{1}{\rho_g} \nabla p = 0 \quad (2.9)$$

La paroi Σ est imperméable. Cependant, Σ étant mobile dans le référentiel lié à la tuyère, une condition d'adhérence simple n'est pas adaptée. En effet, il faut que le fluide puisse suivre le recul de la paroi. En nous appuyant sur Golfier et al. (2002), on écrit la condition sur Σ suivant :

$$\underline{v} - (\underline{v} \cdot \underline{n}) \underline{n} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.10)$$

Avec cette condition, on autorise une vitesse normale à la paroi mais pas d'écoulement localement tangentiel.

2.2 Échelles et couplages

Nous avons vu dans les chapitres précédents que les phases fluide et solide font intervenir plusieurs échelles où la structure du milieu et la physico-chimie des phénomènes qui s'y déroule diffèrent. Dans cette partie, on précise quelles sont les échelles d'étude pertinentes vis-à-vis de notre objectif et quels sont les paramètres caractéristiques des phénomènes qui s'y déroulent.

2.2.1 Échelles spatiales

De l'analyse du matériau, quatre échelles se sont dégagées :

- L'échelle cristalline nanométrique ;
- L'échelle micrométrique des composants élémentaires fibres et matrices ;
- L'échelle millimétrique de l'architecture du composite ;
- L'échelle métrique de la pièce composite.

De l'analyse de l'écoulement, trois échelles se sont dégagées dans le voisinage de la paroi :

- L'échelle micrométrique de la sous-couche visqueuse ;
- L'échelle millimétrique de la couche limite turbulente ;
- L'échelle métrique de l'écoulement du fluide parfait au cœur de la tuyère.

On observe un recouvrement favorable des échelles de l'écoulement et de celles imposées par la structure du composite. Les phénomènes qui se déroulent à l'échelle nanométrique du matériau sont du ressort de la chimie des matériaux proprement dite. Les cinétiques qui ont été données par le tableau 1.3 résultent déjà de l'homogénéisation de cette échelle. L'échelle micrométrique des fibres et de la matrice qui les entoure sera donc la plus petite échelle du matériau abordée dans cette étude.

Concernant l'échelle métrique, les couplages entre l'écoulement et la récession ne font pas intervenir de non-uniformité de la paroi. De plus, cette échelle est déjà bien décrite par les outils dont Snecma Propulsion Solide dispose. Il n'est donc pas nécessaire d'étudier cette échelle. L'échelle millimétrique sera donc la plus grande échelle

2.2 Échelles et couplages

abordée dans cette étude. Notre étude est donc définie à deux échelles représentées figure 2.3 :

- L'échelle microscopique de dimension caractéristique $l_\mu = 10 \mu\text{m}$ où le composite est formé de fibres entourés de matrice et où l'écoulement est visqueux.
- L'échelle mésoscopique de dimension caractéristique $l_m = 1 \text{ mm}$ où le composite est formé de fils ou de baguettes entourés de matrice et où l'écoulement est turbulent.

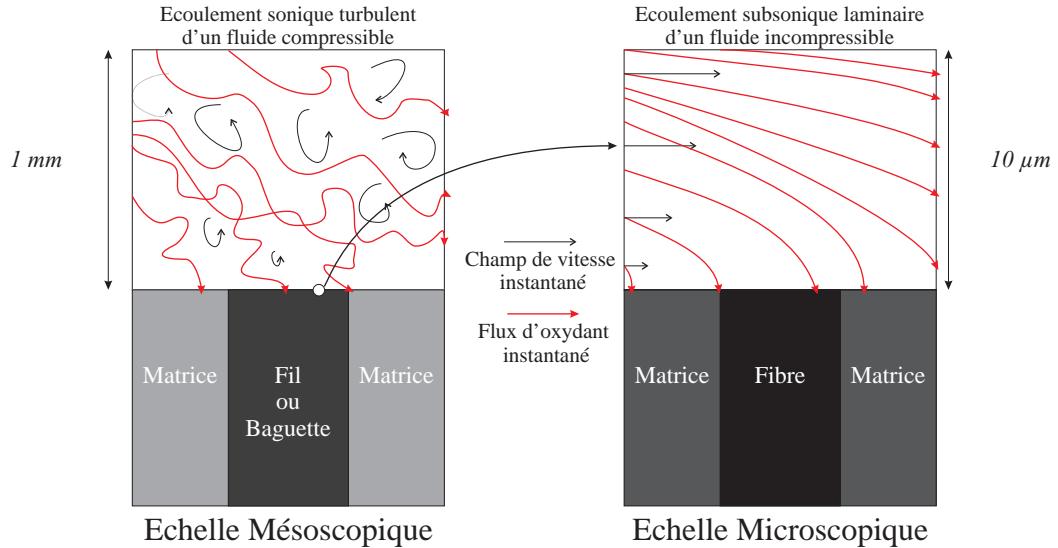


FIG. 2.3 – Schématisation des transferts se déroulant à l'échelle mésoscopique et microscopique.

Maintenant que nous avons précisé les échelles concernées par notre étude, nous pouvons déterminer les autres grandeurs caractéristiques des phénomènes qui s'y déroulent.

2.2.2 Paramètres caractéristiques de l'étude

Nous avons proposé une forme générale pour les bilans de conservation. En utilisant les grandeurs caractéristiques de notre problème, nous souhaitons dégager les paramètres caractéristiques des phénomènes et des couplages qui se déroulent dans le phénomène d'ablation. Une fois identifiés, c'est par le calcul des valeurs typiques de ces paramètres aux échelles de notre étude que nous pourrons souligner les différences phénoménologiques qui les séparent.

Nous avons obtenu les bilans suivants sur le domaine fluide et à son interface.

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \left(\Delta \underline{v} + \frac{1}{3} \nabla \nabla \cdot \underline{v} \right) + \frac{1}{\rho_g} \underline{\nabla p} = 0 \quad (2.11)$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot \left(\sum_j D_{ij} \underline{\nabla c_j} + c_i \underline{v} \right) = 0 \quad (2.12)$$

$$\left(\sum_j (-D_{ij} \nabla c_j) + c_i (\underline{w} - \underline{v}) \right) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - \nu_i k_i c_i = 0 \quad (2.13)$$

$$\underline{v} - (\Upsilon k (c_{H_2O} + c_{CO_2})) \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \quad (2.14)$$

Pour établir les nombres adimensionnés caractéristiques de notre étude, le transport multicompagnant est remplacé par un seul réactif dilué, de concentration c . Sous ces hypothèses, on peut confondre la vitesse barycentrique moyenne \underline{v} et la vitesse molaire moyenne \underline{w} . Le problème s'écrit alors plus simplement :

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \left(\Delta \underline{v} + \frac{1}{3} \nabla \nabla \cdot \underline{v} \right) + \frac{1}{\rho_g} \nabla p = 0 \quad (2.15)$$

$$\partial_t c - D \Delta c + \underline{v} \cdot \nabla c = 0 \quad (2.16)$$

$$(-D \nabla c + c (\underline{v} - \underline{v})) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - k c = 0 \quad (2.17)$$

$$\underline{v} - (\Upsilon k c) \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \quad (2.18)$$

En injectant l'équation pour \underline{v} dans la condition limite pour le flux de c , on obtient :

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \Delta \underline{v} + \frac{1}{\rho_g} \nabla p = 0 \quad (2.19)$$

$$\partial_t c - D \Delta c + \underline{v} \cdot \nabla c = 0 \quad (2.20)$$

$$(-D \nabla c + c \underline{v}) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - c (\Upsilon k c) - k c = 0 \quad (2.21)$$

On introduit alors deux grandeurs caractéristiques : une longueur L , une vitesse U . Le temps caractéristique est ainsi L/U . On définit alors les grandeurs adimensionnées suivantes :

$$\begin{cases} x_i^* &= \frac{x_i}{L} \\ \underline{v}^* &= \frac{\underline{v}}{U} \\ p^* &= \frac{p}{\rho_g U^2} \\ c^* &= \frac{c}{c_t} \\ t^* &= \frac{U}{L} t \end{cases} \quad (2.22)$$

avec $c_t = \frac{\rho_g U^2}{\mathcal{R} T}$ la concentration totale. Notre choix de dimension pour la pression sera justifié paragraphe 2.3.1. En utilisant les opérateurs différentiels associés aux variables d'espace x_i^* , les bilans précédents deviennent alors :

$$\begin{aligned} \frac{U^2}{L} \partial_{t^*} \underline{v}^* + \frac{U^2}{L} (\underline{v}^* \cdot \nabla) \underline{v}^* - \frac{\nu U}{L^2} \left(\Delta^* \underline{v}^* + \frac{1}{3} \nabla^* (\nabla \cdot^* \underline{v}) \right) + \frac{\rho_g U^2}{\rho_g L} \nabla^* p^* &= 0 \\ \frac{U c_t}{L} \partial_{t^*} c^* + \frac{D c_t}{L^2} \Delta^* c^* - \frac{U c_t}{L} \underline{v}^* \cdot \nabla^* c^* &= 0 \\ \frac{D c_t}{L} (\nabla^* c^* + \frac{U L}{D} \underline{v}^*) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - \Upsilon k c_t^2 (c^*)^2 - k c_t c^* &= 0 \end{aligned}$$

En simplifiant les différents facteurs, on obtient les équations simplifiées suivantes :

$$\partial_{t^*} \underline{v}^* + (\underline{v}^* \cdot \nabla) \underline{v}^* - \frac{\nu}{U L} \left(\Delta^* \underline{v}^* + \frac{1}{3} \nabla^* (\nabla \cdot^* \underline{v}) \right) + \nabla^* p^* = 0 \quad (2.23)$$

2.2 Échelles et couplages

$$\partial_{t^*} c^* + \frac{D}{U L} \Delta^* c^* - \underline{\underline{\mathbf{v}}}^* \cdot \underline{\underline{\nabla}}^* \underline{\underline{\mathbf{c}}}^* = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{D}{k L} (\underline{\underline{\nabla}}^* \underline{\underline{\mathbf{c}}}^* + \frac{U L}{D} \underline{\underline{\mathbf{v}}}^*) \cdot \underline{\underline{\mathbf{n}}}_{\gamma\kappa} - \Upsilon c_t (c^*)^2 - c^* = 0 \quad (2.25)$$

Par ailleurs, l'équation de propagation des ondes de pression de célérité v_s dans le fluide amène à :

$$\partial_{t^2}^2 p - v_s^2 \Delta p = 0 \quad (2.26)$$

Ce qui, sous forme adimensionnée amène à :

$$\partial_{(t^*)^2}^2 p^* - \left(\frac{v_s}{U}\right)^2 \Delta^* p^* = 0 \quad (2.27)$$

On définit alors les nombres suivants :

- Le nombre de Mach, $Ma = \frac{U}{v_s}$, qui compare la vitesse de l'écoulement à celle du son. Lorsque Ma est inférieur à l'unité, les ondes de pression se propagent dans le fluide plus rapidement qu'il ne se déplace. Ainsi plus Ma est faible plus les non-uniformités de la densité relaxent rapidement. On estime Chassaing (2000) que pour $Ma < 0.3$, le fluide peut être modélisé par un fluide incompressible.
- Le nombre de Reynolds, $Re = \frac{U L}{\nu}$, déjà évoqué, qui compare les forces de viscosité aux forces d'inerties. Lorsqu'il est très grand devant l'unité l'écoulement est dominé par la turbulence.
- Le nombre de Péclet de masse, $Pe = \frac{U L}{D}$, compare la vitesse du transport convectif à celle du transport diffusif. Lorsque $Pe \gg 1$, la convection est très rapide devant la diffusion, on parlera alors de *transport convectif*. A l'inverse pour $Pe \ll 1$, on parle de *transport diffusif*.
- Le nombre de Damköhler, $Da = \frac{k L}{D}^{-1}$, qui compare la vitesse de la réaction à celle de la diffusion. En absence d'écoulement ($Pe = 0$), on aura un régime limité par la réaction ou *régime réactif* pour $Da \ll 1$. Dans ce régime, la diffusion est très rapide, il n'y a plus de gradients de concentration à l'échelle de L . A l'inverse, pour $Da \gg 1$, on aura un régime limité par la diffusion ou *régime diffusif* dans lequel le flux pariétal ne dépend plus de la valeur de k .
- Le rapport de condensation, $\varpi = \Upsilon c_t = \frac{\Upsilon \rho_g U^2}{\mathcal{R} T}$ qui est le rapport entre la vitesse de la réaction et celle de la récession. Il représente de plus le rapport de condensation entre la concentration dans le fluide c_t et dans le solide $1/\Upsilon$. Lorsque $\varpi \ll 1$, la récession est lente devant la réaction. Si on a de plus $\frac{\varpi}{Da} \ll 1$ ce qui signifie que la diffusion est rapide devant la récession, le caractère récessif n'influe plus sur la condition à la paroi.

Avec ces nombres, le système précédent d'équations bilans s'écrit alors simplement :

$$\partial_{t^*} \underline{\underline{\mathbf{v}}}^* + (\underline{\underline{\mathbf{v}}}^* \cdot \nabla) \underline{\underline{\mathbf{v}}}^* - \frac{1}{Re} \left(\Delta^* \underline{\underline{\mathbf{v}}}^* + \frac{1}{3} \underline{\underline{\nabla}}^* \underline{\underline{\nabla}}^* \cdot \underline{\underline{\mathbf{v}}}^* \right) + \underline{\underline{\nabla}}^* \underline{\underline{p}}^* = 0 \quad (2.28)$$

¹Le lecteur trouvera dans la littérature, par exemple dans Juhasz and Deen (1991), un même nombre portant le nom de Sherwood

$$\partial_{t^*} c^* + \frac{1}{Pe} \Delta^* c^* - \underline{\underline{v}}^* \cdot \nabla^* \underline{\underline{c}}^* = 0 \quad (2.29)$$

$$\frac{1}{Da} (\nabla^* \underline{\underline{c}}^* + Pe \underline{\underline{v}}^*) \cdot \underline{\underline{n}}_{\gamma\kappa} - \varpi (c^*)^2 - c^* = 0 \quad (2.30)$$

On peut alors introduire des nombres secondaires dérivés des premiers. Ainsi, le nombre de Schmidt dérivé du Reynolds et du Péclet : $Sc = \frac{Pe}{Re} = \frac{\nu}{D}$ qui compare le transport de quantité de mouvement à la diffusion.

Nous souhaitons mesurer l'impact du caractère hétérogène du solide sur son comportement moyen à l'ablation. Il faut donc introduire des paramètres décrivant la non-uniformité de la paroi. Les paramètres caractéristiques du solide sont moins faciles à déterminer que ceux du fluide. Par exemple, si on envisage le cas de milieux aléatoires sans cohérence structurelle, un tel milieu implique un nombre infini de paramètres descriptifs liés au solide. En effet, une simple moyenne des propriétés ne suffit pas à décrire son comportement comme illustré par les travaux de Golfier et al. (2002).

Dans le cas des matériaux composites C/C, la structure et l'observation du matériau nous invitent à considérer un milieu solide formé de phases distinctes, localement homogènes. Le caractère homogène est lié à l'hypothèse que nous faisons selon laquelle le changement d'échelle est possible entre l'échelle nanométrique et micrométrique dans un premier temps puis micrométrique vers millimétrique dans un second temps. Afin de construire un premier modèle, nous considérons un milieu solide formé uniquement de deux phases solides différentes. Ainsi, le milieu microscopique sera formé de fibres entourées d'une matrice et le composite mésoscopique sera formé d'un renfort (baguette ou fil) et d'une matrice. Dans un même composite, cette dernière matrice peut être différente de celle relative à l'échelle microscopique.

On pourra ainsi décrire notre composite par un nombre plus réduit de paramètres. Nous introduisons alors les contrastes liés aux deux variables qui interviennent dans ϖ . On définit tout d'abord $\tilde{K}_\mu = \frac{k_m}{k_f}$ pour l'échelle microscopique qui se rapporte aux réactivités de la matrice et de la fibre microscopique. De même, on pose $\tilde{K}_m = \frac{k_M}{k_F}$ pour le rapport de la réactivité de la matrice mésoscopique sur celle du fil. De même, on introduit, $\tilde{\Upsilon}_\mu = \frac{\Upsilon_m}{\Upsilon_f}$ et $\tilde{\Upsilon}_m = \frac{\Upsilon_M}{\Upsilon_F}$ pour désigner le rapport des volumes molaires.

Dans notre cas les deux phases sont composées uniquement de l'élément carbone, $\tilde{\Upsilon}$ est alors l'inverse du rapport des densités. On emploiera ainsi le terme "plus dense" pour désigner une phase dont le volume molaire est plus faible. Les autres paramètres nécessaires à la description du solide, notamment de sa géométrie, apparaîtront dans la suite de notre étude.

A ce stade de l'étude les couplages entre les différents phénomènes peuvent être définis par le schéma présenté figure 2.4. Les couplages qui ont été mis en évidence à ce stade sont ceux qui concernent l'influence de l'écoulement sur le transport des réactifs. Ceci se traduit par le nombre de Péclet mais aussi le nombre de Reynolds puisqu'on attend, tout étant égal par ailleurs, qu'un écoulement de structure différente amène à un champ de concentration différente. Ce couplage est à sens unique car, le transfert de masse n'influe pas sur l'écoulement. Le second couplage est celui

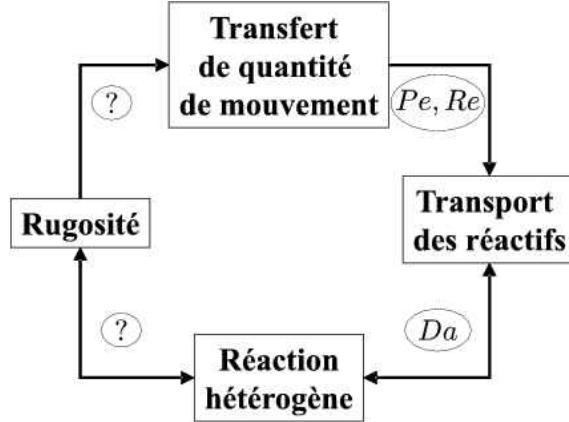


FIG. 2.4 – Couplages entre les différents phénomènes majeurs et intensité mise en évidence à ce stade d'étude.

entre la réaction et le transport par diffusion-convection dont l'intensité est donnée par le nombre de Damköhler Da . Deux couplages sont, pour le moment, mal compris. Il s'agit tout d'abord du lien entre la réaction hétérogène et la rugosité. On suspecte les gradients de réactivité d'intervenir dans ce processus mais le déroulement réel est pour le moment mal défini. Ce couplage sera étudié en détails au chapitres 4 et 5. Le second couplage dont l'intensité caractéristique est pour le moment mal définie est l'impact de la rugosité sur l'écoulement. Ce couplage sera abordé au chapitre 3.

Les nombres permettant une description synthétique de notre problème ont été définis. Nous pouvons maintenant calculer leurs valeurs aux échelles mésoscopique et microscopique.

Échelle mésoscopique

A l'échelle mésoscopique, la longueur caractéristique est $l_m = 1 \text{ mm}$, la vitesse caractéristique est $U = 1000 \text{ m.s}^{-1}$. D'après le principe de fonctionnement du col, le nombre de Mach est égal à l'unité. Avec $Ma = 1$, on a un écoulement sonique compressible. Les valeurs de la viscosité cinématique μ et la masse volumique sont données par le tableau 1.2. On a donc : $\mu \approx 10^{-4} \text{ Pa.s}$, $\rho_g \approx 5 \text{ kg.m}^{-3}$. On en déduit $Re = \frac{U l_m}{\nu} = \frac{U l_m \rho_g}{\mu} \approx 5 \cdot 10^4$. On obtient donc un nombre de Reynolds très grand devant l'unité. Ceci justifie le comportement turbulent observé.

Lorsque le fluide devient turbulent, ce sont les tourbillons qui contrôlent les transferts des espèces et de la quantité de mouvement. Par analogie avec les coefficients de transport ordinaires, on définit les coefficients turbulents, qui relient les flux aux gradients des propriétés transportées. Le profil de la viscosité turbulente a été donné figure 1.6. Tous les transports étant contrôlés par les tourbillons, il est fréquent Taylor and Krishna (1993) de faire l'hypothèse que les coefficients turbulents sont égaux. On a par exemple $Sc^{(t)} = \frac{\nu^{(t)}}{D^{(t)}} = 1$. Le code CLIC nous donne $\mu^{(t)} \approx 100\mu \approx 10^{-2} \text{ Pa.s}$. On peut alors calculer le nombre de Péclet turbulent $Pe^{(t)} = \frac{U l_m}{D^{(t)}} = \frac{U l_m \rho_g}{\mu^{(t)}} \approx 500$. Le transport convectif est donc largement dominant sur le transport diffusif sur le

domaine global. Cependant, la vitesse étant nulle à la paroi, il existe un voisinage de la paroi où le nombre de Péclet est suffisamment faible pour que la diffusion soit dominante.

D'après les calculs effectués au paragraphe 1.1.3, la réactivité k de la paroi peut varier entre $k_{min} = 0.1 \text{ m.s}^{-1}$ et $k_{max} = 200 \text{ m.s}^{-1}$. Le nombre de Damköhler varie alors entre $5 \cdot 10^{-2}$ et 10. Les valeurs du nombre de Damköhler ainsi obtenues montrent qu'à cette échelle il n'est pas légitime de prendre une concentration nulle à la paroi.

Le rapport de condensation ϖ est insensible au caractère turbulent. Dans nos applications, le volume molaire est de l'ordre de $\Upsilon = 6 \cdot 10^6 \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$. On a alors $\varpi = \Upsilon c_t = \frac{\Upsilon \rho_g U^2}{\mathcal{R} T} \approx 10^{-3}$. La vitesse de récession est donc toujours d'au moins deux ordres de grandeur plus lente que la diffusion ($\varpi Da < 10^{-1}$). D'après le procédé de fabrication utilisé, il y a peu de différence de densité entre une baguette ou un fil et la matrice associée même si dans la plupart des cas la matrice est légèrement moins dense que les renforts. On a donc $\tilde{\Upsilon} \approx 1$. L'observation du 4D a montré que la matrice et la baguette avait *a priori* des réactivités proches. On a donc $\tilde{K}_m \approx 1$ pour le 4D. Pour le composite tissé, la matrice est apparue plus réactive que les fils. On aurait donc $\tilde{K}_m > 1$. Il est difficile à ce moment de l'étude de quantifier ce contraste. Cependant, en nous rappelant les contrastes obtenus pour les cinétiques à une température donnée, il est raisonnable de penser que $\tilde{K}_m < 50$.

Échelle microscopique

A l'échelle microscopique, la longueur caractéristique est $l_\mu = 10 \mu\text{m}$, la vitesse caractéristique de $U = 500 \text{ m.s}^{-1}$ est relevée sur la figure 1.5. Le code CLIC donne $Ma \approx 0.2$. Le caractère compressible est donc faible à cette échelle. La masse volumique calculée dans CLIC varie relativement peu dans la couche limite. On aura toujours $\rho_g \approx 5 \text{ kg.m}^{-3}$. Le nombre de Reynolds est ainsi $Re = \frac{U l_\mu \rho_g}{\mu} = 250$. L'écoulement est alors laminaire. Comme cela sera montré par la suite, le coefficient de diffusion caractéristique est $D \approx 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. Le nombre de Péclet est alors $Pe = \frac{U l_\mu}{D} = 500$. Le transport est donc à nouveau dominé par la convection. Le nombre de Damköhler est divisé par $\frac{D l_m}{D^{(t)} l_\mu} = 5$ et ainsi $Da \in [10^{-2}, 2]$. Le rapport de condensation ϖ est alors $\varpi = \Upsilon c_t = 3 \cdot 10^{-4}$. La récession est alors toujours mille fois plus lente que la diffusion ($\varpi Da < 10^{-3}$).

A l'échelle microscopique, les fibres et la matrice ont une structure proche du graphite. Au premier ordre, on a $\tilde{\Upsilon}_\mu \approx 1$. L'observation MEB a montré que les fibres étaient l'élément résistant. On a donc $\tilde{K}_\mu > 1$ et toujours $\tilde{K}_\mu < 50$. Il semble d'après les observations que le contraste à l'échelle microscopique soit plus grand que celui qui apparaît à l'échelle mésoscopique.

Analyse

En passant de l'échelle mésoscopique à l'échelle microscopique, la longueur caractéristique a été divisée par 100 et la vitesse caractéristique a été divisée d'un facteur 2. Cependant, en passant des coefficients de transport turbulents à ceux ordinaires, la viscosité a été divisée par 100 et le coefficient de diffusion par 20. On retrouve alors les mêmes ordres de grandeur pour les nombres de Pe , Da . Les phénomènes sont cependant difficilement comparables d'une échelle à l'autre car les processus de transports sont sensiblement différents entre ces deux échelles. La différence entre les échelles se fait principalement par les nombres de Reynolds et de Mach. On passe ainsi de l'écoulement sonique turbulent d'un fluide compressible à celui subsonique et laminaire d'un fluide incompressible.

Remarque : Aux deux échelles d'étude, nous avons un rapport de condensation petit devant l'unité. Ce résultat est caractéristique d'un système gaz-solide. Si on considère un système liquide-solide, le volume molaire du fluide devient comparable à celui du solide. Par exemple si le fluide était de l'eau, aux conditions standards et en conservant notre composite, on aurait $\varpi \approx \frac{1}{3}$. De plus, dans ce cas, le coefficient de diffusion serait plus faible que dans le gaz et amènerait à $Da \gg 1$. On aurait alors un système où la diffusion serait plus lente que la récession $Da\varpi \gg 1$. Le processus global serait alors profondément différent de celui qui nous intéresse. Ce type de système ne sera pas abordé par la suite et nous nous limitons au cas gaz-solide.

Pour avoir une vision globale de la position de notre problème dans l'espace des paramètres, nous définissons trois plans de paramètres. Le premier est lié au régime d'écoulement est le plan (Re, Ma) . Le second, lié au transport du réactif, est le plan (Pe, Da) . Le dernier, lié aux caractéristiques du solide, est le plan $(\tilde{K}, \tilde{\Upsilon})$. En plaçant les valeurs identifiées plus haut dans les différents espaces, ont obtient les figures 2.5(a), 2.5(b) et 2.5(c). Ces représentations nous permettront, tout au long du mémoire, de positionner l'étude en cours par rapport à l'espace des paramètres ainsi que par rapport à l'application visée.

2.2.3 Échelles temporelles

Pour pouvoir effectuer un calcul découpé des échelles, il faut vérifier que les temps caractéristiques des phénomènes évoluent dans le même sens que les échelles. Ainsi un système où la diffusion à la petite échelle est plus lente que celle à la grande échelle ne saurait être découpé.

Dans les couplages précédents, si on exclut le cas du nombre de Mach, nous avons comparé quatre vitesses : convection, diffusion, réaction et récession. Aux deux échelles, elles sont dans le même ordre croissant :

$$V_{Récession} < V_{Réaction} \lesssim V_{Diffusion} < V_{Convection} \quad (2.31)$$

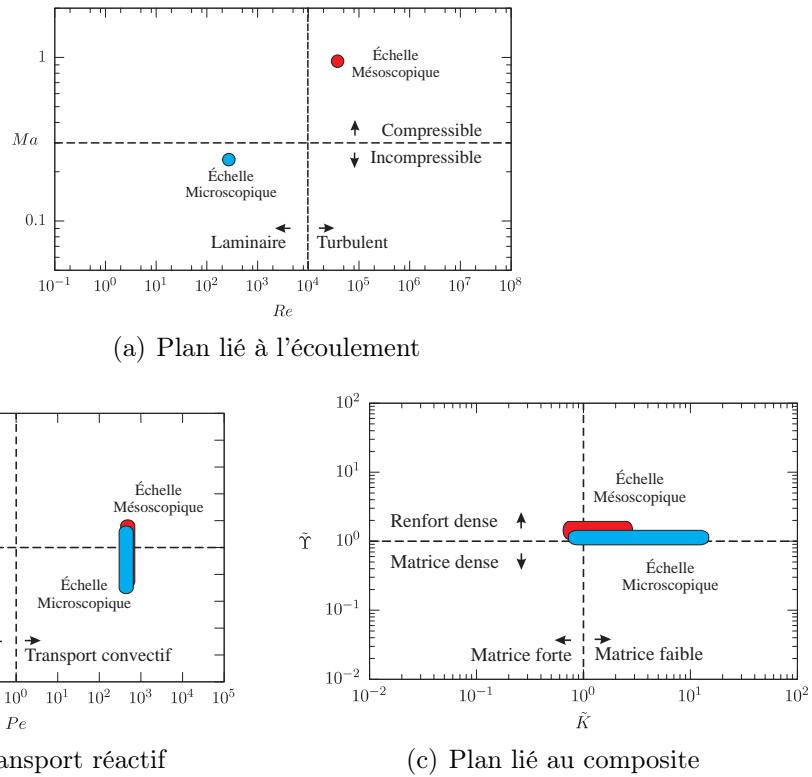


FIG. 2.5 – Position du problème microscopique et mésoscopique dans l'espace des paramètres.

Pour chaque phénomène de vitesse V , on définit le temps caractéristique par $t = \frac{l}{V}$. On obtient alors :

$$t_{Convection} = \frac{L}{U} \quad (2.32)$$

$$t_{Diffusion} = Pe \frac{L}{U} \quad (2.33)$$

$$t_{Réaction} = \frac{Pe}{Da} \frac{L}{U} \quad (2.34)$$

$$t_{Récission} = \frac{Pe}{Da \varpi} \frac{L}{U} \quad (2.35)$$

En utilisant les valeurs obtenues pour les nombres adimensionnels, on construit le graphe proposé figure 2.6.

On observe qu'entre les deux échelles les temps caractéristiques concernant la convection et la diffusion sont dans un rapport qui permettent une approche découpée des échelles. La figure montre un recouvrement des temps liés à la récession et à la réaction. Ceci est dû au fait que nous avons donné à la réactivité k une variation de 2 ordre de grandeur ce qui traduit à la fois la variation de température et les différences entre les matériaux. Nous avons vu qu'à une température donnée \tilde{K} est

2.3 Modèles d'ablation

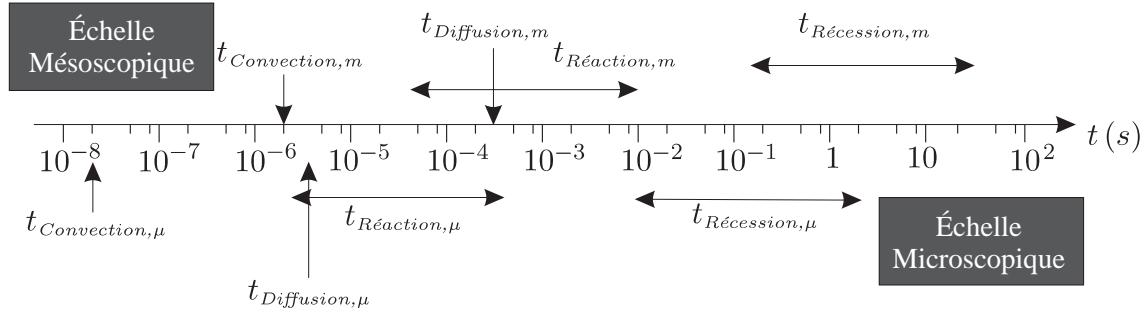


FIG. 2.6 – Échelle des temps caractéristiques des phénomènes aux échelles microscopique et mésoscopique.

au maximum de 50. En utilisant la définition des temps caractéristiques et celle des nombres adimensionnels, on arrive à :

$$\frac{t_{R\acute{e}cession,\mu}}{t_{R\acute{e}cession,m}} = \frac{l_\mu}{l_m} \tilde{K}_{\mu/m} \quad (2.36)$$

avec $\frac{l_\mu}{l_m} \tilde{K}_{\mu/m}$ le rapport entre les réactivités caractéristiques de l'échelle microscopique et la réactivité mésoscopique. On a $\frac{l_\mu}{l_m} = 10^{-2}$, donc si on estime que $\tilde{K}_{\mu/m} < 50$, on a :

$$\frac{t_{R\acute{e}cession,\mu}}{t_{R\acute{e}cession,m}} < \frac{1}{2} \quad (2.37)$$

On a donc toujours une récession à l'échelle microscopique plus rapide que celle qui se déroule à l'échelle mésoscopique. On supposera dans ce travail que ce rapport est suffisamment petit pour que les échelles soient découplées.

Sur la figure 2.6, on observe que les temps de récession sont très grands devant les temps de transport et de chimie. La rugosité du matériau est donc liée au comportement moyen du fluide au cours du temps. Les événements transitoires comme les tourbillons ne peuvent persister sur des temps suffisamment long pour créer seuls une rugosité. Le temps caractéristique du tir est de l'ordre de la dizaine de secondes. Il est donc de l'ordre du temps caractéristique de la récession à l'échelle mésoscopique. Il n'existe donc *a priori* pas de régime stationnaire d'ablation à cette échelle.

2.3 Modèles d'ablation

Les bilans que nous avons obtenus sont donnés sous une forme générale et ne font pas l'objet d'un choix de modélisation particulier. Ils ont permis de construire les nombres qui caractérisent les différents couplages. Nous proposons alors des modèles pour les différents transferts ainsi que pour la géométrie du composite.

2.3.1 Modèles de transfert et de récession

En nous appuyant sur les caractéristiques propres à notre problème nous allons maintenant proposer des modèles spécifiques pour chacun des phénomènes et des échelles de notre étude.

Surface récessive

On a le bilan suivant pour la conservation du solide :

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c) \underline{n} \quad (2.38)$$

Bien qu'il soit exprimé sous une forme générale, ce bilan ne peut être simplifié. Lorsque la paroi recule, on est alors tenté de définir un repère mobile qui recule avec la paroi moyenne. La vitesse de recul dans ce repère local est alors $\underline{v} - \langle \underline{v} \rangle$ où $\langle \underline{v} \rangle$ est la vitesse moyenne de recul de la paroi. C'est cette vitesse $V_a = \langle \underline{v} \rangle$ qui correspond à la vitesse de recul apparente dans le repère global de la paroi.

Transfert de quantité de mouvement

Dans le fluide, dans le référentiel lié à la tuyère, on a pour la conservation de la quantité de mouvement :

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \left(\Delta \underline{v} + \frac{1}{3} \nabla \nabla \cdot \underline{v} \right) + \frac{1}{\rho_g} \underline{\nabla p} = 0 \quad (2.39)$$

Lorsque le régime est turbulent, ce bilan reste valable localement dans le temps et l'espace. A l'échelle mésoscopique, il n'est plus applicable. L'écoulement doit alors faire l'objet d'un traitement particulier. Le traitement d'un écoulement réactif turbulent sur une paroi réactive rugueuse est un objectif qui dépasse largement le cadre de cette étude. Les travaux présentés dans la dernière partie qui feront intervenir le transport turbulent à l'échelle mésoscopique seront donc limités et abordés par des modèles très simples. Dans les développements théoriques des parties 3 et 4, on se limitera à l'étude d'écoulements laminaires qui sont, comme nous allons le voir, représentatifs du comportement microscopique du fluide.

En effet, à l'échelle microscopique, le nombre de Reynolds est $Re = 250$. L'écoulement est donc laminaire et l'équation de Navier-Stokes est donc bien appropriée. De plus le nombre de Mach est suffisamment faible pour que l'on suppose le fluide incompressible. On reprend alors l'analyse dimensionnelle précédente mais en distinguant maintenant la dimension δ , caractéristique de la couche limite, de L , caractéristique de l'écoulement. La couche limite étant petite devant l'écoulement, on a $\delta \ll L$. Soit V la vitesse caractéristique dans la direction z . L'équation de conservation de la masse est alors :

$$\underbrace{\partial_x v_x}_{O(U/L)} + \underbrace{\partial_z v_z}_{O(V/\delta)} = 0 \quad (2.40)$$

2.3 Modèles d'ablation

On en déduit ainsi :

$$V \approx \frac{\delta}{L} U \quad (2.41)$$

La projection sur $\underline{e_x}$ de l'équation de Navier-Stokes stationnaire donne alors :

$$\underbrace{v_x \partial_x v_x}_{O(\frac{U^2}{L})} + \underbrace{v_z \partial_z v_x}_{O(\frac{U^2}{L})} - \underbrace{\nu (\partial_{x^2}^2 v_x + \partial_{z^2}^2 v_z)}_{O(\frac{U}{L^2}) \ll O(\frac{U}{\delta^2})} + \frac{1}{\rho_g} \underbrace{\partial_x p}_{O(\frac{p}{L})} = 0 \quad (2.42)$$

Par définition, en haut de la couche limite les effets visqueux et inertIELS sont comparables. Le terme $\nu \partial_{z^2}^2 v_z$ et donc du même ordre que $v_x \partial_x v_x$. On a donc :

$$\nu \frac{U}{\delta^2} \approx \frac{U^2}{L} \quad (2.43)$$

On en déduit alors que :

$$\left(\frac{\delta}{L} \right)^2 = \frac{\nu}{U L} = \frac{1}{Re} \quad (2.44)$$

Tous les termes étant de l'ordre de $\frac{U^2}{L}$, on a :

$$p \approx \rho_g U^2 \quad (2.45)$$

Ceci justifie donc notre choix précédent pour p^* . Intéressons nous maintenant à la composante suivant $\underline{e_z}$. On a alors :

$$\underbrace{v_x \partial_x v_z}_{O(\frac{U^2 \delta}{L^2})} + \underbrace{v_z \partial_z v_z}_{O(\frac{U^2 \delta}{L^2})} - \underbrace{\nu (\partial_{x^2}^2 v_z + \partial_{z^2}^2 v_z)}_{O(\frac{U \delta^2}{L}) (O(\frac{U \delta}{L^3}) \ll O(\frac{U}{\delta L}))} + \underbrace{\frac{1}{\rho_g} \partial_z p}_{O(\frac{U^2}{\delta})} = 0 \quad (2.46)$$

Le terme $\frac{1}{\rho_g} \partial_z p$ est très grand devant les autres termes. On a donc :

$$\partial_z p \approx 0 \quad (2.47)$$

Ceci signifie que la pression reste uniforme dans la traversée de la couche limite. Notre système sera donc isobare avec une pression typique $p = \rho_g U^2 = 5 \text{ MPa}$. On retrouve donc l'ordre de grandeur donné au tableau 1.2.

Modèle de diffusion

On considère maintenant la conservation des espèces. Dans le repère lié à la tuyère, la conservation de l'espèce i s'écrit sous sa forme générale :

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot \left(\sum_j D_{ij} \underline{\nabla c_j} + c_i \underline{v} \right) = 0 \quad (2.48)$$

Sur Σ , la vitesse relative de l'espèce i est $\underline{v}_i - \underline{v}$. Avec une réaction d'ordre 1, on a alors la condition limite suivante :

$$\left(\sum_j (-D_{ij} \nabla c_j) + c_i (\underline{w} - \underline{v}) \right) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = \nu_i k_i c_i \quad (2.49)$$

Le but de cette partie est de quantifier l'erreur qui est faite lorsque les aspects multicomposants du système sont négligés. Pour cela, on considère ici le transport par diffusion d'un mélange gazeux. La diffusion se déroule dans la phase fluide homogène γ . Aucune réaction chimique ne se produit dans la phase γ et la paroi Σ est imperméable. Plusieurs réactions chimiques hétérogènes se déroulent à l'interface Σ . Conformément aux observations précédentes, le système considéré est isotherme et isobare.

Pour illustrer l'étude, on choisit un cas 1D où z est la variable d'espace telle que l'interface Σ occupe la position $z_{\gamma\kappa}$ et le haut de la couche limite soit en $z = 0$. Durant un tir, le recul de la paroi est de l'ordre du millimètre. La variation relative de la section de la tuyère est donc faible. On peut donc considérer que durant le tir les épaisseurs de couche limites sont conservées. Pour étudier le recul de la paroi, on se place donc dans un repère local qui accompagne la paroi. Ce repère se déplace donc à la vitesse \underline{v} .

On introduit alors (X) la matrice colonne des fractions molaires, (J_z) celle des flux suivant \underline{e}_z . On introduit $[D]$ la matrice des coefficients de diffusion binaire. Dans un problème à n espèces, il n'y a que $n - 1$ variables de concentration indépendantes car $\sum_i x_i = 1$. Les colonnes définies plus haut ont donc $n - 1$ lignes. L'équation 2.4 devient alors :

$$(J_z) = -c_t [D] \partial_z (X) \quad (2.50)$$

En $z = 0$, on suppose que les fractions molaires sont connues. On a alors :

$$(X)(z = 0) = (X_0) \quad (2.51)$$

Dans le repère mobile, la vitesse molaire moyenne est $w - v$. On considère ici le cas où la couche limite alimente la paroi de telle sorte que le fluide accompagne le recul : $w = v$. Il n'y a donc plus d'écoulement relativement à la paroi. Ce cas est l'analogie pour une paroi fixe de l'absence d'écoulement. Ce cas d'étude va nous permettre d'étudier un transport purement convectif. La condition limite s'écrit alors dans le repère mobile :

$$-c_t [D] \partial_z (X)|_{z=z_{\gamma\kappa}} = c_t [K] \cdot (X)(z_{\gamma\kappa}) \quad (2.52)$$

On recherche donc dans le repère mobile, les champs de concentration correspondant à une diffusion pure. On suppose dans un premier temps que $[D]$ ne dépend pas de (X) .

Sous ces hypothèses, la conservation du flux s'écrit :

$$\partial_z (N_z) = -c_t [D] \partial_{z^2}^2 (X) = 0 \quad (2.53)$$

2.3 Modèles d'ablation

Le champ de concentration ainsi obtenu est bien linéaire et peut être mis sous la forme :

$$(X) = (X_0) + z(dX) \quad (2.54)$$

où (X_0) et (dX) sont des colonnes de scalaires. La colonne (X_0) est connue à partir des concentrations en $z = 0$. On obtient (dX) en utilisant l'équation à l'interface 2.52. On a alors :

$$[D].(dX) = [K].((X_0) + z_{\gamma\kappa}(dX)) \quad (2.55)$$

On en déduit :

$$(dX) = ([D] + z_{\gamma\kappa}[K])^{-1}.[K].(X_0) \quad (2.56)$$

On peut alors calculer le champ de concentration à la paroi (X_p^0) . On introduit maintenant la variation de $[D]$ sous la forme :

$$[D] = [D^0] + \frac{z}{z_{\gamma\kappa}}([D^p] - [D^0]) \quad (2.57)$$

où $[D^0]$ est la matrice calculée à partir de (X) et $[D^p]$ celle calculée à partir de (X_p^0) . Le champ de concentration est alors perturbé et devient :

$$(X) = (X_0) + z(dX) + z^2(E) + o(z^2) \quad (2.58)$$

La conservation du flux s'écrit désormais :

$$(\partial_z[D]).\partial_z(X) + [D].\partial_{z^2}^2(X) = 0 \quad (2.59)$$

En limitant le calcul aux termes d'ordre zéro en z , on a :

$$\frac{1}{z_{\gamma\kappa}}([D^p] - [D^0]).(dX) + 2[D^0].(E) = 0 \quad (2.60)$$

On en déduit alors la perturbation (E) :

$$(E) = -\frac{1}{2z_{\gamma\kappa}}([D^0])^{-1}([D^p] - [D^0]).(dX) \quad (2.61)$$

On calcule finalement le vecteur concentration à la paroi (X_p) :

$$(X_p) = (X_0) + z_{\gamma\kappa}(dX) + z_{\gamma\kappa}^2(E) + o(z^2) \quad (2.62)$$

Appliquons ce calcul à notre cas d'étude. Tout d'abord, revenons sur la composition du mélange gazeux. On estime qu'au-delà de la couche limite le mélange est celui obtenu à l'équilibre chimique. Le mélange donné tableau 2.1 par Borie et al. (1990) a une masse molaire moyenne de 18.64 g.mol^{-1} . Pour simplifier l'étude, le mélange complet est remplacé par un mélange équivalent comportant moins d'espèces. Ce mélange doit cependant respecter les critères suivants :

Espèces	Fraction molaire	Masse molaire (<i>g/mol</i>)
H_2	31.3	2
CO	23.2	28
HCl	14.7	36.5
H_2O	12.5	18
N_2	8.6	14
H	4.8	1
Cl	1.5	35.5
CO_2	1.2	44

TAB. 2.1 – Composition des produits de combustion.

Espèces	Fraction Molaire	Masse Molaire
H_2	31.3	2
CO	23.2	28
H_2O	12.5	18
CO_2	1.2	44
Eq	31.8	27.5

TAB. 2.2 – Composition du mélange équivalent.

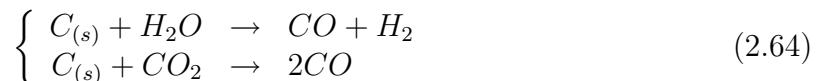
- Les espèces qui figurent dans les bilans réactionnels doivent être conservées ;
- La densité du gaz doit être conservée pour garantir une bonne description de la dynamique de celui-ci.

On obtient alors le gaz décrit au tableau 2.2 où Eq désigne la molécule équivalente permettant de respecter les contraintes énoncées plus haut.

L'espèce Eq étant fictive, ce sera notre espèce n qui joue le rôle de solvant. On pose alors :

$$(X) = \begin{bmatrix} x_{H_2} \\ x_{CO} \\ x_{H_2O} \\ x_{CO_2} \end{bmatrix} \quad (2.63)$$

La matrice (X_0) est donnée par le tableau 2.2. Les réactions chimiques sont les suivantes :



et ont une même cinétique associée k . On en déduit la matrice cinétique $[K]$:

$$[K] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -k & 0 \\ 0 & 0 & -k & -2k \\ 0 & 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k \end{bmatrix} \quad (2.65)$$

2.3 Modèles d'ablation

Il faut maintenant calculer la matrice de diffusion $[D]$. Pour cela, on utilise les routines développées par D. Chenu Quintard et al. (2006). Elles reposent sur la corrélation proposée par Bird et al. (1960). On obtient ainsi pour $T = 300 \text{ K}$ et $p = 5 \text{ MPa}$:

$$[D] = \begin{bmatrix} +2.0E-5 & -3.7E-7 & -2.6E-8 & -6.5E-8 \\ -4.2E-6 & +9.3E-6 & -2.9E-7 & +1.8E-7 \\ -2.1E-6 & -1.4E-7 & +9.1E-6 & +6.2E-8 \\ -2.3E-7 & -1.4E-8 & -1.8E-8 & +7.9E-6 \end{bmatrix} \text{m}^2.\text{s}^{-1} \quad (2.66)$$

Avec $z_{\gamma\kappa} = 10^{-5} \text{ m}$ et $k = 5 \text{ m.s}^{-1}$, on calcule (dX) à partir de l'équation 2.56. On obtient alors les profils donnés par la figure 2.3.1. On en déduit (X_p^0) à la paroi :

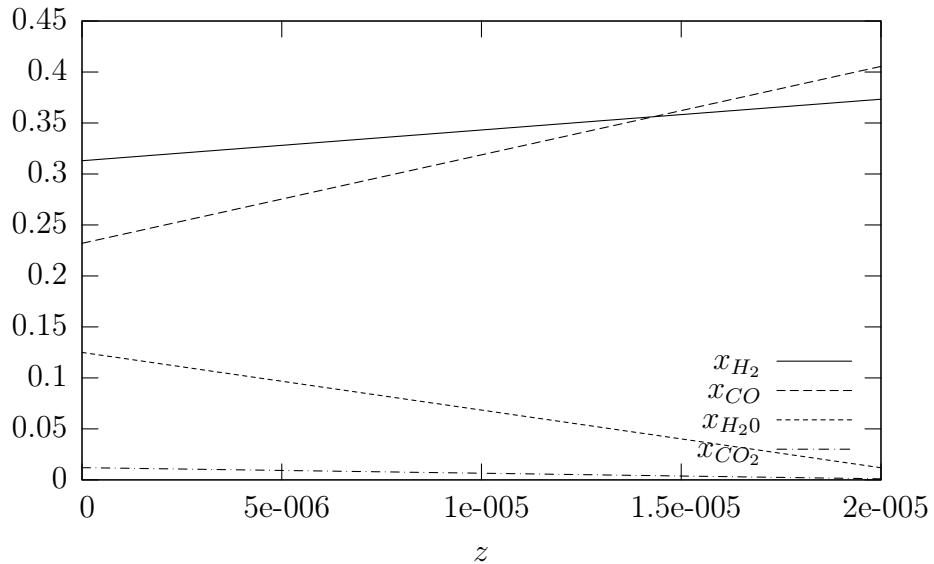


FIG. 2.7 – Profils linéaires de concentration dans une couche limite laminaire. (Haut de la couche limite en $z = 0$)

$$(X_p^0) = \begin{bmatrix} 0.37 \\ 0.40 \\ 2.2 \cdot 10^{-2} \\ 1.0 \cdot 10^{-3} \end{bmatrix} \text{mol.m}^{-3} \quad (2.67)$$

On calcule alors la perturbation (E) à partir de l'équation 2.61. On obtient ainsi :

$$z_{\gamma\kappa}^2 (E) = \begin{bmatrix} 3.3 \cdot 10^{-4} \\ 4.3 \cdot 10^{-3} \\ 3.8 \cdot 10^{-3} \\ 2.8 \cdot 10^{-4} \end{bmatrix} \text{mol.m}^{-3} \quad (2.68)$$

Ce terme est bien d'un ordre inférieur à (X_p^0) . Le calcul par perturbation est donc valide et donne finalement :

$$(X_p) = \begin{bmatrix} 0.37 \\ 0.39 \\ 1.8 \cdot 10^{-2} \\ 2.1 \cdot 10^{-3} \end{bmatrix} \text{ mol.m}^{-3} \quad (2.69)$$

On désire maintenant remplacer le système multicomposant par un système binaire. La réaction s'écrit alors :



$$(2.71)$$

Le système étant binaire, il n'a qu'un degré de liberté. On a pour la conservation du flux de c_{ox} :

$$\partial_{z^2}^2 c_{ox} = 0 \quad (2.72)$$

avec comme condition limite :

$$D_{Ox-Red} \partial_z c_{ox} = k c_{ox} \quad (2.73)$$

On souhaite représenter la quantité totale d'oxydant. On choisit donc $c_{ox,0} = c_{H_2O,0} + c_{CO_2,0}$. Le coefficient de diffusion est pris égal au coefficient de $[D]$ qui associe le flux de c_{H_2O} au gradient de c_{H_2O} . Compte tenu de la numérotation des espèces choisies, on a :

$$D_{Ox-Red} = [D]_{3,3} = 9.1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \quad (2.74)$$

Avec les mêmes paramètres que ceux que nous avons utilisés dans le cas multiconstituant, on a la concentration pariétale :

$$c_{ox,p} = 2.2 \cdot 10^{-2} \text{ mol.m}^{-3} \quad (2.75)$$

On peut alors comparer à la concentration totale obtenue dans le cas multiconstituant. On obtient alors le rapport :

$$\frac{c_{H_2O,p} + c_{CO_2,p}}{c_{ox,p}} = 0.95 \quad (2.76)$$

Le flux consommé est donc sous-estimé d'environ 5%. Cette erreur est acceptable compte tenu de la méconnaissance de la réactivité du matériau. On utilisera donc par la suite une seule espèce de concentration c représentant l'ensemble des espèces oxydantes. Le coefficient de diffusion associé sera alors $D = 9 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Les réactifs représentent au maximum une fraction molaire de 13.2% ce qui donne une fraction massique de 17%. Nous faisons alors le choix de traiter c comme une espèce diluée. On suppose alors que c n'a pas d'influence sur les propriétés du fluide. Dans

ce cas la vitesse molaire \underline{w} est égale à la vitesse barycentrique du mélange \underline{v} . Le bilan pour le réactif est alors dans le repère global :

$$\partial_t c - D\Delta c + \underline{v} \cdot \nabla \underline{c} = 0 \quad (2.77)$$

avec la condition à la paroi :

$$(c(\underline{v} - \underline{v}) - D\nabla \underline{c}) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - k c = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.78)$$

En regroupant les différents bilans, le modèle d'ablation avec écoulement laminaire incompressible et isobare, est alors le suivant :

$$T = T_0 \quad (2.79)$$

$$p = p_0 \quad (2.80)$$

$$\partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} - \nu \Delta \underline{v} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (2.81)$$

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (2.82)$$

$$\partial_t c - D\Delta c + \underline{v} \cdot \nabla \underline{c} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (2.83)$$

$$\underline{v} - (\underline{v} \cdot \underline{n}) \underline{n} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.84)$$

$$(c(\underline{v} - \underline{v}) - D\nabla \underline{c}) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} - k c = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.85)$$

$$\underline{v} - (\Upsilon k c) \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.86)$$

2.3.2 Modèle pour la géométrie du composite

La description des matériaux aux différentes échelles a été donnée au paragraphe 1.2.2. Aux échelles microscopique et mésoscopique, le matériau est décrit par la répétition périodique d'un motif élémentaire. Ce motif est composé de phases différentes (fibre, matrice, ...). Chacune de ces phases sera supposée homogène. Dans notre application, les phases sont de densités intrinsèques proches. On supposera donc que le volume molaire est uniforme dans le solide.

Les pièces de col ont une symétrie de révolution. Le rayon de courbure est de l'ordre du décimètre. Ce rayon est grand devant les échelles l_m et l_μ . La surface du composite à ces échelles sera donc non-courbée. De plus, le procédé d'usinage des pièces est tel que la surface des pièces peut être considérée comme initialement lisse même à l'échelle microscopique.

Pour explorer théoriquement les couplages identifiés précédemment, un modèle simple de composite est suffisant. A l'échelle microscopique, le système sera composé d'une fibre perpendiculaire à la surface initiale entourée d'une matrice, comme illustré sur la figure 2.3. A l'échelle mésoscopique, un modèle simple analogue à celui de l'échelle microscopique peut être utilisé dans les développements théoriques. Ainsi dans les développements théoriques la géométrie des deux milieux sera identique. Pour procéder aux applications, on prend en compte l'architecture du composite. Pour le 4D, la structure peut être décrite analytiquement et des matériaux virtuels peuvent facilement être modélisés comme sur la figure 1.15(a). Les matériaux tissés sont plus difficiles à représenter de la sorte. Les calculs réalisés à l'échelle mésoscopique sur les matériaux tissés utiliseront directement des tomographies .

2.4 Changements d'échelle : objectifs et outils

Comme le cas de l'ablation des composites C/C l'illustre bien, de nombreux phénomènes physiques reposent sur des échelles multiples qui ne peuvent être prises en compte simultanément. On procède alors par changements d'échelle successifs, chaque étape étudiant un système dont l'échelle est de l'ordre de grandeur de celle des hétérogénéités.

Le but des différentes méthodes de changement d'échelle est de dégager le comportement moyen d'un système à une échelle donnée indépendamment des échelles supérieures et inférieures. Une telle approche ne peut s'appliquer qu'à des systèmes où il existe des échelles découpées.

Notre système se prête bien à cet analyse puisque les échelles d'espace sont bien séparées :

$$l_\mu \ll l_m \ll l_M \quad (2.87)$$

Nous avons de plus démontré que les temps caractéristiques des phénomènes autorisaient une telle approche. Il est donc théoriquement possible d'obtenir le comportement de la maille macroscopique par étude du système mésoscopique et celui de la maille mésoscopique à partir du système microscopique de façon découpée. Le changement d'échelle peut être possible pour un nombre réduit de paramètres du milieu. On procède alors à des simulations mixtes en échelle. Les problèmes aux différentes échelles sont couplés partiellement et résolus simultanément.

2.4.1 Notion de milieu effectif

Les approches par changement d'échelle sont très développées dans le calcul des propriétés de transport effectives de milieux poreux et fracturés. Ces recherches ont été motivées en particulier par les applications hydrologiques et pétrolières. Certaines études ont abordés des problèmes de transport avec dissolution du milieu poreux. On citera par exemple Quintard and Whitaker (1999) et Golfier et al. (2002).

Ces approches permettent d'obtenir un milieu dit *milieu effectif* qui reproduit le comportement moyen d'un milieu hétérogène. De plus, le milieu effectif est celui qui, placé dans les mêmes conditions, a le même comportement moyen que le milieu détaillé. Comme nous aurons l'occasion de le montrer, les propriétés effectives ne sont pas intrinsèques au milieu et dépendent des conditions de sollicitation. Notre problème étant un problème d'interface, on parlera de *surface effective*.

2.4.2 Surface effective pour les composites C/C des cols de tuyères

Dans notre cas, le milieu présente deux caractères hétérogènes : sa rugosité et la non-uniformité de sa réactivité. Ces deux caractères provoquent une perturbation du champ de concentration et de l'écoulement. Nous souhaitons conserver les propriétés moyennes de la vitesse et de la concentration. La surface effective recherchée

est donc lisse et de réactivité uniforme. Ses propriétés sont telles que, placée dans les mêmes conditions que le modèle détaillé, elle amène aux mêmes champs de vitesse et de concentration lorsque le système est considéré à une échelle grande devant celle des hétérogénéités.

D'après les échelles que nous avons définies plus haut, le milieu effectif macroscopique est obtenu par deux changements d'échelle successifs. Le premier changement d'échelle, de l'échelle microscopique à l'échelle mésoscopique est représenté figure 2.8(a). On obtient alors le fil ou la baguette effectif. Le second changement d'échelle

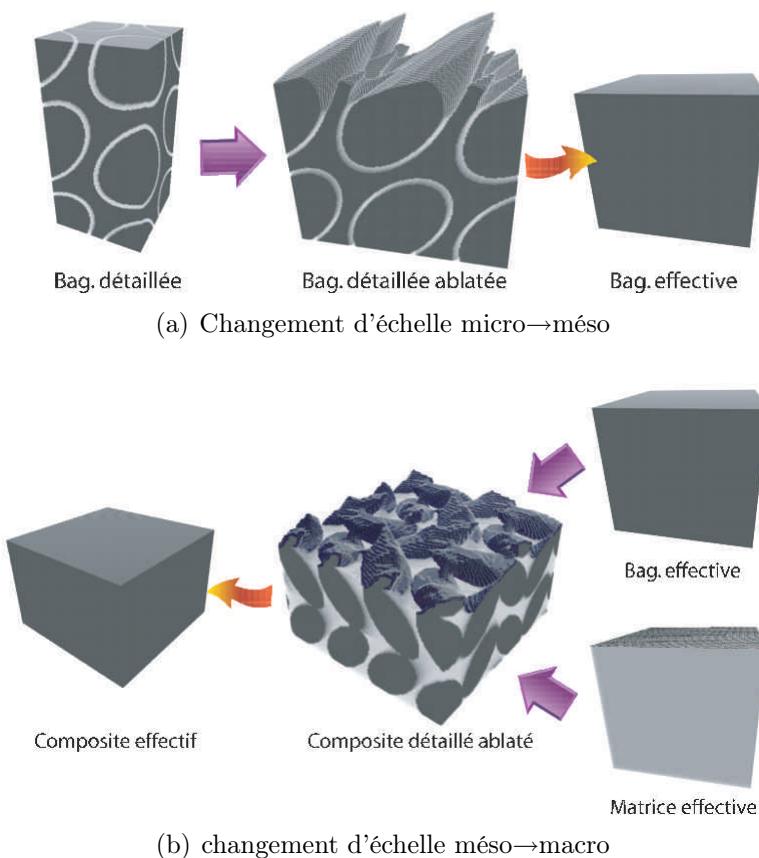


FIG. 2.8 – Changements d'échelle.

permet d'obtenir le comportement macroscopique à partir du fil/baguette effectif et de la matrice effectives ; ce changement d'échelle est représenté figure 2.8(b).

2.4.3 Approches de changement d'échelle

Plusieurs méthodes peuvent être employées pour obtenir le comportement moyen du composite. La plus simple dans son principe est la déduction du comportement moyen du système à partir de la simulation numérique directe. D'autres approches, plus théoriques, sont rassemblées sous le qualificatif d'homogénéisation. Nous ne

cherchons pas à donner une définition générale de ces méthodes ni à les comparer de façon exhaustive. Nous illustrons leur principe à partir des études dont le contexte est proche de la nôtre et qui serviront de base à nos travaux.

Ces méthodes recherchent l'obtention d'équations macroscopiques en tentant de représenter le champ microscopique par un champ moyen et des fluctuations. Si on arrive à relier (ce qui n'est pas toujours possible) les fluctuations à la petite échelle au champ moyen et ses dérivées, on obtient une forme macroscopique *fermée* des équations qui peut être ensuite utilisée de manière efficace pour traiter les problèmes à plus grande échelle. Plusieurs techniques et points de vue ont été utilisés : techniques d'homogénéisation (Bensoussan et al., 1978; Sanchez-Palencia, 1974), des techniques de prise de moyenne volumique (Whitaker, 1967; Marle, 1967; Quintard and Whitaker, 1993; Whitaker, 1999), approche stochastique (Dagan, 1989). Le problème de l'introduction de surfaces effectives emprunte en partie à cette problématique. En particulier, l'écoulement le long de la surface peut-être traité comme un problème quasi-périodique. Mais il n'en est pas de même cependant pour les variations perpendiculaires à la paroi. Diverses approches ont été utilisées (Achdou et al., 1998b,a; Wood et al., 2000) qui seront commentées plus loin. Le résultat le plus proche, au départ, de notre problématique correspond aux travaux de Wood et al. Wood et al. (2000) qui ont considéré un problème de diffusion au-dessus d'une paroi présentant un réseau périodique de sites catalytiques.

Prise de moyenne volumique appliquée au concept de surface effective

Notre étude se place dans la continuité théorique de plusieurs études portant sur l'obtention de propriétés effectives pour des surfaces dans le contexte de milieux poreux, en particulier celle de Wood et al. Wood et al. (2000). Dans cette étude, le cas d'un milieu poreux où la distribution des sites catalytiques est non-uniforme est abordé. Une représentation du système est donnée figure 2.9. Le problème traité est

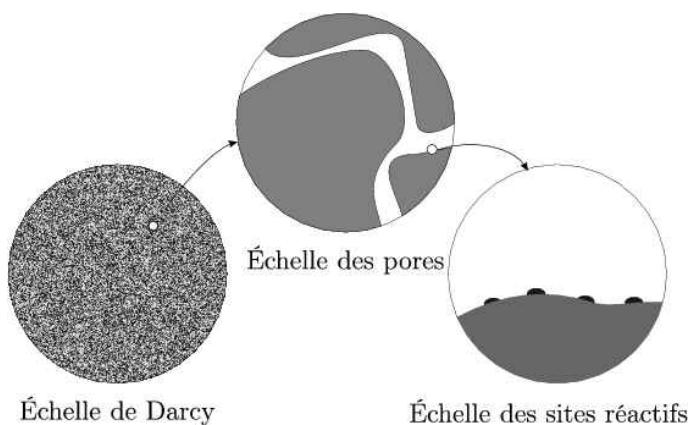


FIG. 2.9 – Représentation multi-échelle d'un milieu poreux périodique de réactivité non uniforme.

celui de la diffusion binaire d'une espèce et de sa réaction catalytique à la surface.

La surface est formée par une distribution de zones réactives et non-réactives. Il n'y a ni écoulement, ni récession de la paroi. Avec les nombres définis plus haut ce cas correspond pour nous à $Pe = 0$, $\tilde{K} = \infty$ et un temps d'étude petit devant le temps de récession. Le problème mathématique est résolu par la méthode de prise de moyenne volumique développé par Whitaker (1999). La variable caractéristique du problème est le module de Thiele qui joue un rôle analogue au nombre de Damköhler que nous avons défini. Wood et al. (2000) montre que :

- Lorsque le module de Thiele est petit devant l'unité, ($Da \ll 1$) la réactivité effective de la surface est donnée par $\langle k \rangle$, la moyenne arithmétique des réactivités.
- Lorsque le module de Thiele est grand devant l'unité, ($Da \gg 1$) la réactivité effective de la surface tend vers 0.

Nous reviendrons sur cette étude au chapitre 3.1 pour montrer les différences et les points communs avec nos résultats.

L'approche par prise de moyenne volumique a le grand intérêt de construire des variables qui ont un sens physique et peuvent ainsi être mesurées expérimentalement. Cependant, comme nous allons le voir, cette méthode ne permet pas de résoudre notre problème dans le cas général. Le problème de l'ablation que nous souhaitons traiter, diffère en effet de celui traité par Wood et al. (2000) notamment par l'aspect rugueux de la surface.

Il n'est alors pas possible d'aborder le problème d'une surface rugueuse simplement avec les outils de prise de moyenne volumique. En particulier, les variations rapides de géométrie près de la surface en l'absence de périodicité au moins dans la direction normale pose des problèmes mathématiques quant au comportement correct des valeurs moyennes et de leurs dérivées. D'autres approches théoriques peuvent par contre être suivies :

- La décomposition de domaines n'est pas une méthode d'homogénéisation en soit mais plutôt une transformation du système étudié. Pour cela le système est découpé en un domaine où les perturbations dues aux non-uniformités de la paroi sont entièrement amorties et en sous domaines qui contiennent l'interface et où les gradients sont importants. Les sous-domaines sont alors reliés par la continuité des grandeurs et de leur flux à la frontière. On obtient alors des conditions limites fictives pour le domaine homogène. Dans le sous domaine, il faut toujours construire un problème homogénéisé. Il peut par exemple être homogénéisé par la méthode des développements asymptotiques. Cette approche est particulièrement développée pour la construction de lois de paroi. Dans notre étude nous utiliserons les travaux de Achdou et al. (1998a,b) obtenus pour un écoulement au-dessus d'une paroi rugueuse pour étendre ce résultat au cas d'une surface rugueuse réactive. Cette méthode suppose la stationnarité de la géométrie à la petite échelle. Or, dans le cas où le temps d'étude est comparable au temps de récession, la surface d'interface évolue vers une rugosité *a priori* inconnue. Il n'est alors plus possible d'utiliser les développements formels liés à cette décomposition.
- La simulation numérique directe correspond à la simulation du milieu détaillé

à la petite échelle. Le plus souvent, des conditions de périodicité permettent de limiter la taille du domaine d'étude. Cette approche est souvent complexe à mettre en œuvre numériquement. Chaque cas doit être calculé sans bénéfice des cas déjà explorés. Cette approche nous permettra d'étudier le cas de surfaces récessives. Plusieurs méthodes de simulation couplant le calcul de la récession et de l'écoulement ont été étudiées. Leur développement n'a toute fois pas permis la mise au point d'un outil satisfaisant couplant calcul d'un écoulement et récession (Véran, 2006) dans la perspective d'une étude multi-échelle. Nous avons cependant développé un outil numérique couplant diffusion-réaction et récession. Cet outil est basé sur une méthode VOF. La méthode numérique utilisée ainsi que les résultats obtenus par simulation numérique sont donnés au chapitre 5.

2.5 Plan d'étude

Les couplages détaillés figure 2.4 sont nombreux. C'est une des causes de l'incompréhension relative du phénomène d'ablation. Afin de comprendre les effets de chacun des paramètres, il est souhaitable de construire des modèles de complexité croissante. De plus, le couplage de la réaction avec la rugosité implique un calcul explicite et couplé de l'évolution de la paroi durant l'ablation. Nous ne disposons pas d'outil numérique performant permettant de simuler l'évolution de la paroi et de calculer un écoulement au-dessus de cette dernière.

Il est proposé de scinder le problème des couplages en deux sous-problèmes :

- Un premier sous-modèle décrit l'ablation lorsque la surface considérée est non-récessive. La rugosité de la surface est constante au-cours du temps. Il y a un écoulement au-dessus de la paroi. Les couplages retenus sont ceux donnés par la figure 2.10(a). Dans ce modèle la vitesse de l'interface est nulle : $\underline{v} = 0$. Ceci correspond dans le cas général à un temps d'étude petit devant le temps caractéristique de récession de la paroi. Le modèle d'ablation est alors décrit par les équations suivantes :

$$T = T_0 \quad (2.88)$$

$$p = p_0 \quad (2.89)$$

$$\partial_t \underline{u} = -(\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} + \nu \Delta \underline{u} \text{ sur } \Omega \quad (2.90)$$

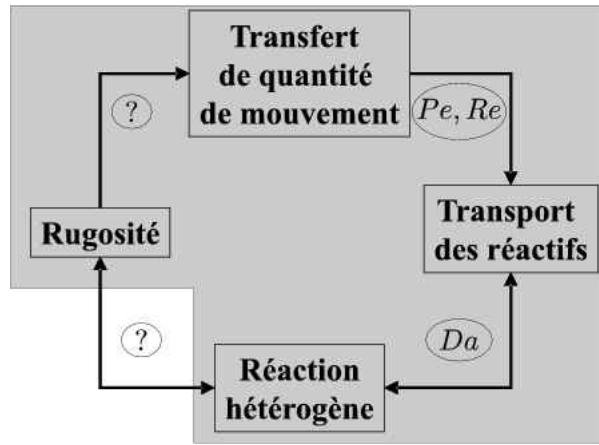
$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (2.91)$$

$$\partial_t c = D \Delta c - \underline{u} \cdot \nabla c \text{ sur } \Omega \quad (2.92)$$

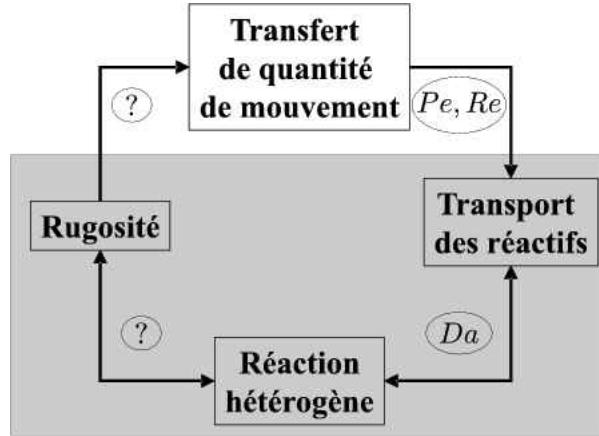
$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.93)$$

$$D \nabla c \cdot \underline{n} = k c \text{ sur } \Sigma \quad (2.94)$$

- Dans un second sous-modèle, la surface est récessive. La rugosité évolue au-cours du temps. Il n'y a plus d'écoulement au-dessus de la paroi. Les couplages retenus sont ceux donnés par la figure 2.10(b). Dans ce modèle, la vitesse de l'écoulement est nulle, $Pe = 0$, le modèle d'ablation est alors décrit par les



(a) Surface non-récessive



(b) Surface récessive

FIG. 2.10 – Couplages retenus pour les différents cas d’ablation traités.

équations suivantes :

$$T = T_0 \quad (2.95)$$

$$p = p_0 \quad (2.96)$$

$$\partial_t c = D \Delta c \text{ sur } \Omega \quad (2.97)$$

$$(c_{\text{blue}} + D \nabla c) \cdot n_{\gamma\kappa} + k c = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.98)$$

$$\underline{y} - (\Upsilon k c) n_{\gamma\kappa} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (2.99)$$

Dans chacun de ces deux sous-modèles, les couplages sont encore nombreux. Afin de mieux comprendre l'influence de chacun d'eux sur le comportement moyen de la surface, ils seront à leur tour dégradés en modèles plus simples. Ainsi, notre étude s'articulera autour de la construction, pour les surfaces non-récessives puis récessives, de modèles d'ablation de complexité croissante ainsi qu'autour du développement des approches et des outils qui permettent d'en dégager le comportement effectif. Le chapitre 3 sera consacré à l'étude des surfaces non-récessives suivant deux cas :

- Le cas d'une surface lisse non-uniforme. Ce cas sera résolu par une approche de prise de moyenne. Cette étude permettra de montrer l'impact des transport diffusifs et convectifs sur la réactivité effective du composite.
- Le cas d'une surface rugueuse. La méthode de décomposition de domaine proposée par Achdou et al. (1998a) pour obtenir la surface effective vis-à-vis du champ de vitesse sera exposée puis étendue au cas d'une surface réactive. Cette étude permettra de vérifier les tendances observées dans le cas lisse.

Dans les chapitres suivants, on considérera le cas d'une surface récessive en l'absence d'écoulement. Pour cela :

- Un premier modèle d'ablation avec récession sera développé dans le cas du régime réactif ($Da \ll 1$). Ce modèle permettra alors de découpler la récession du transfert de masse. Dans ce cas on réalisera une étude analytique complète. Un second modèle permettra d'introduire la compétition entre la diffusion et la réaction. Dans ce modèle le flux sera contraint à être orthogonal à la paroi moyenne. On obtiendra notamment, de façon analytique, la réactivité effective du composite dans les cas asymptotiques $Da \ll 1$ et $Da \gg 1$.
- Pour aborder de façon complète le couplage entre la diffusion et la récession, un modèle numérique sera développé et implanté en F90. A partir du code ainsi développé, le régime mixte $Da \sim 1$ sera étudié numériquement.

Les développements théoriques réalisés dans cette partie seront appliqués aux composites C/C dans une dernière partie. On y développera tout d'abord une méthode d'identification des réactivités à l'échelle microscopique par approche inverse. On calculera ensuite par simulation directe le comportement effectif à l'échelle mésoscopique de composites C/C d'architectures 4D et tissés.

Deuxième partie

Modélisation de surfaces réactives hétérogènes

Chapitre 3

Modélisation de surfaces non-récessives

Notre stratégie de modélisation repose sur l'étude de l'ablation par l'utilisation de modèles de complexité croissante. La première famille de modèles que nous avons définie au chapitre 2, décrit l'ablation pour des temps d'études petits devant celui de la récession de la paroi. Durant ce temps d'étude, la surface reste figée et sa rugosité n'évolue pas, on parle alors de surface non-récessive. De plus, nous choisissons ici un temps d'étude long devant les temps caractéristiques des transports de sorte que les champs de vitesse et de concentration soient stationnaires. L'échelle des temps présentée figure 2.6 montre qu'un tel temps existe bien. Ainsi à l'échelle microscopique un temps t entre $10^{-4} s$ et $10^{-2} s$ suivant la valeur de k , satisfait $t_{Réaction} \ll t \ll t_{Récession}$. Comme nous l'avons déjà justifié nous ne cherchons pas à calculer un écoulement turbulent. Ainsi, les écoulements étudiés dans cette partie seront laminaires et incompressibles.

Dans ce chapitre, la vitesse de l'interface est nulle : $\underline{v} = 0$. Les vitesses exprimées dans un repère lié à la paroi ou à la tuyère sont donc strictement égales. On utilisera alors la vitesse \underline{u} liée à la paroi.

Suivant les observations que nous avons faites dans la première partie au chapitre 2, le système modélisé est isotherme et isobare. Sous ces hypothèses, le modèle d'ablation est alors décrit par les équations suivantes :

$$T = T_0 \tag{3.1}$$

$$p = p_0 \tag{3.2}$$

$$\partial_t \underline{u} = -(\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} + \nu \Delta \underline{u} \text{ sur } \Omega \tag{3.3}$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega \tag{3.4}$$

$$\partial_t c = D \Delta c - \underline{u} \cdot \nabla c \text{ sur } \Omega \tag{3.5}$$

$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma \tag{3.6}$$

$$D \nabla c \cdot \underline{n} = k c \text{ sur } \Sigma \tag{3.7}$$

Dans ce chapitre consacré à l'étude des surfaces non-récessives, une première partie est consacrée au cas d'une surface lisse. Cette étude correspond à la recherche de la réactivité à l'état initial de notre composite.

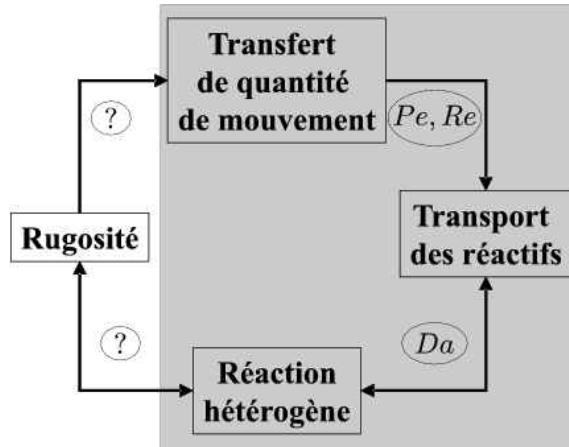


FIG. 3.1 – Couplages retenus dans le cadre de l'étude d'une surface lisse non-récessive.

Le cas des surfaces rugueuses est abordé dans une seconde partie. L'obtention de la surface effective est alors plus complexe puisqu'il porte alors sur le champ de vitesse et de concentration. Cette étude a pour but d'illustrer la méthode d'obtention de surfaces effectives dans ce cas et de vérifier les tendances observées dans le cas lisse.

3.1 Surface lisse

Notre étude du comportement effectif de surfaces non-récessives débute par le cas d'une paroi lisse. Les couplages alors retenus sont ceux donnés par le schéma présenté figure 3.1

Ce premier modèle relatif au comportement initial de la paroi avant qu'elle ne recule, permet d'étudier trois types d'effets sur la réactivité effective.

Le premier effet étudié est la compétition entre la diffusion et la réaction traduite par le nombre de Damköhler, Da . Ce couplage a déjà été étudié par Wood et al. (2000), pour un contraste de réactivité infini : $K = \infty$. Dans cet article, Wood et al. (2000) montre que la compétition diffusion/réaction amène à une réduction de la réactivité effective k_{eff} , lorsque le nombre de Damköhler augmente. On passe alors de $k_{eff} = \langle k \rangle$, la moyenne arithmétique des réactivités pour $Da \ll 1$ à une limite nulle pour $Da \gg 1$. Cette étude étant équivalente au cas considéré ici, en l'absence d'écoulement, nous vérifierons la cohérence de nos résultats avec ceux exposés par Wood et al. (2000).

Le second effet étudié est la compétition entre la convection et la diffusion. Cet effet a été étudié par simulation numérique par Juhasz and Deen (1991). Cependant les résultats obtenus doivent être regardés avec un œil critique. En effet les cellules utilisées dans le calcul ne respectent manifestement pas les conditions d'amortissement des perturbations. Des cellules où la hauteur est petite devant la période de la non-uniformité ne peuvent pas convenir au calcul du comportement effectif. Cependant, nous vérifierons que les tendances obtenues ici sont bien en accord avec

3.1 Surface lisse

celles observées par Juhasz and Deen (1991).

Le troisième effet étudié ici est celui de la structure de l'écoulement sur la réactivité effective. Cette structure est traduite par le nombre de Reynolds dont une définition locale sera introduite.

Sur le plan théorique, cette étude se place dans la continuité de celle de Wood et al. (2000) et généralise l'étude faite sans écoulement de la variation de k_{eff} en fonction de Da à l'étude de $k_{eff} = f(Da, Pe, Re, \tilde{K})$. Le problème mathématique est ainsi résolu par prise de moyenne volumique. Dans le cas lisse, il existe une solution analytique pour la couche limite de vitesse dite *solution de Blasius*. Il n'y aura donc pas dans ce chapitre de résolution explicite de l'équation de Navier-Stokes.

3.1.1 Modèle étudié

Nous considérons ici le cas d'une espèce gazeuse de concentration c diluée dans un fluide. La concentration c n'influe pas sur les propriétés mécaniques du fluide. Le transport de quantité de mouvement est ainsi indépendant du problème de transport de masse. Le coefficient de diffusion D est uniforme dans le fluide. Nous considérons une réaction d'ordre un à la paroi. La paroi est celle d'un tube dont nous négligeons la courbure. De plus, nous supposons que la longueur du tube est grande devant la période spatiale de variation de la réactivité de la paroi l comme représenté figure 3.2.

Un bilan de quantité de matière sur un volume V est fait. On a :

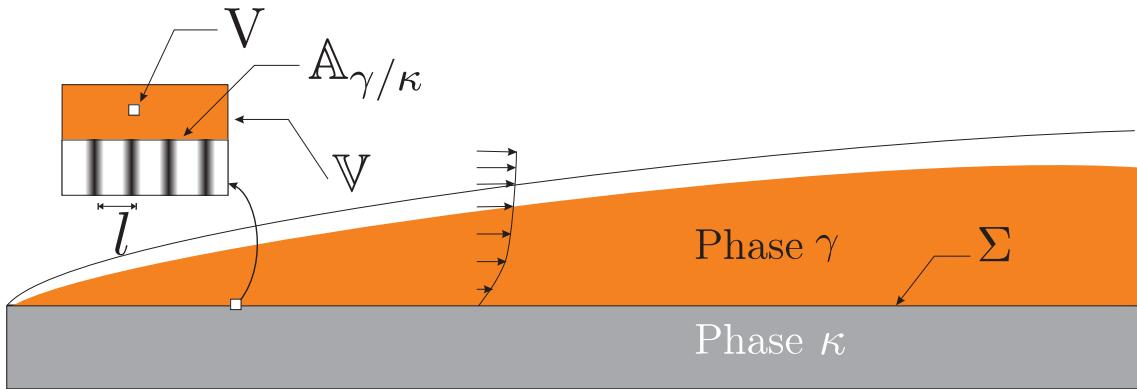


FIG. 3.2 – Iso-contours de concentration et distribution de vitesse au dessus d'une paroi hétérogène.

$$\int_V \nabla \cdot \underline{N} dV = \int_V R dV \quad (3.8)$$

où \underline{N} est le flux de matière en $mol.m^{-2}.s^{-1}$ et R est le taux de production molaire en $mol.m^{-3}.s^{-1}$. Notre système comporte deux phases. Une phase fluide notée γ et une phase solide notée κ . Lorsque V est strictement contenu dans γ ou κ , on a, à l'échelle du point :

$$\nabla \cdot \underline{N}_\beta = R_\beta \text{ en tout point} \quad (3.9)$$

avec $\beta = \gamma, \kappa$. Lorsque V franchit l'interface γ/κ , on définit V_γ le volume contenu dans V appartenant à la phase γ . Le volume V_κ est celui relatif à la phase κ . On a ainsi dans les sous-volumes :

$$\int_{V_\gamma} \nabla \cdot \underline{N}_\gamma dV = \int_{V_\gamma} R_\gamma dV \quad (3.10)$$

$$\int_{V_\kappa} \nabla \cdot \underline{N}_\kappa dV = \int_{V_\kappa} R_\kappa dV \quad (3.11)$$

On a de plus $V = V_\kappa + V_\gamma$. On définit de même A_γ et A_κ les surfaces strictement contenues dans γ et κ telles que $A = A_\kappa + A_\gamma$ où $A = \partial V$. On introduit alors le saut de flux à l'interface \underline{N}_s tel que :

$$\int_{A_{\gamma\kappa}} \nabla_s \cdot \underline{N}_s dS = \int_V \nabla \cdot \underline{N} dV - \int_{V_\gamma} \nabla \cdot \underline{N}_\gamma dV - \int_{V_\kappa} \nabla \cdot \underline{N}_\kappa dV \quad (3.12)$$

où $A_{\gamma\kappa}$ est la surface d'interface γ/κ . Le saut du taux de réaction est lui défini par :

$$\int_{A_{\gamma\kappa}} R_s dS = \int_V R dV - \int_{V_\gamma} R_\gamma dV - \int_{V_\kappa} R_\kappa dV \quad (3.13)$$

Or en utilisant le théorème de la divergence, on a :

$$\int_{V_\gamma} \nabla \cdot \underline{N}_\gamma dV = \int_{A_\gamma} \underline{N}_\gamma \cdot \underline{n}_\gamma dS + \int_{A_{\gamma\kappa}} \underline{N}_\gamma \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} dS \quad (3.14)$$

$$\int_{V_\kappa} \nabla \cdot \underline{N}_\kappa dV = \int_{A_\kappa} \underline{N}_\kappa \cdot \underline{n}_\kappa dS + \int_{A_{\gamma\kappa}} \underline{N}_\kappa \cdot \underline{n}_{\kappa\gamma} dS \quad (3.15)$$

En utilisant le fait que $\underline{n}_{\gamma\kappa} = -\underline{n}_{\kappa\gamma}$ et en retranchant 3.10 et 3.11 à 3.8, on obtient alors :

$$\int_{A_{\gamma\kappa}} \nabla_s \cdot \underline{N}_s dS = \int_{A_{\gamma\kappa}} R_s dS + \int_{A_{\gamma\kappa}} (\underline{N}_\gamma - \underline{N}_\kappa) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} dS \quad (3.16)$$

Le terme $\nabla_s \cdot \underline{N}_s$ décrit une diffusion surfacique des espèces. Ce terme est négligeable dans les applications visées. De plus si on considère la phase κ imperméable, on a $\underline{N}_\kappa = 0$. En passant à la limite, on obtient ainsi l'équation ponctuelle :

$$R_s + \underline{N}_\gamma \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.17)$$

Dans le cas incompressible, la conservation du flux massique $\rho \underline{u}$ donne :

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (3.18)$$

$$(3.19)$$

La vitesse étant nulle dans κ et sur Σ , on obtient :

$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.20)$$

Le problème à l'échelle du point s'écrit donc :

$$\nabla \cdot \underline{N}_\gamma = R_\gamma \text{ sur } \Omega \quad (3.21)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (3.22)$$

$$R_s + \underline{N}_\gamma \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.23)$$

$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.24)$$

Dans notre problème, le solide est imperméable. On a donc $\underline{N}_\gamma = \underline{N}$. Les équations que nous avons obtenues sont définies à l'échelle de V. Nous devons maintenant calculer le problème moyen à l'échelle du volume élémentaire représentatif \mathbb{V} pour calculer la réactivité effective de la paroi.

3.1.2 Construction théorique de la réactivité effective

Dans cette partie, le problème formé par les équations à l'échelle du point est résolu par prise de moyenne volumique. Pour cela un problème moyen à l'échelle de \mathbb{V} est obtenu par l'introduction d'un opérateur de prise de moyenne. La déviation de la concentration par rapport à cette moyenne est ensuite introduite. La fermeture du problème est faite en couplant les déviations à la petite échelle au comportement moyen.

Prise de moyenne

En nous appuyant sur les considérations faites sur les différentes échelles du problème, nous cherchons à dégager un comportement moyen pour le champ de concentration. Pour cela, nous introduisons l'opérateur de prise de moyenne volumique $\langle * \rangle$ à support compact \mathbb{V} tel que :

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{\mathbb{V}} \int_{\mathbb{V}} \psi dV \quad (3.25)$$

On définit de même les opérateurs $\langle * \rangle^\gamma$ et $\langle * \rangle^\kappa$ relativement aux volumes \mathbb{V}_γ et \mathbb{V}_κ . Nous appliquons sur le volume \mathbb{V} , un raisonnement analogue à celui appliqué au paragraphe 3.1.1 pour le volume V. Lorsque \mathbb{V} est entièrement localisé dans γ , la prise de moyenne de l'équation 3.21 conduit à :

$$\langle \nabla \cdot \underline{N} \rangle = \langle R \rangle \text{ en tout point} \quad (3.26)$$

Soit \mathcal{C} , le champ moyen de concentration dans le fluide tel que :

$$\mathcal{C} = \langle c \rangle \quad (3.27)$$

En exprimant les contributions diffusive et convective du transport, \underline{N} devient :

$$\underline{N} = -D \underline{\nabla c} + \underline{u} c \quad (3.28)$$

En utilisant le théorème de transport, on obtient :

$$\langle \nabla \cdot \underline{N} \rangle = \nabla \cdot (-D \langle \underline{\nabla c} \rangle + \langle \underline{u} c \rangle) + \frac{1}{\mathbb{V}} \left(\int_{\mathbb{A}_{\gamma\kappa}} \underline{N} \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} dS \right) \quad (3.29)$$

Lorsque le volume \mathbb{V} est entièrement localisé dans γ le denier terme de l'expression précédente disparaît. De plus, \mathcal{C} est défini à l'échelle de \mathbb{V} , on a alors Wood et al. (2000) :

$$\nabla \cdot (-D \langle \underline{\nabla c} \rangle) = \nabla \cdot (-D \underline{\nabla C}) \quad (3.30)$$

On choisit de négliger les variations de \underline{u} à l'échelle de \mathbb{V} : $\langle \underline{u} \rangle = \underline{u}$. La vitesse \underline{u} est de divergence nulle. On a alors :

$$\nabla \cdot (\langle \underline{u} c \rangle) = \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \langle c \rangle = \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \mathcal{C} \quad (3.31)$$

On obtient ainsi la forme conservative suivante pour le flux total :

$$\langle \nabla \cdot \underline{N} \rangle = \nabla \cdot (-D \underline{\nabla C}) + \underline{u} \cdot \underline{\nabla} \mathcal{C} = \langle R \rangle \quad (3.32)$$

qui est vérifiée en tout point n'appartenant pas à l'interface.

Pour la condition de saut à la paroi, on reprend le raisonnement du paragraphe 3.1.1. On aboutit alors à l'analogue de l'équation 3.23 :

$$\langle R \rangle_s = - \langle \underline{N} \rangle \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} \text{ sur } \Sigma \quad (3.33)$$

où $\langle R \rangle_s$ est le saut de la moyenne de R , définit par :

$$\int_{\mathbb{A}_{\gamma\kappa}} \langle R \rangle_s dS = \int_{\mathbb{V}} \langle R \rangle dV - \int_{\mathbb{V}_\gamma} \langle R_\gamma \rangle^\gamma dV - \int_{\mathbb{V}_\kappa} \langle R_\kappa \rangle^\kappa dV \quad (3.34)$$

Sur Σ , la vitesse \underline{u} est nulle. En utilisant l'équation 3.30, l'équation 3.33 devient :

$$\langle R \rangle_s = D \underline{\nabla} \mathcal{C} \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} \text{ sur } \Sigma \quad (3.35)$$

Il est démontré dans Wood et al. (2000) que si les effets de courbure sont négligeables, ce qui est notre cas lorsqu'on compare l'échelle des hétérogénéités au rayon de la tuyère, on a :

$$\langle R \rangle_s = \frac{1}{\mathbb{A}_{\gamma\kappa}} \int_{\mathbb{A}_{\gamma\kappa}} R_s dS = \langle R_s \rangle_\Sigma \quad (3.36)$$

Or, comme il a déjà été dit, le rayon de la tuyère est très grand devant l_μ . Il est donc justifié de négliger les effets de courbure et d'utiliser l'expression de $\langle R \rangle_s$ proposée par Wood et al. (2000). Le saut de la moyenne de R est ainsi égal à la moyenne surfacique sur l'interface Σ du saut de R . Dans notre cas, le taux de production R est une distribution proportionnelle à un Dirac en Σ . On a donc :

$$\langle R \rangle = 0 \text{ sur } \Omega \quad (3.37)$$

$$\langle R \rangle_s = \langle R_s \rangle_\Sigma = - \langle k(\underline{x}) c \rangle_\Sigma \text{ sur } \Sigma \quad (3.38)$$

3.1 Surface lisse

En réunissant les équations 3.32 et 3.37 sur Ω et 3.35 et 3.38 sur Σ , on obtient le problème moyen :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla} \mathcal{C} = \nabla \cdot D \underline{\nabla} \mathcal{C} \text{ sur } \Omega \quad (3.39)$$

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \mathcal{C} = \langle k(\underline{x})c \rangle_{\Sigma} \text{ sur } \Sigma \quad (3.40)$$

On considère un motif de la paroi. Nous appelons Ω_i ce domaine représenté figure 3.3. On souhaite dégager le comportement moyen de la surface. Pour cela, le domaine

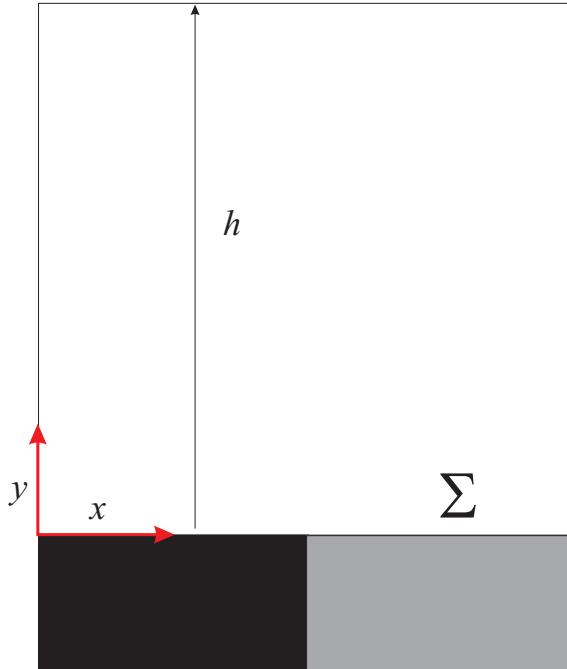


FIG. 3.3 – Domaine élémentaire Ω_i .

est choisi suffisamment haut pour que la perturbation du champ de concentration soit amortie en haut de celui-ci. La condition en $y = h$ est donc une condition de concentration uniforme $\mathcal{C}(x, y = h) = C_0$. Si on néglige la variation de c entre $x = 0$ et $x = l$, la condition sur les parois latérales devient alors une condition de périodicité.

Le problème vérifié par c , sur Ω_i est alors :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla} \mathcal{C} = \nabla \cdot D \underline{\nabla} \mathcal{C} \text{ sur } \Omega_i \quad (3.41)$$

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \mathcal{C} = \langle k(\underline{x})c \rangle_{\Sigma} \text{ sur } \Sigma \quad (3.42)$$

$$\mathcal{C}(y = h) = C_0 \quad (3.43)$$

$$\mathcal{C}(x = x_0) = \mathcal{C}(x = x_0 + l) \quad (3.44)$$

On recherche un éventuel coefficient de réactivité effective qui permette d'écrire l'équation 3.40 sous la forme :

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \mathcal{C} = k_{eff} \mathcal{C} \text{ sur } \Sigma \quad (3.45)$$

Décomposition du champ de concentration

On introduit, la déviation du champ de concentration \tilde{c} telle que :

$$c = \mathcal{C} + \tilde{c} \quad (3.46)$$

En retranchant l'équation 3.41 à l'équation 3.21, on obtient :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla} \tilde{c} = \nabla \cdot D \underline{\nabla} \tilde{c} \text{ sur } \Omega_i \quad (3.47)$$

$$(3.48)$$

Afin d'obtenir la condition limite vérifiée par \tilde{c} sur Σ , on introduit 3.46 dans 3.23. En retranchant 3.42, on obtient :

$$\begin{aligned} -\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \tilde{c} &= k\mathcal{C} + k\tilde{c} - \langle k(\mathcal{C} + \tilde{c}) \rangle \\ &= k\mathcal{C} + k\tilde{c} - \langle k\mathcal{C} \rangle - \langle k\tilde{c} \rangle \\ &= (k - \langle k \rangle) \mathcal{C} + k\tilde{c} - \langle k\tilde{c} \rangle \end{aligned} \quad (3.49)$$

On introduit alors la déviation de réactivité $\tilde{k} = k - \langle k \rangle$, et en utilisant le fait que $\langle \tilde{c} \rangle = 0$, on obtient :

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \tilde{c} = \tilde{k}\mathcal{C} + k\tilde{c} - \langle \tilde{k}\tilde{c} \rangle \text{ sur } \Sigma \quad (3.50)$$

En utilisant la condition de périodicité et la condition en haut du domaine ($y = h$), le problème de la déviation \tilde{c} s'écrit :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla} \tilde{c} = \nabla \cdot D \underline{\nabla} \tilde{c} \text{ sur } \Omega_i \quad (3.51)$$

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D \underline{\nabla} \tilde{c} = \tilde{k}\mathcal{C} + k\tilde{c} - \langle \tilde{k}\tilde{c} \rangle \text{ sur } \Sigma \quad (3.52)$$

$$\tilde{c}(y = h) = 0 \quad (3.53)$$

$$\tilde{c}(x = x_0) = \tilde{c}(x = x_0 + l) \quad (3.54)$$

Nous avons écrit le problème dont la déviation de concentration \tilde{c} est solution. Il nous faut maintenant fermer le problème global en faisant le lien entre cette déviation et la concentration moyenne.

Écriture du problème de fermeture

La condition sur Σ pour \tilde{c} est linéaire. En suivant Wood et al. (2000); Valdes-Parada et al. (2006), on introduit les variables de fermeture $s(\underline{x})$ et $\underline{b}(\underline{x})$ telles que, en se limitant aux termes d'ordre 1, la déviation s'écrit :

$$\tilde{c} = s\mathcal{C} + \underline{b} \cdot \underline{\nabla} \mathcal{C} \quad (3.55)$$

Le problème formé par les équations 3.51 et 3.53 est linéaire. Nous obtenons alors deux problèmes disjoints. Le premier pour s :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla} s = \nabla \cdot D \underline{\nabla} s \text{ sur } \Omega_i \quad (3.56)$$

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D\underline{\nabla s} = \tilde{k} + ks - \langle \tilde{k}s \rangle \text{ sur } \Sigma \quad (3.57)$$

$$s(y = h) = 0 \quad (3.58)$$

$$s(x = x_0) = s(x = x_0 + l) \quad (3.59)$$

$$\int_{\Omega} s \, dV = 0 \quad (3.60)$$

et le second pour \underline{b} :

$$\underline{u} \cdot \underline{\nabla b} = \nabla \cdot D\underline{\nabla b} \text{ sur } \Omega_i \quad (3.61)$$

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D\underline{\nabla b} = k\underline{b} - \langle \tilde{k}\underline{b} \rangle \text{ sur } \Sigma \quad (3.62)$$

$$\underline{b}(y = h) = 0 \quad (3.63)$$

$$\underline{b}(x = x_0) = \underline{b}(x = x_0 + l) \quad (3.64)$$

$$\int_{\Omega} \underline{b} \, dV = 0 \quad (3.65)$$

On observe que le vecteur nul est solution du problème de \underline{b} .

Coefficient effectif

Après avoir obtenu les problèmes de fermeture , il faut maintenant exprimer le coefficient de réactivité effective en fonction des variables de fermeture. Pour cela nous reprenons l'équation 3.40 :

$$-\underline{n}_{\gamma\kappa} \cdot D\mathcal{C} = \langle k(\underline{x})c \rangle = k_{eff}\mathcal{C} \text{ sur } \Sigma \quad (3.66)$$

On en déduit alors :

$$k_{eff} = \langle k(1+s) \rangle = \langle k \rangle + \langle ks \rangle = \langle k \rangle + \langle \tilde{k}s \rangle \quad (3.67)$$

Il est bon de noter que pour une perturbation nulle, on obtient $k_{eff} = \langle k \rangle$.

3.1.3 Mise en œuvre numérique

Nous avons déterminé le problème de fermeture à résoudre pour obtenir la réactivité effective k_{eff} . Comme nous l'avons vu, le transport de quantité de mouvement est découplé du transport de masse. Nous calculons donc tout d'abord le champ de vitesse dans notre domaine Ω_i . Le problème sur la variable s est ensuite résolu numériquement. Enfin, la réactivité k_{eff} est obtenue par intégration sur Σ . Nous traitons ici, le cas de surfaces où la réactivité k est une fonction échelon de période l , de minimum k_f et de maximum $k_m = \tilde{K} \cdot k_f$ avec $\tilde{K} > 1$.

Couche limite de Blasius

Par les hypothèses que nous avons choisies, nous sommes proches des conditions de la couche limite de Blasius. Cette couche limite est celle qui se forme sur une plaque plane infiniment fine placée dans un écoulement uniforme. Soit $\underline{u} = U_\infty \underline{e}_x$ la vitesse loin de la paroi.

Dans cette configuration, la distribution de vitesse dans la couche limite Chassaing (2000) est connue. En posant $\eta = y \sqrt{\frac{U_\infty}{\nu x}}$, on a :

$$u_x = U_\infty f' \quad (3.68)$$

$$u_y = U_\infty g'(f - \eta f') \quad (3.69)$$

avec $g(x) = y/\eta$ et f solution de :

$$2 f^{(3)} + f f'' = 0 \quad (3.70)$$

$$f'(\infty) = 1 \quad (3.71)$$

$$f(0) = f'(0) \quad (3.72)$$

Nous avons calculé numériquement f puis nous l'avons approchée par un polynôme. Le graphe de f et de ces deux dérivées est donné en figure 3.4.

La couche limite dynamique a pour épaisseur h telle que $u_x(y = h) = 0.99 U_\infty$.

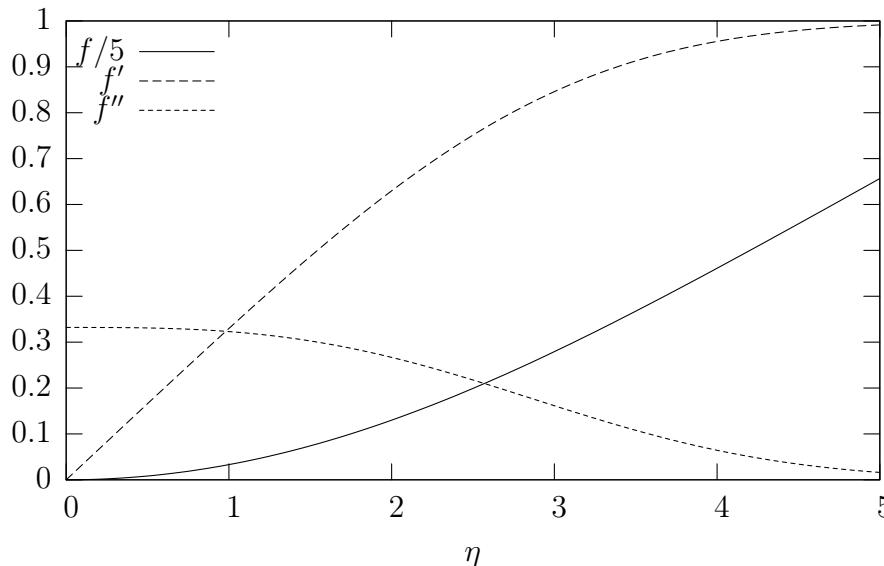


FIG. 3.4 – Graphe de la fonction f dans la construction de la solution de Blasius

Ceci correspond à $f = 0.99$ qui est obtenu pour $\eta = 4.92$. On en déduit alors :

$$h(x) = 4.92 \frac{x}{\sqrt{Re_x}} \quad (3.73)$$

où $Re_x = \frac{U_\infty x}{\nu}$ est le nombre de Reynolds local.

Méthode de résolution

Le champ de vitesse dans la couche limite est maintenant connu. Le problème pour s donné par les équations 3.56 à 3.60 est implanté dans le logiciel multiphylique commercial COMSOL sous la forme d'un problème de diffusion-convection. La contrainte de moyenne nulle est assurée par la résolution du problème instationnaire à partir d'un champ initial de moyenne nulle. Nous choisissons plus simplement un champ initialement nul.

On souhaite étudier l'influence des nombres de Reynolds, Péclet et Damköhler locaux sur la réactivité effective k_{eff} . On choisit par ailleurs le haut de notre système tel que à $y = h$.

Pour effectuer un calcul on se donne une amplitude \tilde{K} pour la fonction k ainsi que les nombres adimensionnels $Re_x, Pe = \frac{U_\infty l}{D}, \langle Da \rangle = \frac{\langle k \rangle l}{D}$. On vérifie tout au long de nos simulations que la hauteur du domaine était suffisante pour amortir la perturbation en Σ .

3.1.4 Résultats

Les simulations numériques sont réalisées dans le but d'obtenir le champ de perturbation s . L'intégration de s sur Σ permet ensuite de construire la réactivité effective k_{eff} de la paroi effective. Dans les résultats présentés, la surface a une réactivité k_f pour $x < 0.5 l$ et k_m pour $x > 0.5 l$. Dans l'ensemble de l'étude présentée ici, nous fixons la fraction de surface ayant la réactivité k_f à la valeur $\phi_f = 0.5$.

Champs de la variable s

La variable de fermeture s est la différence entre le champ détaillé c et le champ moyen \mathcal{C} normé par cette moyenne. Lorsque s est positif, le champ de concentration est localement supérieur à sa moyenne :

$$s > 0 \Rightarrow c > \mathcal{C} \quad (3.74)$$

La variable s représente une perturbation de c , $|s|$ est donc maximal sur Σ . Dans les cas où le nombre de Péclet est nul, le champ de s est symétrique par rapport au point médian $x = 0.5, s = 0$. Le profil de s sur Σ est donné en figure 3.5 pour différents Da . Les comportements asymptotiques sont les suivants :

- $Da \rightarrow 0$ donne une perturbation nulle $s(\underline{x}) = 0$;
- $Da \rightarrow \infty$ amène à une fonction crêteau sur Σ dont l'amplitude croît avec \tilde{K} .

La variation du champ de s sur le domaine fluide est donnée par la figure 3.6. On y représente les iso-contours, $|s| = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$ en fonction du nombre de Damköhler pour $Pe = 100, Re_x = 100$ fixes. On observe alors que lorsqu'on augmente le nombre de Damköhler, la perturbation augmente en intensité (iso-contours plus haut) mais ne change pas significativement de profil. Sur la figure 3.7, on se propose de faire varier le nombre de Péclet avec $Da = 1, Re = 10$. On observe alors que, lorsque le nombre de Péclet augmente, les contours sont de plus en plus plaqués à

la parois. Enfin, à Péclet et Damköhler fixés lorsqu'on fait varier le nombre de Reynolds comme représenté figure 3.8, on augmente l'intensité des perturbations dans le domaine fluide mais les contours proches de la paroi restent inchangés.

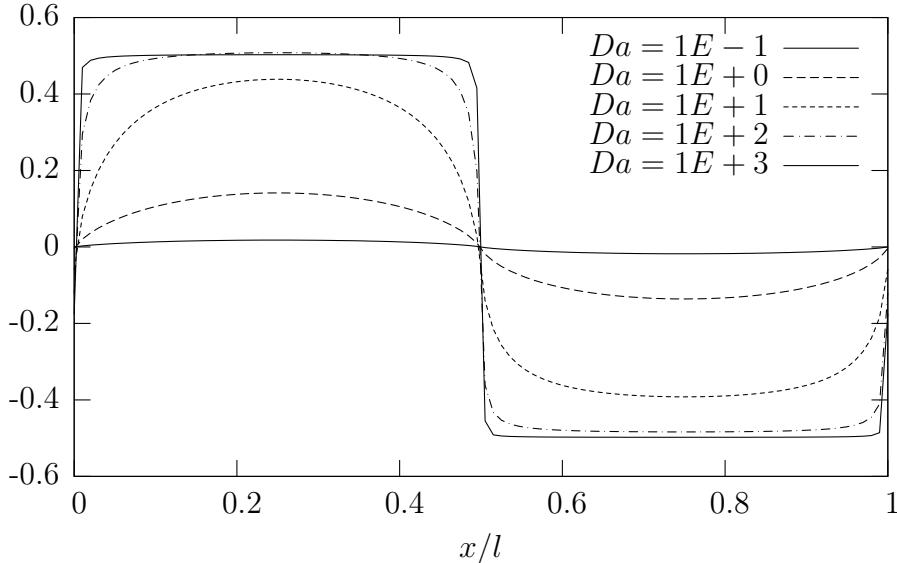


FIG. 3.5 – Profil de la variable s sur Σ avec $Pe = 0$ et $\phi_f, \tilde{K} = 3$

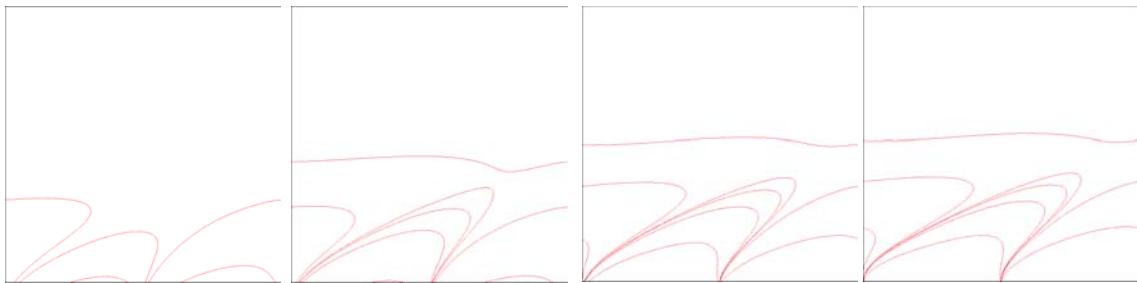


FIG. 3.6 – Iso-contours $|s| = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$ pour $Da = 0.1, 1, 10, 1000$ avec $Pe = 100$, $Re_x = 100$ et $\phi_f = 0.5, \tilde{K} = 3$.

Nous avons obtenu la variable de fermeture s sur Ω . Il est, à ce stade, difficile de prévoir l'effet des différents paramètres sur la réactivité effective. Pour cela, il faut calculer k_{eff} par intégration sur Σ à partir de l'équation 3.67.

Effets des paramètres du modèle sur la réactivité k_{eff}

Les champs de la variable s ont été présentés en fonction des nombres, de Reynolds, Damköhler et Péclet. Pour un fluide donné, le rapport Pe/Re égal au nombre de Schmidt varie peu en fonction de la pression et de la température. On définit ici le nombre de Schmidt local $Sc = Pe/Re_x$. Nous recherchons tout d'abord l'influence des nombres Re_x et Da sur la réactivité k_{eff} avec $Sc = 1$ et $\tilde{K} = 3$ fixé. Les variations

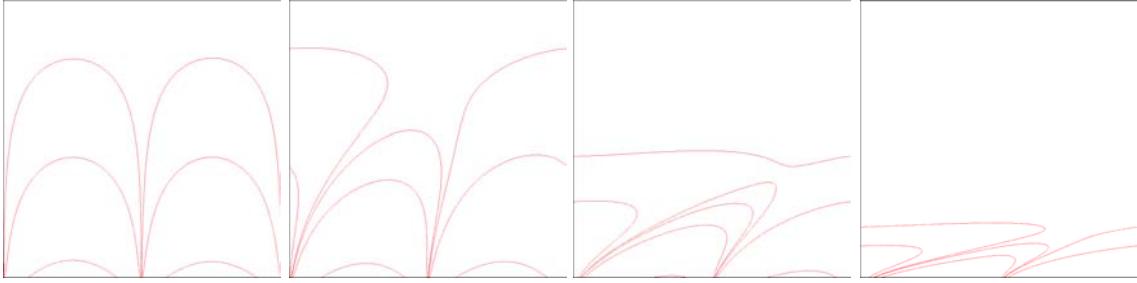


FIG. 3.7 – Iso-contours $|s| = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$ pour $Pe = 0.1, 10, 100, 1000$ avec $Da = 1$, $Re_x = 100$ et $\phi_f = 0.5$, $\tilde{K} = 3$.

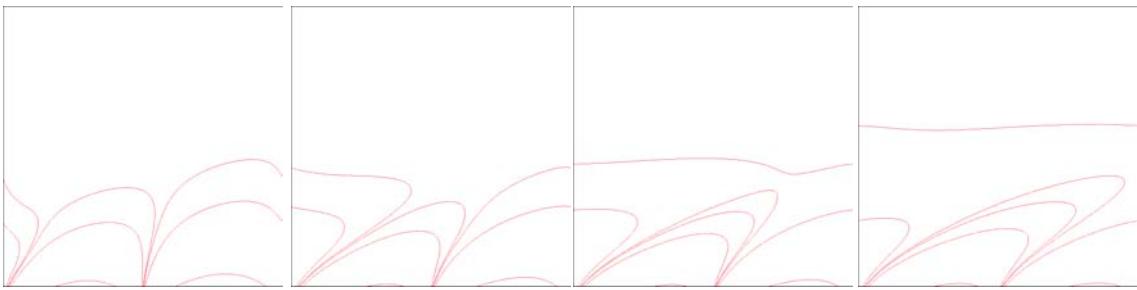


FIG. 3.8 – Iso-contours $|s| = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$ pour $Re_x = 0.01, 1, 10, 10^4$ avec $Pe = 100$, $Da = 1$ et $\phi_f = 0.5$, $\tilde{K} = 3$.

obtenues sont présentées figure 3.9.

Lorsque le nombre de Damköhler est faible, la perturbation s tend vers zéro. On retrouve, comme attendu pour une perturbation nulle, que la réactivité effective est égale à la moyenne $\langle k \rangle$ et cela quelle que soit la valeur du nombre de Péclet. Lorsque le régime est diffusif, $Da \gg 1$, la réactivité effective k_{eff} tend vers une autre valeur limite, qui est elle aussi indépendante de Re_x . Nous notons que cette limite n'apparaît pas dans Wood et al. (2000). Cette remarque et la valeur de cette limite seront rediscutées par la suite.

Pour mieux observer l'impact du nombre de Reynolds, les variations de k_{eff} sont cette fois représentées en fonction de Re_x pour différents nombres de Damköhler et de Schmidt sur la figure 3.10. Nous obtenons comme Juhasz and Deen (1991) un impact relativement faible du Re_x jusqu'à $Re_x = 100$. On observe ensuite une augmentation de la réactivité effective avec le nombre de Re_x . En effet, lorsque Re_x augmente à Sc fixé, la vitesse proche de la paroi augmente et uniformise la concentration au-dessus des différentes phases. Il en résulte une baisse de la limitation par la diffusion. On note cependant que, pour que cet effet se produise, il faut que $\langle Da = O(1) \rangle$. Ainsi, si le nombre de Damköhler est petit devant l'unité, la concentration est uniforme dans toute la phase fluide. Le champ de vitesse ne joue alors aucun rôle sur la concentration à la paroi. De même, quand le nombre de Damköhler est grand devant l'unité, la concentration pariétale est nulle indépendamment du nombre de Péclet.

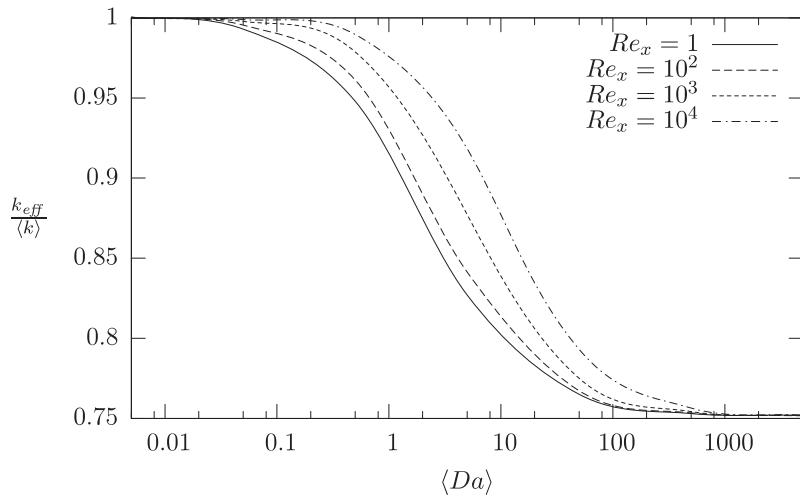


FIG. 3.9 – Effets des nombres de Damköhler et Reynolds sur la réactivité effective pour $\tilde{K} = 3$, $Sc = 1$ et $\phi_f = 0.5$.

On observe de plus que, tout étant égal par ailleurs, plus le nombre de Schmidt est élevé plus la réactivité effective est grande. Ceci s'explique par le fait que, à Da et Re_x donnés, plus le nombre de Schmidt est élevé plus le nombre de Péclet est grand. Ainsi lorsque Sc augmente, l'impact de l'écoulement augmente. Or, la réactivité croît avec Re_x , une augmentation de Sc vient alors renforcer cet effet.

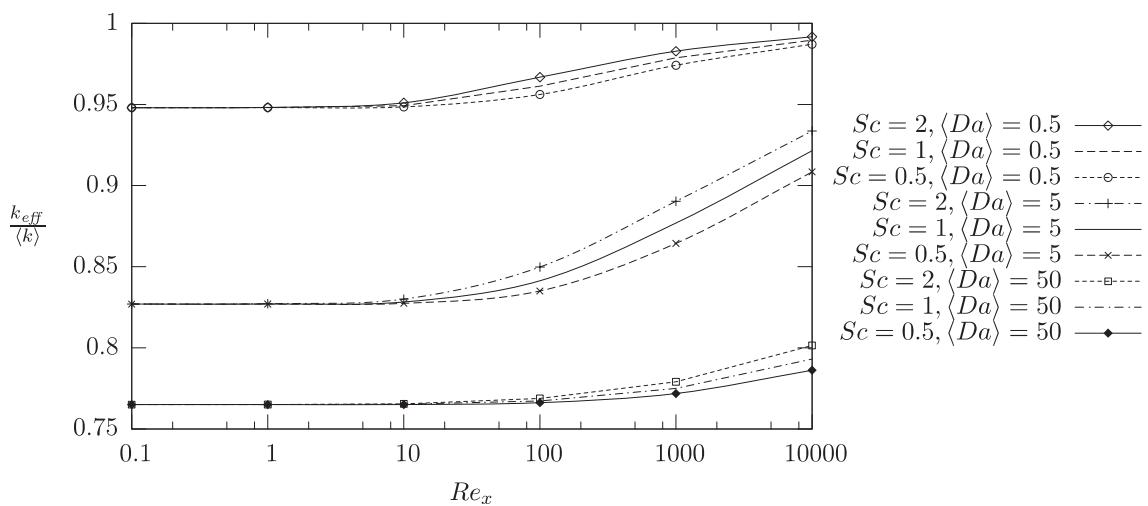


FIG. 3.10 – Effets des nombres de Reynolds et de Schmidt sur la réactivité effective pour $\tilde{K} = 3$ et $\phi_f = 0.5$.

L'effet du contraste \tilde{K} sur la réactivité k_{eff} est donné par la figure 3.11. Nous obtenons, comme attendu, que plus la réactivité est contrastée plus la réactivité effective est faible.

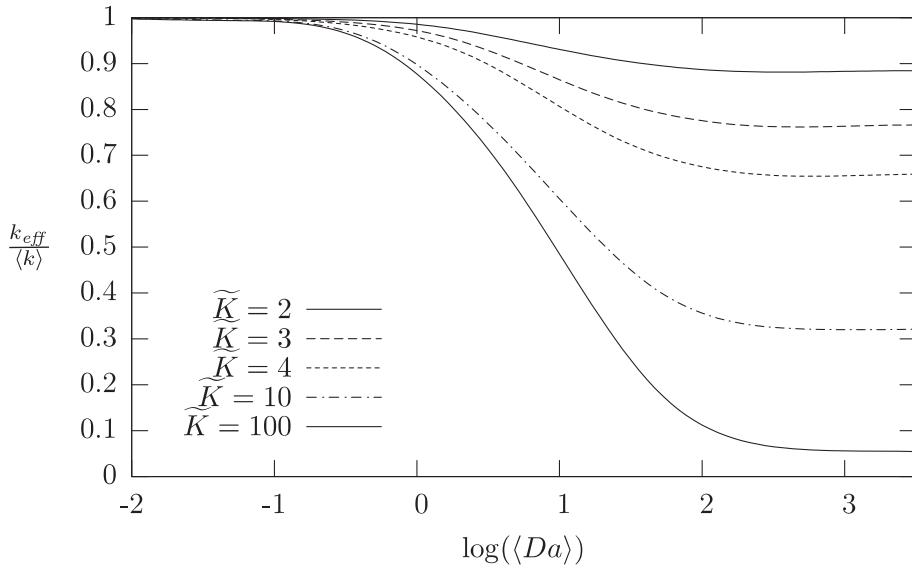


FIG. 3.11 – Effet du contraste de réactivité \tilde{K} sur la réactivité k_{eff} en fonction du nombre $\langle Da \rangle$ pour $Sc = 1$, $Re_x = 100$ et $\phi_f = 0.5$.

3.1.5 Discussion

Pour les Damköhler faibles nous avons bien retrouvé la valeur $k_{\text{eff}} = \langle k \rangle$. De même, lorsque le nombre de Damköhler tend vers l'infini, une limite indépendante du Pe a été obtenue. Ceci traduit le fait que le phénomène physique est relativement différent aux deux extrémités du spectre de Da .

En régime réactif, $Da \ll 1$, la diffusion est très rapide devant la réaction. Les zones de faibles et fortes réactivités puisent dans des réservoirs de réactif indépendants. Ces zones sont en parallèle. Leurs "conductances" k s'ajoutent suivant une loi parallèle :

$$k_{\text{eff}} = \phi k_f + (1 - \phi) k_m = \langle k \rangle \quad (3.75)$$

avec ϕ_f la fraction surfacique de réactivité k_f ¹. En régime diffusif, les deux zones puisent toutes deux dans les espèces ayant atteint la proche paroi. Leurs conductances s'ajoutent alors suivant une loi série :

$$k_{\text{eff}} = \left(\phi_f \frac{1}{k_f} + (1 - \phi_f) \frac{1}{k_m} \right)^{-1} = k^* \quad (3.76)$$

La réactivité effective est alors la moyenne harmonique des réactivités. Avec une fraction $\phi = 1/2$, on a :

$$k^* = 4 \langle k \rangle \frac{\tilde{K}}{(\tilde{K} + 1)^2} \quad (3.77)$$

En comparant les points obtenus par simulation avec $Da = 10^3$ et la moyenne harmonique des réactivités, on obtient le graphe 3.12. Cette figure valide donc la

¹Avec la géométrie considérée, ϕ_f est aussi la fraction volumique dans le solide

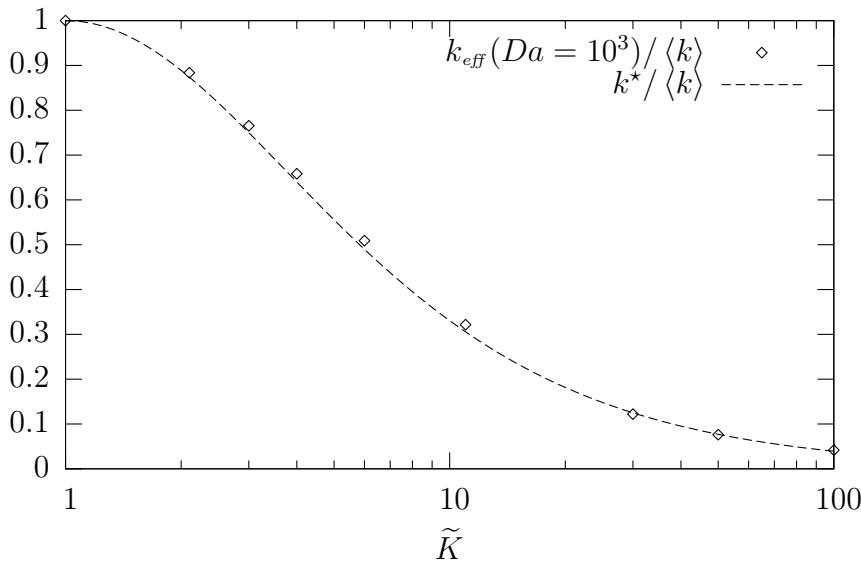


FIG. 3.12 – Comparaison entre les points obtenus par simulation pour $Da = 10^3$, $Pe = 0$ et la moyenne harmonique pour $\phi_f = 0.5$.

limite suivante de k_{eff} :

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} (k_{eff}) = k^* \quad (3.78)$$

Revenons sur l'absence de cette limite dans Wood et al. (2000). Dans cette étude, les systèmes étudiés faisaient intervenir des zones de réactivité nulle. La moyenne harmonique est alors nulle. De plus, les valeurs du module de Thiele qui est l'analogie de Da pour le milieu poreux, ne dépassent pas 10 dans les résultats présentés dans Wood et al. (2000). Cette valeur est trop faible pour faire apparaître le comportement du système en régime diffusif.

Avec notre modèle, nous avons obtenu un faible impact du nombre de Péclet sur la réactivité effective et un impact nul lorsque $Da \gg 1$ et $Da \ll 1$. Le rôle des deux transports apparaît comme très différent ; le cas où la convection est très rapide par rapport à la réaction, $\frac{Da}{Pe} \ll 1$ n'est pas équivalent à une diffusion très rapide devant la réaction, $Da \ll 1$.

Tout d'abord, il faut remarquer que la convection et la diffusion jouent un rôle différent dans la condition limite sur Σ . Le fluide étant visqueux, la convection est nulle sur Σ et ne participe pas aux échanges au voisinage proche de la paroi.

Ensuite, nous avons considéré une condition de périodicité pour la concentration. Le flux d'oxydant sur les parois latérales est alors nul. Tout l'apport est fait par le haut de la cellule. Le transport est alors globalement suivant y du haut de la cellule jusqu'à Σ alors que l'écoulement est très majoritairement suivant x . La contribution de $\underline{u} \cdot \nabla c$ est alors faible devant $\nabla \cdot (D \nabla c)$. Il est donc bon de vérifier que notre choix de condition limite périodique est bien justifié. L'hypothèse d'existence de la couche limite postule que, dans cette zone, les gradients radiaux sont très grands

devant les gradients transverses, soit ici, $\partial_x \psi \ll \partial_y \psi$. Nous avons vu au chapitre 2, que dans une couche limite laminaire le rapport des gradients est de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{Re}}$. L'hypothèse de périodicité est alors valable dès que le nombre de Reynolds global est supérieur ou égal à 100. Ce qui est le cas aux deux échelles de notre application.

Dans cette partie, nous avons écrit le problème aux déviations pour une surface lisse non-uniforme surmontée par un écoulement. Après résolution du problème de fermeture, nous avons obtenu la réactivité d'une telle surface en fonction des nombres de Re_x , Pe et Da ainsi que du contraste \tilde{K} .

Nous pouvons retenir que :

- L'écoulement a un impact faible sur la réactivité effective du matériau pour $Pe < 10^3$.
- Lorsque $Da \ll 1$, k_{eff} ne dépend pas de Pe et $k_{eff} \approx \langle k \rangle$.
- Pour $Da \gg 1$, k_{eff} ne dépend pas de Pe et $k_{eff} \approx k^*$.
- Plus le contraste \tilde{K} est grand plus k_{eff} s'éloigne de $\langle k \rangle$.

L'étude que nous avons conduite permet de montrer qu'il n'y a que peu de limitations par l'advection dans le cas d'une surface lisse. Cette partie était consacrée à l'étude de la réactivité effective initiale de notre paroi ablative. Les observations MEB présentées au paragraphe 1.2.2 montrent qu'après ablation la surface devient rugueuse. Ce constat nous pousse à étudier le comportement effectif de surfaces présentant une rugosité significative. Cependant le passage du système lisse au système rugueux n'est pas direct.

En effet, dans le cas d'une surface rugueuse, le champ de vitesse est perturbé par la rugosité. Il faut donc homogénéiser la surface non seulement vis-à-vis du transfert de masse mais aussi du transfert de quantité de mouvement.

3.2 Surface rugueuse

Après avoir observé les effets d'un écoulement sur une paroi lisse hétérogène, l'étude porte maintenant sur les parois rugueuses hétérogènes plus représentatives des morphologies observées à l'échelle microscopique au paragraphe 1.2.2. Les coupures sont alors ceux donnés par la figure 3.13.

La paroi effective recherchée est, elle, toujours une paroi lisse. Les champs de vitesse sur la paroi détaillée et sur la paroi effective sont donc *a priori* différents. Ainsi, l'homogénéisation doit maintenant porter non-seulement sur le problème de la concentration mais aussi sur celui de la vitesse.

Dans cette partie, la procédure de construction du milieu effectif est exposée. Celle-ci permet d'expliquer l'impact de la rugosité sur l'écoulement. Le but n'est pas d'effectuer une étude exhaustive en fonction de l'ensemble des paramètres mais de confirmer dans notre cas d'étude les conclusions faites sur paroi lisse. Une étude plus complète a fait l'objet d'un stage de M2R (Véran, 2006).

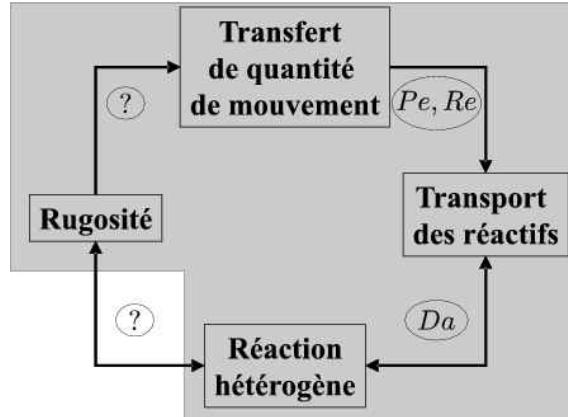


FIG. 3.13 – Couplages retenus dans l'étude d'une paroi rugueuse non-récessive.

3.2.1 Condition effective pour le champ de vitesse

Dans notre modèle, nous avons fait l'hypothèse que l'espèce réactive est diluée. L'écoulement est indépendant du champ de concentration. Dans un premier temps, nous recherchons à homogénéiser le problème pour l'écoulement. On souhaite alors remplacer la surface rugueuse par une surface lisse tout en conservant l'écoulement moyen.

La construction de lois de paroi pour les écoulements laminaires et turbulents a fait l'objet de nombreux travaux. Dans ce chapitre nous nous appuyons sur la contribution de Achdou et al. (1998b) pour les écoulements laminaires au-dessus d'une paroi rugueuse. On étudie ici uniquement le régime stationnaire.

Soit Ω un domaine fluide dont Σ est une paroi rugueuse. Soit l_μ la hauteur caractéristique de la rugosité, L celle de l'écoulement comme illustré figure 3.14. La rugosité considérée est périodique et petite devant la dimension de l'écoulement : $l_\mu \ll L$. On suppose de plus que la couche limite est grande devant la taille des rugosités : $\frac{1}{Re} = \frac{\nu}{UL} \gg \epsilon = \frac{l_\mu}{L}$.

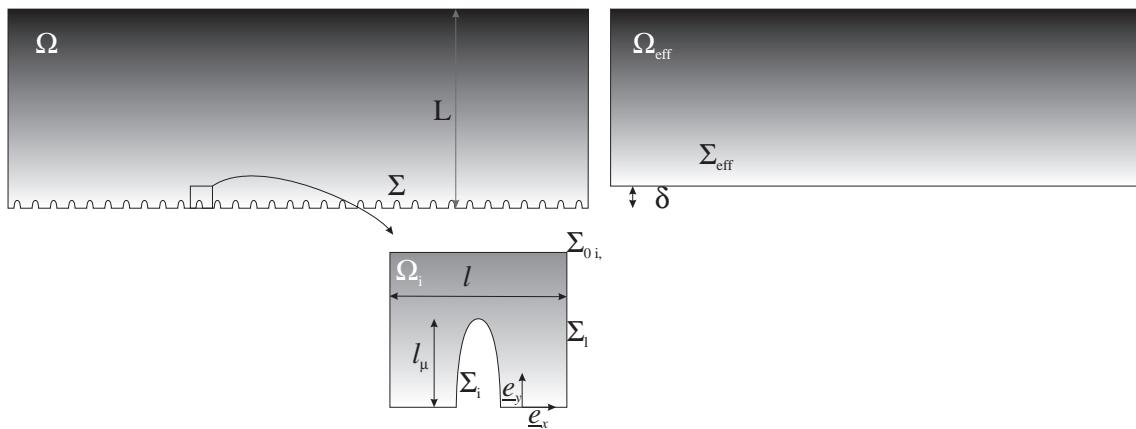


FIG. 3.14 – Milieu rugueux Ω et milieu effectif Ω_{eff} .

3.2 Surface rugueuse

Comme cela a été mentionné, la simulation directe de système où $\epsilon = \frac{l_\mu}{L} \ll 1$ requiert des ressources informatiques importantes. On souhaite alors remplacer la paroi Σ par une paroi effective Σ_{eff} lisse relative au domaine Ω_{eff} telle que les caractéristiques moyennes de l'écoulement soient conservées. Il faut alors déterminer quelle est la condition limite sur Σ_{eff} .

Dans Achdou et al. (1998b), il est démontré en utilisant une technique de développement asymptotique qu'il est possible de construire une paroi plane Σ_{eff} positionnée à une hauteur δ au-dessus de la base des rugosité telle que :

1. La condition effective sur Σ_{eff} soit une condition d'adhérence simple.
2. L'écart entre le champ de vitesse effectif et direct soit de l'ordre de $\epsilon = \frac{l_\mu}{L} \ll 1$.

Nous adaptons la démonstration mathématique proposée par Achdou et al. (1998b) en termes plus phénoménologiques. Nous ne cherchons pas ici à démontrer l'existence d'une telle surface mais comment sa position δ est calculée à partir des caractéristiques de Σ_{eff} .

Le problème vérifié par \underline{u} est le suivant :

$$\rho_g(\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} - \mu \Delta \underline{u} + \underline{\nabla p} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (3.79)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega \quad (3.80)$$

$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.81)$$

Soit \underline{U} , \mathcal{P} la vitesse et la pression définies dans le domaine effectif Ω_{eff} telles que :

$$\rho_g(\underline{U} \cdot \nabla) \underline{U} - \mu \Delta \underline{U} + \underline{\nabla P} = 0 \text{ sur } \Omega_{\text{eff}} \quad (3.82)$$

$$\nabla \cdot \underline{U} = 0 \text{ sur } \Omega_{\text{eff}} \quad (3.83)$$

$$\underline{U} = 0 \text{ sur } \Sigma_{\text{eff}} \quad (3.84)$$

On introduit alors la déviation du champ de vitesse :

$$\tilde{\underline{u}} = \underline{u} - \underline{U} \quad (3.85)$$

Soit Ω_i un sous domaine élémentaire de Ω tel que représenté figure 3.14. La vitesse $\tilde{\underline{u}}$ est définie à l'échelle des rugosités. On a donc $\tilde{\underline{u}} = O(\frac{l_\mu}{\delta} U)$ où U est l'échelle de \underline{u} . De même on introduit \tilde{p} la déviation relative à la pression. Comme nous l'avons fait dans la partie précédente pour la concentration, nous cherchons à écrire le problème aux déviations pour la vitesse et pour la pression. Pour cela, on injecte les définitions des déviations dans le problème sur Ω . On obtient alors pour le bilan de quantité de mouvement dans Ω_i :

$$\underbrace{(\underline{U} \cdot \nabla) \underline{U} - \nu \Delta \underline{U}}_{=0} + \underbrace{\frac{1}{\rho_g} \underline{\nabla P}}_{O(\frac{\epsilon U^2}{l_\mu})} + \underbrace{(\underline{U} \cdot \nabla) \tilde{\underline{u}}}_{O(\frac{\epsilon U^2}{l_\mu})} + \underbrace{(\tilde{\underline{u}} \cdot \nabla) \tilde{\underline{u}}}_{O(\frac{\epsilon U^2}{l_\mu})} + \underbrace{(\tilde{\underline{u}} \cdot \nabla) \underline{U}}_{O(\frac{\epsilon U^2}{l_\mu})} - \underbrace{\nu \Delta \tilde{\underline{u}}}_{O(\frac{\epsilon U^2}{Re l_\mu})} + \underbrace{\rho_g^{-1} \underline{\nabla \tilde{p}}}_{O(\frac{U^2}{l_\mu})} = 0 \quad (3.86)$$

Le premier groupe de termes de cette équation est nul d'après 3.82. Les rugosités étant petites devant la taille de la couche limite, on a $\frac{1}{Re} \gg \epsilon$. Les termes de l'ordre

de $\frac{\epsilon U^2}{l_\mu}$ sont donc négligeables par rapport à $\nu \Delta \tilde{u}$. On a donc :

$$-\mu \Delta \tilde{u} + \nabla \tilde{p} = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.87)$$

L'incompressibilité donne directement :

$$\nabla \cdot \tilde{u} = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.88)$$

La condition d'adhérence sur Σ conduit à :

$$\tilde{u} + \underline{U} = 0 \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.89)$$

Nous avons utilisé la vitesse \underline{U} sur Ω_i . Cette vitesse n'a de sens physique que sur $\Omega_i \cap \Omega_{\text{eff}}$. A l'échelle de l_μ , \underline{U} peut être linéarisée. On prolonge alors formellement \underline{U} sur Ω_i avec :

$$\underline{U} \approx (y - \delta) \partial_y \mathcal{U}_x|_{(x,\delta)} \underline{e}_y \text{ sur } \Omega_i \quad (3.90)$$

La condition d'adhérence sur Σ_i devient alors :

$$\tilde{u} + (y - \delta) \partial_y \mathcal{U}_x|_{(x,\delta)} \underline{e}_y = 0 \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.91)$$

Notre problème pour la déviation est non-linéaire. La forme de la fermeture n'est donc pas directe. Cependant l'équation 3.91, invite à poser :

$$\tilde{u} = \partial_y \mathcal{U}_x|_{(x,\delta)} (\underline{x} + \delta \underline{e}_y) \quad (3.92)$$

Il en suit que l'on pose :

$$\tilde{p} = \pi \partial_y \mathcal{U}_x|_{(x,\delta)} \quad (3.93)$$

Ainsi, en reportant la fermeture dans le problème aux déviations, on obtient :

$$-\mu \Delta \underline{x} + \nabla \pi = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.94)$$

$$\nabla \cdot \underline{x} = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.95)$$

$$\underline{x} = -y \underline{e}_y \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.96)$$

On observe que le problème obtenu dépend uniquement des propriétés géométriques de la surface et de la viscosité cinématique du fluide. Le problème ne dépend au contraire pas des conditions locales de vitesse et de pression. Il est donc raisonnable d'ajouter une condition de périodicité sur les faces latérales de Ω_i . Le problème sur χ est alors le problème de Stokes suivant :

$$-\mu \Delta \underline{x} + \nabla \pi = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.97)$$

$$\nabla \cdot \underline{x} = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.98)$$

$$\underline{x} = -y \underline{e}_y \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.99)$$

$$\underline{x}(x, y) = \underline{x}(x + l, y) \quad (3.100)$$

3.2 Surface rugueuse

On peut alors calculer $\underline{\chi}$. Cependant on ne sait toujours pas où placer Σ_{eff} car nous n'avons toujours pas δ . Pour l'obtenir, il faut utiliser le fait que loin de la paroi la perturbation s'atténue et on a alors $\underline{u} \approx \underline{U}$. Ceci implique qu'il existe une distance h telle que :

$$\tilde{u}(x, h) = 0 + o(\epsilon U) \quad (3.101)$$

En utilisant la fermeture sur la vitesse, on a :

$$\underline{\chi}(x, h) = -\delta \underline{e}_y + o(\epsilon U) \quad (3.102)$$

La différence de hauteur entre la base de la paroi Σ et la paroi Σ_{eff} est donc la limite de $-\chi_y$ lorsque y est grand devant l_μ . On note $\bar{\chi}$ cette limite de χ_y . Il est alors bon de noter que χ ne dépend pas des conditions extérieures à la cellule locale (\underline{u}, p). Ceci implique que la hauteur δ est constante sur le domaine Ω_{eff} et que la surface obtenue ainsi est bien plane.

Plusieurs solutions au problème de Stokes sont données figure 3.15 pour différentes rugosités.

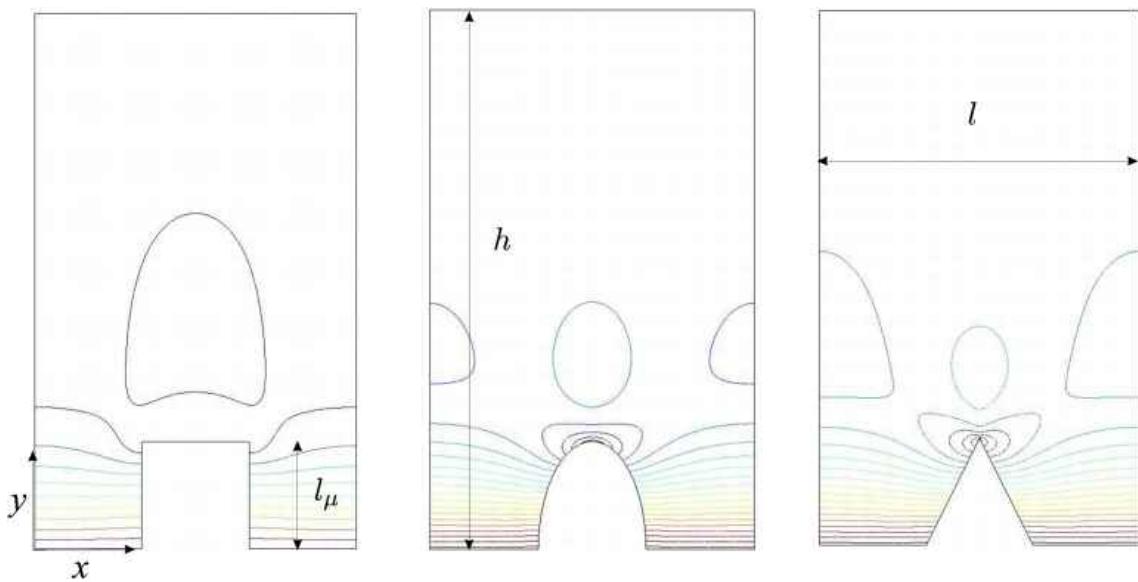


FIG. 3.15 – Iso-contours de χ pour différentes morphologies de même hauteur l_μ et de même période l .

La valeur $\bar{\chi}$ représente l'impact de la rugosité sur l'écoulement. D'après le graphique 3.16, on a $\frac{\bar{\chi}}{l_\mu} = -0.90, -0.80, -0.76$ respectivement pour un créneau, une hémieellipse, un triangle de base $l_\mu = l/3$. Le créneau est donc la rugosité la plus impactante sur l'écoulement. Nos simulations ne montrent pas d'influence notable de Re sur $\bar{\chi}$.

Nous avons construit la condition effective pour Navier-Stokes. Il faut désormais considérer le problème sur la concentration pour calculer la réactivité effective de cette paroi.

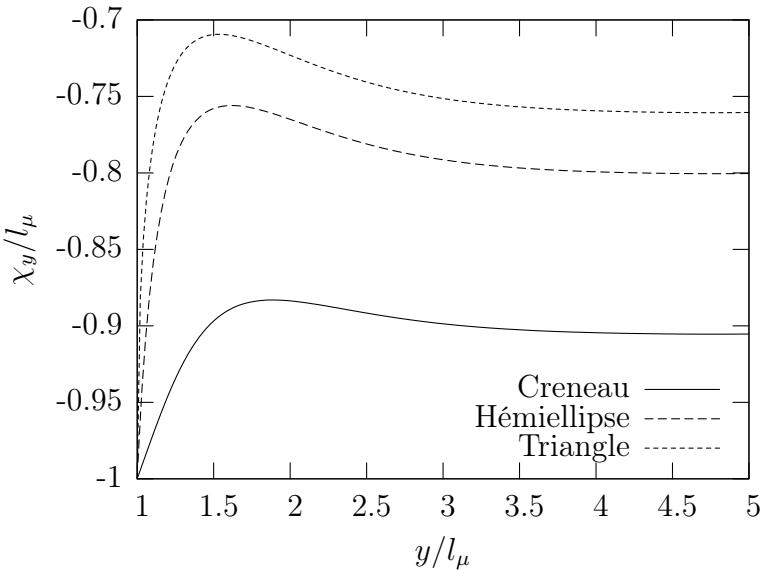


FIG. 3.16 – Distribution de χ_y pour différentes morphologies en $x = 0.5 l$.

3.2.2 Réactivité effective

On recherche la réactivité de la paroi Σ_{eff} qui placée en $y = \delta$ consomme le même flux moyen que Σ . Pour cela, l'étude se focalise sur le domaine élémentaire Ω_i . La base et la proéminence de la paroi ont des réactivités différentes. Comme nous l'avons mentionné, la méthode de prise de moyenne utilisée lors de l'étude du cas lisse ne peut être étendue telle quelle au cas rugueux. On procède alors ici par simulation numérique directe pour le problème local d'écoulement comme de concentration.

Procédure de calcul

Dans Ω_i , on considère le problème d'écoulement relatif à \underline{u} que nous avons déjà utilisé auquel s'ajoute une condition de périodicité :

$$(\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} - \nu \nabla^2 \underline{u} + \rho_g^{-1} \nabla p = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.103)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.104)$$

$$\underline{u}(x = x_0) = \underline{u}(x = x_0 + l) \text{ sur } \Sigma_l \quad (3.105)$$

$$\underline{u} = 0 \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.106)$$

Il faut alors coupler le sous-domaine Ω_i avec le domaine Ω . Le couplage peut être fait en imposant le flux ou la vitesse sur $\Sigma_{0,i}$. Comme dans le cas lisse, on considère une cellule suffisamment loin de l'entrée de la couche limite pour qu'on ait $\underline{u} \cdot \underline{e}_y = 0$ sur $\Sigma_{0,i}$. La condition limite est alors de la forme $\underline{u} = U \underline{e}_x$ ou $\mu \partial_y u_x = \tau$. Nous choisissons d'utiliser une condition sur le cisaillement. Cette condition fournit une meilleure formulation du problème puisqu'on a alors une condition sur la vitesse en

3.2 Surface rugueuse

Σ et une sur sa dérivée en $\Sigma_{i,0}$. On impose donc :

$$\mu \frac{\partial u_x}{\partial y} = \tau_h \text{ sur } \Sigma_{0,i} \quad (3.107)$$

La vitesse caractéristique du problème est alors $U_\mu = \frac{l\tau_h}{\mu}$. Le nombre de Reynolds local est ainsi : $Re_\mu = \frac{U_\mu l}{\nu} = \frac{\tau_h l^2}{\rho_g}$.

Nous avons donc notre problème pour la vitesse ; passons à celui de la concentration. Celui-ci est identique à celui résolu dans le cas lisse. Le problème pour la concentration est alors :

$$\nabla \cdot (\underline{u}c - D\underline{\nabla}c) = 0 \text{ sur } \Omega_i \quad (3.108)$$

$$c(x = x_0) = c(x = x_0 + l) \text{ sur } \Sigma_l \quad (3.109)$$

$$D\underline{\nabla}c \cdot \underline{n} = -kc \text{ sur } \Sigma_i \quad (3.110)$$

$$c = C_0 \text{ sur } \Sigma_{0,i} \quad (3.111)$$

Ces deux problèmes sont simulés numériquement successivement. On obtient alors le flux J consommé par la paroi.

Nous avons choisi, comme dans le cas lisse de nous placer suffisamment loin de l'entrée de la couche limite pour pouvoir considérer que la vitesse moyenne est portée par \underline{e}_x . La paroi effective est lisse et uniforme. Le flux convectif radial $u_y \mathcal{C}$ est alors nul. On a donc la solution donnée par le cas purement diffusif :

$$k_{eff} = \frac{\langle J \rangle / C_0}{1 - \langle J \rangle / J_D} \quad (3.112)$$

avec $J_D = \frac{DC_0}{h-\delta}$. La hauteur $\delta = -\bar{\chi}$ étant obtenue par la résolution du problème sur $\underline{\chi}$ présenté plus haut. La surface effective relative à l'hémiellipse que nous étudions est ainsi à une hauteur $\delta = 0.8 l_\mu$ de la base de la rugosité.

Réactivité effective

Les simulations sont réalisées sous Comsol. Nous recherchons l'effet de l'écoulement sur la réactivité de la paroi rugueuse. Soit k_m la réactivité de la base et k_f celle de la rugosité portée par Σ .

Nous devons maintenant choisir les paramètres numériques de notre simulation. Il faut alors se rappeler les hypothèses d'échelle de cette étude. Tout d'abord, on a supposé que les rugosités étaient petites devant l'échelle globale de l'écoulement. On a donc :

$$\frac{l_\mu}{L} \ll 1 \quad (3.113)$$

On a par ailleurs supposé que l'échelle de la couche limite était grande devant celle des rugosités. On a donc :

$$\frac{l_\mu}{L} \ll \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (3.114)$$

On a par exemple le rapport :

$$\frac{l_\mu}{L} = \frac{1}{10} \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (3.115)$$

Or, entre la vitesse U dans la veine et la vitesse locale U_μ , on a :

$$\frac{U_\mu}{U} \approx \frac{l_\mu}{L} \quad (3.116)$$

Le nombre de Reynolds local est donc :

$$Re_\mu = \frac{U_\mu l_\mu}{\nu} \approx Re \left(\frac{l_\mu}{L} \right)^2 \quad (3.117)$$

En utilisant l'équation 3.115, on obtient alors :

$$Re_\mu = Re \left(\frac{1}{10} \frac{1}{\sqrt{Re}} \right)^2 = \frac{1}{100} \quad (3.118)$$

Les nombres de Reynolds qui permettent de respecter au sens strict les hypothèses de notre modèle sont donc très faibles. Le nombre de Schmidt étant de l'ordre de l'unité, on obtient alors des nombres de Péclet $Pe = Re.Sc$ très faibles. Le modèle pris au sens strict permet donc d'aborder uniquement des cas où les transports de masse à l'échelle des rugosité sont largement dominés par la diffusion. Nous sommes cependant intéressés par des cas où le nombre de Reynolds est de l'ordre de 200. Il est possible de calculer le problème local avec un tel nombre de Reynolds mais, dans ce cas, la cellule élémentaire n'est plus un sous-domaine dans une couche limite laminaire.

Nous faisons alors des simulations dans la cellule locale en fixant les contrastes $\tilde{K} = 6$ et en variant les nombres Re_μ, Da et Sc . Le nombre de Schmidt permet de fixer les caractéristiques du fluide. On construit alors les graphes donnés figure 3.17 pour deux fluides différents, un premier avec $Sc = 2$ et un second avec $Sc = 0.5$. Dans le premier fluide, la diffusion de quantité de mouvement est deux fois plus rapide que celle de masse. Avec $Sc = 0.5$, c'est la diffusion de masse qui est deux fois plus rapide que celle de quantité de mouvement.

On obtient comme dans le cas lisse, que pour un fluide donné (Sc fixe) :

- L'effet prépondérant sur la réactivité effective est la compétition diffusion-réaction décrite par le nombre de Damköhler .
- Il n'y a pas d'effet de la convection sur la réactivité effective pour un nombre de Reynolds local inférieur à 100.
- Plus le nombre de Schmidt est élevé plus la réactivité effective est importante.

Cependant, les résultats obtenus pour $\langle Da \rangle$ ne confirment pas le comportement asymptotique, $k_{eff} = k^*$ pour $Da \gg 1$. Tout d'abord, il faut observer que du point de vue numérique, lorsque $Da \gg 1$, le calcul numérique du flux à la paroi pose problème. Le flux est non nul alors que la concentration pariétale tend vers zéro. Il est donc difficile de conclure sur le sens physique des résultats obtenus pour $Da = 50$.

3.2 Surface rugueuse

Par ailleurs, on observe que la structure du flux total dépend uniquement du nombre de Péclet et pas du nombre de Reynolds ou Damköhler . L'évolution du flux total est donnée figure 3.18. On observe que pour $Pe > 10^4$, des recirculations se produisent autour de la rugosité.

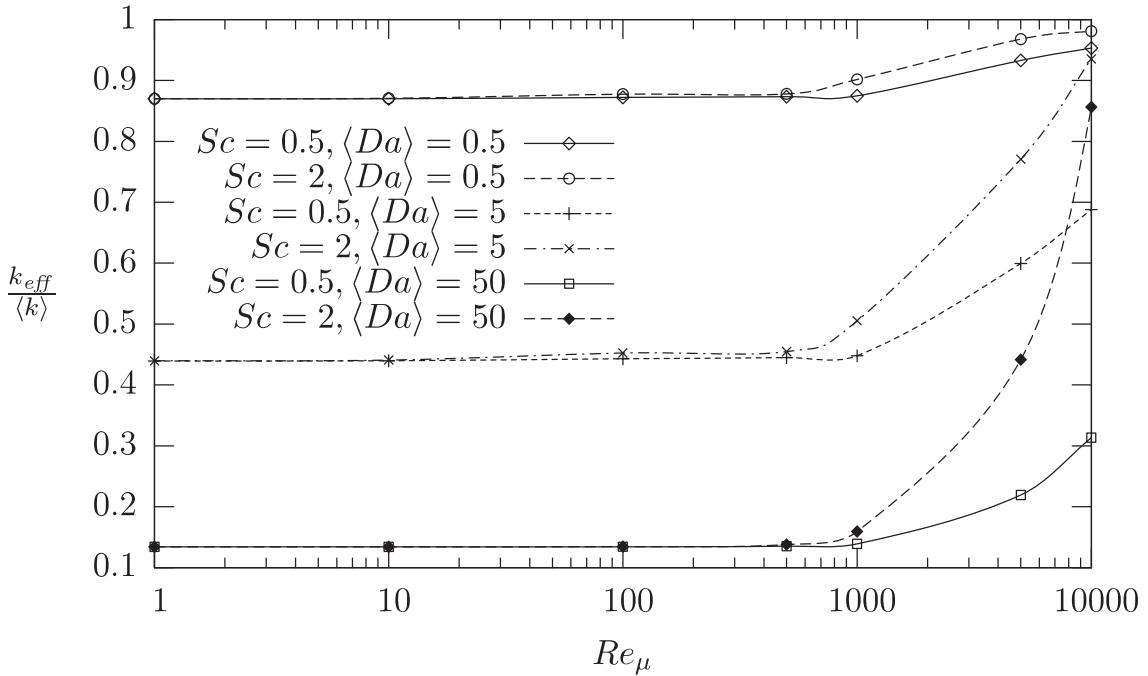


FIG. 3.17 – Réactivité effective obtenue pour la cellule en hémiellipse en fonction du nombre Reynolds local Re_μ pour différents nombres de Damköhler moyens $\langle Da \rangle$ et différents nombres de Schmidt Sc avec $\tilde{K} = 6$.

Une étude plus complète de l'espace des paramètre est présentée dans Véran (2006).

3.2.3 Comparaison simulation directe-milieu effectif

Afin de vérifier la validité de notre approche, les comportements d'un système rugueux avec le milieu effectif correspondant sont comparés. Le système rugueux est un tube comportant une partie lisse puis une partie rugueuse formée par un motif en hémiellipse identique à celui présenté figure 3.15. Le rayon du tube est de $100 \mu m$ et la hauteur des rugosités est de $l_\mu = 2.5 \mu m$, la vitesse d'entrée est $U_\infty = 10 m.s^{-1}$. On donne aux paramètres les valeurs données par le tableau 3.1. Ces valeurs sont des valeurs caractéristiques de l'échelle microscopique de notre application. Dans ce cas, on a $Sc = 2$. On a alors un nombre de Reynolds égal à : $Re = \frac{UL}{\nu} \approx 50$ et un nombre de Péclet $Pe = Sc.Re = 100$. On a alors le rapport des échelles suivant :

$$\frac{l_\mu}{L} \approx \frac{1}{5} \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (3.119)$$

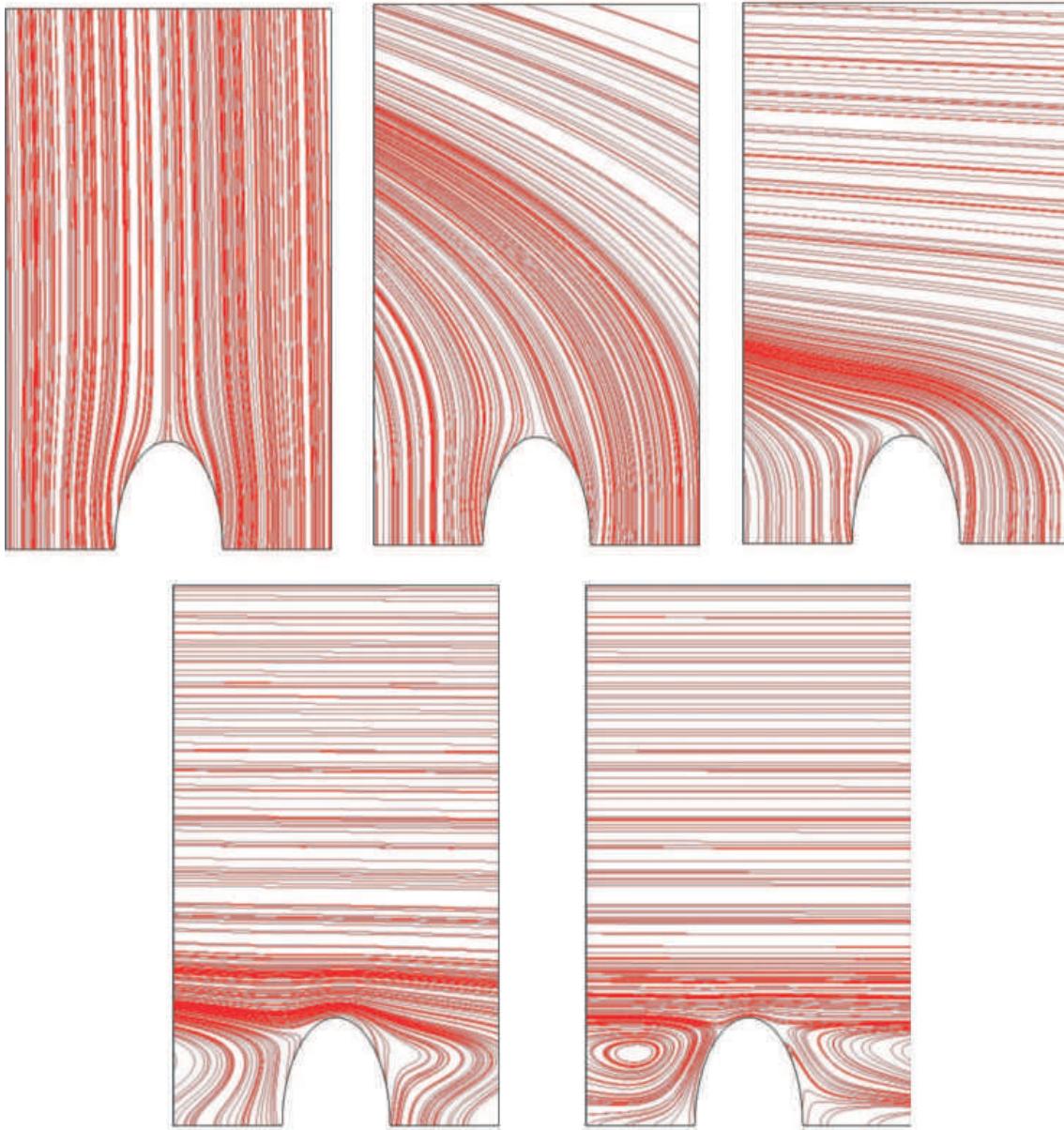


FIG. 3.18 – Lignes de courant pour le flux total N pour $Pe = \{0.1, 100, 1000, 10^4, 10^5\}$.

On est donc à la limite de validité de notre modèle mais des rapports beaucoup plus prononcés ne peuvent être simulés directement (d'où l'intérêt du changement d'échelle). Le milieu effectif est alors un tube identique au milieu direct sur la partie lisse puis présentant une marche de hauteur $\bar{\chi}$ sur la partie effective. Sur le plan du maillage, les ressources consommées par le système rugueux sont beaucoup plus importantes que dans le cas du système lisse comme l'illustre la figure 3.19.

On compare tout d'abord les champs de vitesse. Les iso contours de $\|\underline{u}\|$ sont donnés figure 3.20. On constate que le milieu effectif restitue bien le comportement global

3.2 Surface rugueuse

Grandeur	Mesure	Unité
ρ_g	4.93	$kg.m^{-3}$
μ	$0.925 \cdot 10^{-4}$	$Pa.s$
D	10^{-4}	$m^2.s^{-1}$
l	7.5	μm
l_μ	2.5	μm
k_m	6	$m.s^{-1}$
k_f	1	$m.s^{-1}$

TAB. 3.1 – Conditions de calcul pour la comparaison des milieux rugueux et effectifs.
du tube rugueux.

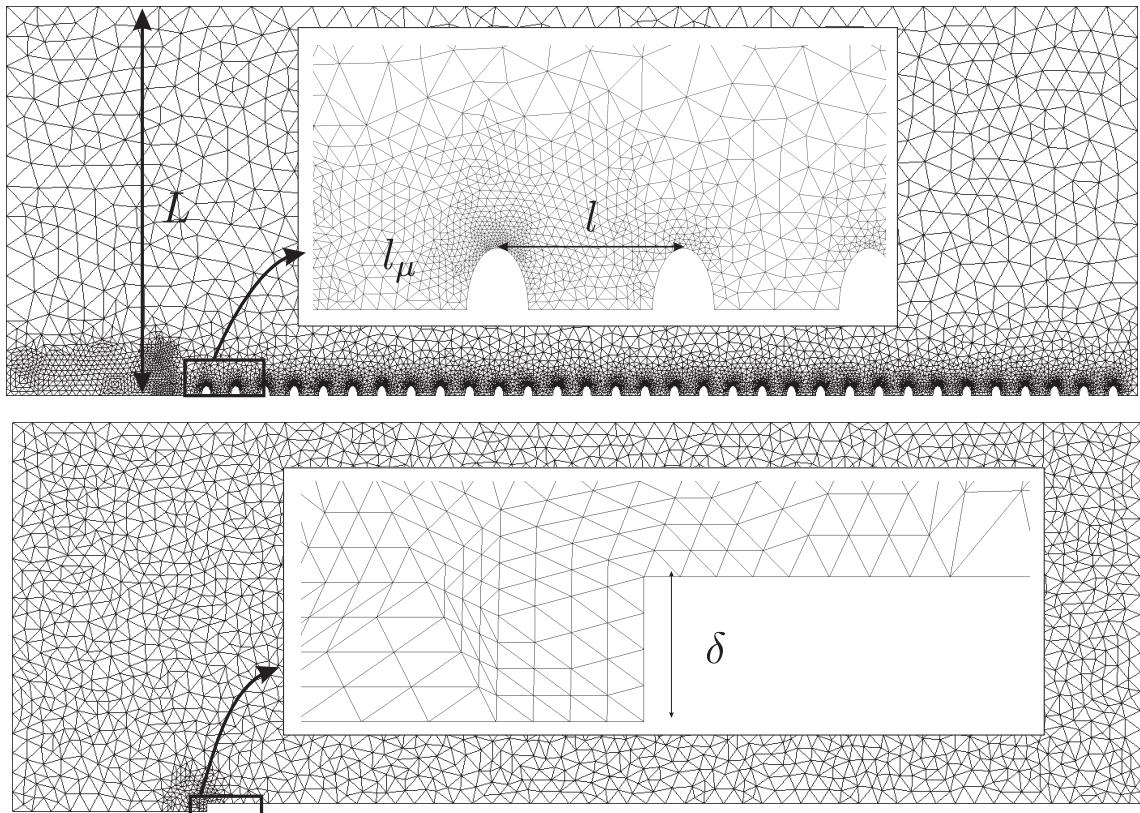


FIG. 3.19 – Maillages utilisés pour le système rugueux et le système effectif.

La figure 3.21 présente le champ de vitesse en $y = 2l_\mu$ pour un tube de diamètre L , pour le milieu rugueux et pour le milieu effectif. L'origine $x = 0$ correspond au début des rugosités. Cette comparaison permet de constater l'impact de la rugosité sur l'écoulement en comparant le tube lisse et le tube rugueux. On constate de plus que l'accord est bien quantitatif en observant la coupe dans la zone de double singularité : proche de la paroi et proche des premières rugosités. L'accord est très satisfaisant et valide notre modèle pour l'écoulement.

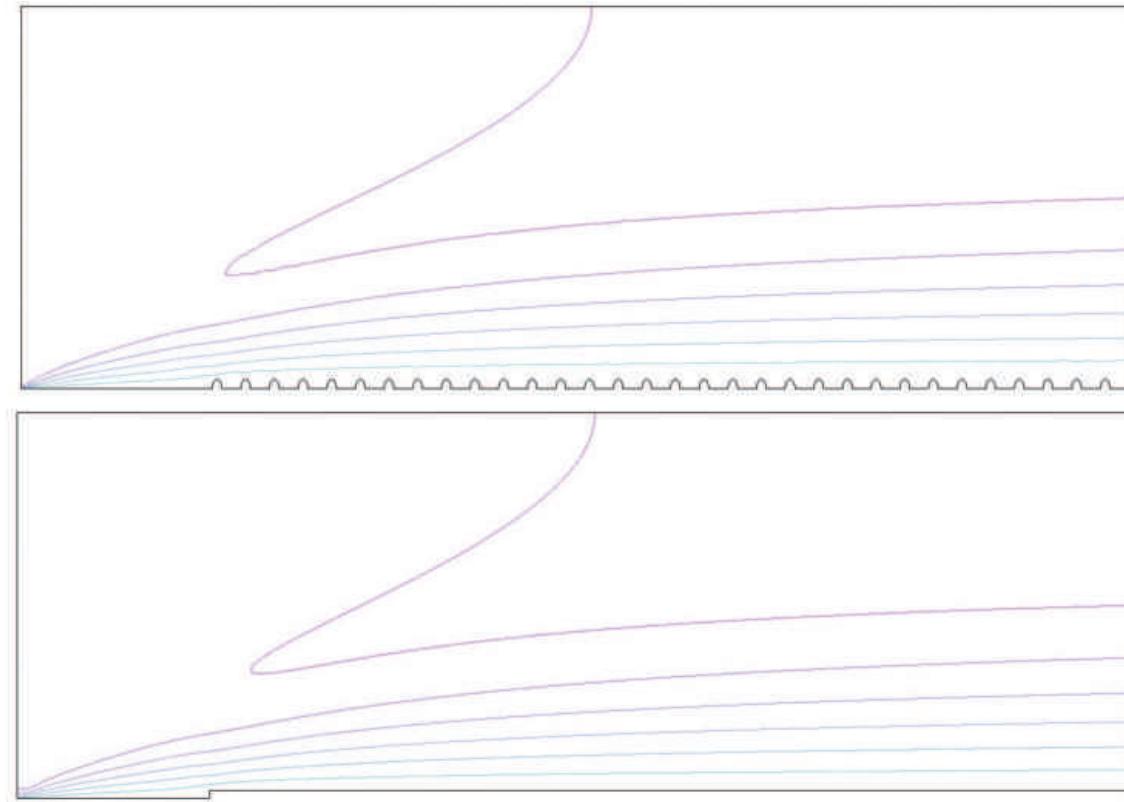


FIG. 3.20 – Isocontours de $u = 2, 4, 6, 8, 10, 12 \text{ m.s}^{-1}$ pour le système rugueux et le système effectif pour $Re = 50$ et $l_\mu/L = 2.5 \cdot 10^{-2}$.

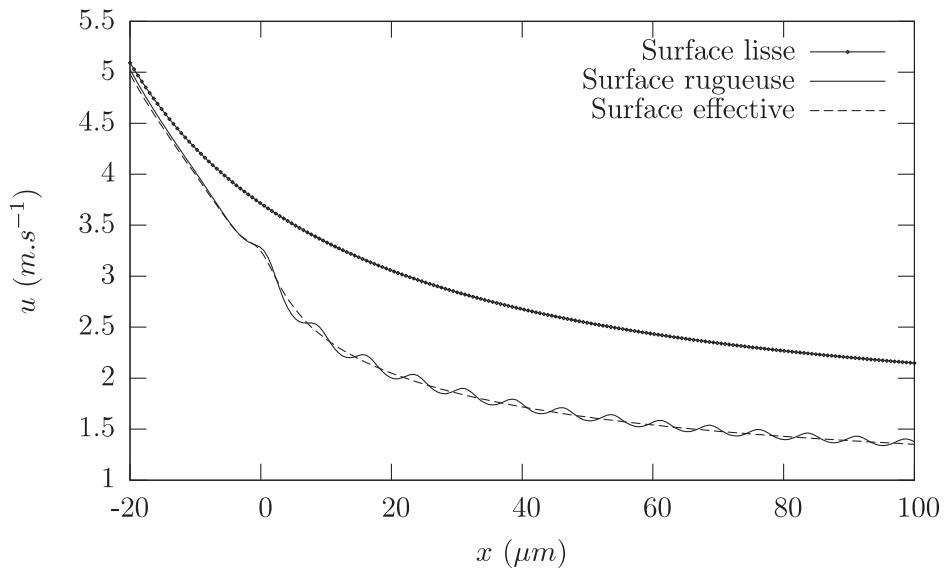


FIG. 3.21 – Distribution de u en $y = 5 \mu\text{m}$ pour un tube de lisse de diamètre L, le milieu rugueux et le milieu effectif.

3.2 Surface rugueuse

On considère maintenant le problème de la concentration. D'après le tableau 3.1, on a $\langle Da \rangle = 0.4$. Par ailleurs, on mesure le taux de cisaillement τ_h proche de la paroi ($y = 3 l$). On obtient alors des valeurs de Péclet proches de 10. Pour de telles valeurs, l'impact du nombre de Péclét local est faible sur la réactivité effective k_{eff} . Nous appliquons donc une réactivité uniforme $k_{eff} = 0.87 \langle k \rangle = 4.1 \text{ m/s}$ sur Σ_{eff} . La comparaison des champs de concentration figure 3.22 montre un bon accord qualitatif.

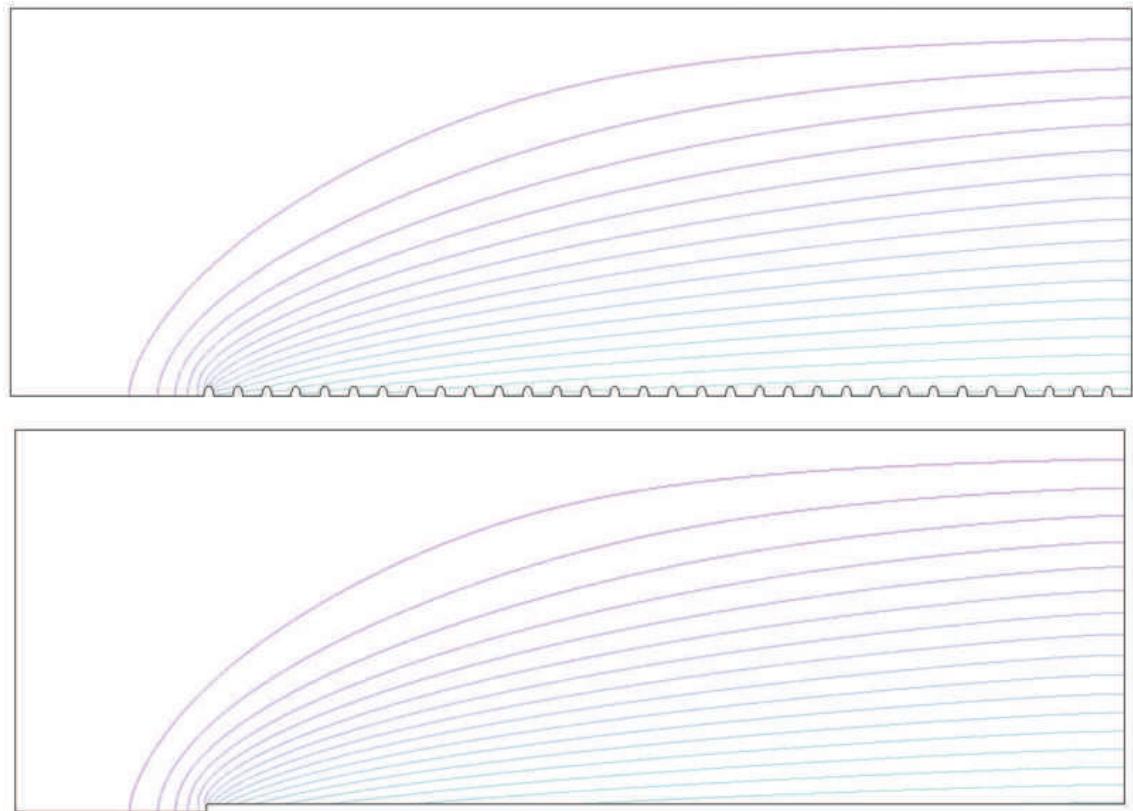


FIG. 3.22 – Isocontours $\frac{c}{C_0} = \{(0.1 + i0.05)_i\}$ pour le système rugueux et le système effectif.

En intégrant numériquement sur les parois rugueuse et effective, on obtient :

$$\frac{\int_{\Sigma} J_{rugueux} dS}{\int_{\Sigma_{eff}} J_{eff} dS} = 98.9\% \quad (3.120)$$

L'écart entre les deux flux a pour origine le fait que les hypothèses sur les séparations des échelles ne sont pas vraiment vérifiées puisqu'on a seulement $\frac{l_\mu}{L} \approx \frac{1}{5} \frac{1}{\sqrt{Re}}$. De plus, nous intégrons dans notre calcul les premières rugosités qui sont par leur caractère singulier mal décrites par un modèle moyen. Nous choisissons donc un cas difficile et obtenons tout de même une réponse très satisfaisante. Ceci valide donc notre approche effective pour un problème d'écoulement laminaire réactif sur une paroi rugueuse.

Dans cette partie, nous avons abordé la construction de loi de paroi pour des écoulements laminaires au-dessus d'une paroi rugueuse. Il est démontré dans Achdou et al. (1998b) que la paroi effective est une paroi lisse avec une simple condition d'adhérence. Nous avons montré comment construire une telle paroi à partir de la paroi détaillée. Il faut remarquer que, contrairement à la réactivité effective, la hauteur effective δ est une propriété intrinsèque au couple rugosité-fluide et qu'elle ne dépend pas des conditions de vitesse de l'écoulement. Cet outil nous a permis de construire une procédure permettant le calcul efficient d'un écoulement réactif sur paroi rugueuse.

Cette approche a permis de confirmer, pour les conditions caractéristiques de l'échelle microscopique de notre application, l'impact relatif des nombres adimensionnels déjà observé dans le cas lisse. On peut donc conclure que, à notre échelle microscopique, l'effet majeur sur la réactivité effective à paroi figée est la compétition diffusion-réaction. Cette compétition est traduite par le nombre de Damköhler Da . Les effets dus à la compétition convection-diffusion sont de second ordre pour les régimes d'écoulement de l'échelle microscopique. Nous n'avons pas effectué d'étude en régime turbulent et malheureusement ce régime n'est pas obtenu en prenant $Re \gg 1$ dans un calcul laminaire. On peut cependant dire que dans le cas rugueux comme dans le cas lisse, si le nombre de Damköhler défini alors par rapport à la diffusion turbulente $D^{(t)}$ est petit devant l'unité, le champ de concentration est uniforme. Dans ce cas, quelles que soient les valeurs de Pe , on aura $k_{\text{eff}} = \langle k \rangle$.

Dans ce chapitre, nous avons étudié la paroi à rugosité figée. Or, celle-ci évolue au cours du temps. Nous allons donc maintenant étudier l'impact de cette évolution sur la réactivité effective en couplant la récession et l'effet majeur du transport qui est la compétition diffusion-réaction traduite par le nombre de Damköhler .

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié le comportement effectif de surfaces réactives non-uniformes pour des temps courts devant le temps de récession. Les surfaces considérées sont surmontées par une couche limite laminaire incompressible.

Tout d'abord, nous avons traité le cas d'une surface lisse. Le problème a été résolu par la méthode de prise de moyenne volumique. Le résultat obtenu par Wood et al. (2000) en diffusion pure a alors été étendu à un problème de diffusion-convection avec un contraste de réactivité fini entre les phases. Nous avons alors obtenu une hiérarchie des effets des couplages sur la réactivité effective. Ainsi, lorsque le nombre de Damköhler est grand ou petit devant l'unité, les nombres de Péclet et Reynolds n'ont pas d'influence sur la réactivité effective. Pour que l'écoulement influe sur la réactivité, il faut une double condition : $Da = O(10)$ et $Pe > 100$. Si une de ces conditions n'est pas satisfaite, le système se comporte comme en diffusion pure. Dans notre application, le nombre de Damköhler est égal à la dizaine uniquement dans l'hypothèse où les composites seraient parmi les carbones les plus réactifs. Or, nous pourrons montrer au chapitre 6 que les carbones utilisés dans les composites C/C sont dans la fourchette basse des réactivités. On a alors $Da \ll 10$ aux deux échelles

3.3 Conclusion

d'étude. Il ne semble donc pas que l'écoulement puisse jouer un rôle important sur la réactivité effective initiale du composite.

Dans une seconde partie, nous avons traité le cas d'une surface rugueuse. Une méthode pour le calcul du milieu effectif vis-à-vis de la vitesse a été mise au point. On a pu montrer qu'une procédure simple permet de remplacer une paroi rugueuse par une paroi lisse tout en assurant la conservation des propriétés moyennes de l'écoulement. Le problème d'homogénéisation du champ de concentration a été traité par simulation numérique directe. Ces calculs ont permis de confirmer le faible impact du nombre de Péclet sur la réactivité effective à l'échelle microscopique. Le calcul n'étant pas fait dans le cas turbulent, il est difficile de conclure formellement sur le cas de l'échelle mésoscopique.

Chapitre 4

Étude analytique de surfaces récessives

Dans le chapitre consacré aux surfaces non-récessives, le temps d'étude de l'ablation était petit devant celui de la récession. Il n'y avait pas de modification de la surface durant le temps d'étude. Cette étude a permis de montrer que, pour notre application, l'écoulement ne joue pas un rôle prépondérant à paroi figée. Nous considérons ainsi maintenant un système dont la surface réactive recule de façon non uniforme. Ceci permet d'étudier l'impact de la récession sur le comportement effectif du composite.

Lors de la récession de la paroi, il y a un mouvement relatif de la paroi par rapport au repère lié à l'axe de la tuyère. On emploiera alors le terme de repère global. On définit un repère local lié à la paroi. Le repère local se déplace ainsi radialement par rapport au repère global à la vitesse de recul moyenne de la paroi. Ces deux repères sont représentés figure 4.1. Lors d'un tir, la variation relative de la section du col de la tuyère est faible : quelques millimètres pour une section de 80 cm pour celle de l'accélérateur d'Ariane 5. La modification des épaisseurs de couche limite au cours du tir sera donc négligée. La couche limite de concentration accompagne le recul de la paroi avec une hauteur constante. De façon naturelle, le problème de transport est alors écrit dans le repère local. Nous supposons de plus que la vitesse dans le repère global est égal à la vitesse moyenne de récession. Ceci signifie que le déplacement de la couche limite est compensé par l'écoulement. Ainsi, la vitesse dans le repère local de l'écoulement est nulle($Pe = 0$).

Dans le repère local, les points qui composent la paroi se déplacent relativement les uns aux autres. Le lien entre le déplacement lagrangien et eulérien de l'interface est illustré dans l'annexe A.

Les matériaux visés ayant une structure périodique, l'étude se porte sur un motif élémentaire du matériau. Les couplages retenus sont alors ceux donnés par la figure 4.2.

Sous les hypothèses que nous avons choisies ici, le problème que l'on résout est donné par les équations suivantes :

$$\partial_t c = D \Delta c \text{ sur } \Omega \quad (4.1)$$

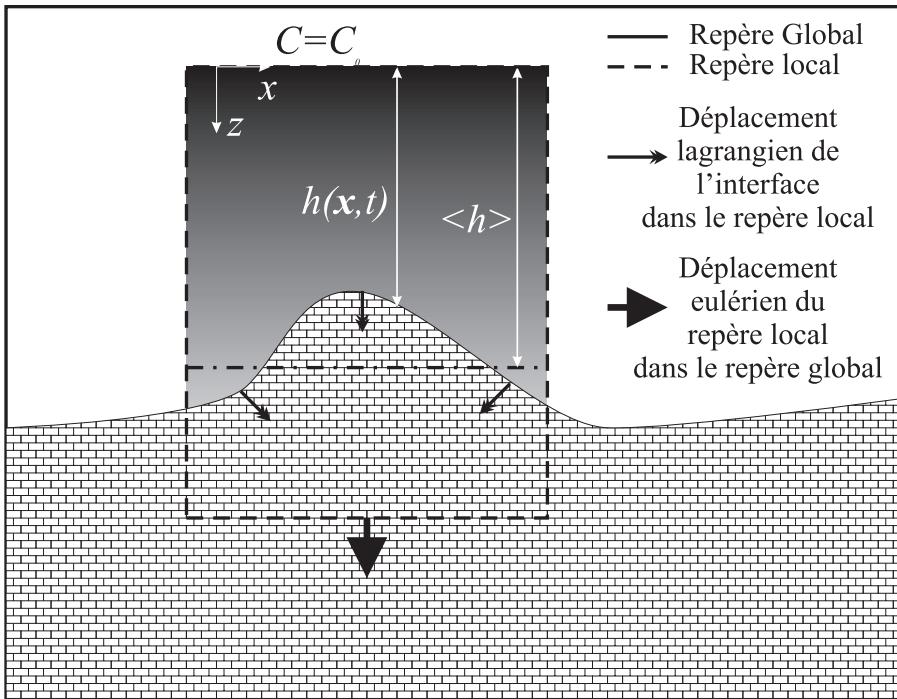


FIG. 4.1 – Repères et déplacements utilisés dans les modèles de surface récessive.

$$(c\underline{v} + D\underline{\nabla c}) \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} + k c = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (4.2)$$

$$\underline{v} - (\Upsilon k c) \underline{n}_{\gamma\kappa} = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (4.3)$$

Comme nous l'avons vu au chapitre 2, dans notre application la vitesse de récession est très lente devant celle de diffusion : $\varpi Da = \frac{\Upsilon k l}{D} \ll 1$. Avec cette observation, le système étudié sera :

$$\partial_t c = D\Delta c \text{ sur } \Omega \quad (4.4)$$

$$D\underline{\nabla c} \cdot \underline{n} = k c \text{ sur } \Sigma \quad (4.5)$$

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c) \underline{n} \text{ sur } \Sigma \quad (4.6)$$

De même, le temps caractéristique de la récession étant grand devant celui de la diffusion, on pourra considérer que le champ de concentration est celui correspondant au régime stationnaire vis-à-vis de la diffusion. On aura alors le problème suivant :

$$D\Delta c = 0 \text{ sur } \Omega \quad (4.7)$$

$$D\underline{\nabla c} \cdot \underline{n} = k c \text{ sur } \Sigma \quad (4.8)$$

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c) \underline{n} \text{ sur } \Sigma \quad (4.9)$$

Pour mieux appréhender les effets qui contrôlent l'évolution morphologique et la réactivité effective de la paroi, nous poussons l'étude analytique le plus loin possible. Notre étude analytique débute par le cas du régime réactif ($Da \ll 1$). Ce régime permet d'étudier l'effet de la récession sur le comportement en ablation.

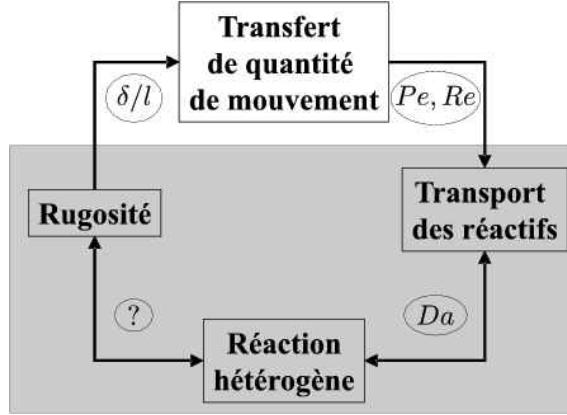


FIG. 4.2 – Couplages retenus dans l'étude d'une paroi récessive.

4.1 Régime réactif

Dans cette partie, le cas de l'ablation en régime contrôlé par la réaction ($Da = \frac{k l}{D} \ll 1$) est étudié. Nous avons vu au paragraphe 1.1.3 que pour un carbone la réactivité pouvait s'écrire :

$$k = K T_s e^{-E_a/RT_s} \quad (4.10)$$

avec K_s entre 1 et $50 \text{ m.s}^{-1}.K^{-1}$ et $E_a = 40 \text{ kcal/mol}$. Par ailleurs, on a $l = l_\mu = 10^{-5} \text{ m}$ à l'échelle microscopique et $D = 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. En négligeant la variation de D avec la température, on trouve que si la température est inférieure à $T = 1250 \text{ K}$, on a $Da < 10^{-2}$ quelque soit le type de carbone. Ce régime est représentatif des applications à températures "moyennes" des fibres de carbone comme dans les disques de frein.

Sur le plan théorique, ce régime permet d'étudier l'évolution morphologique de la surface sans influence de la rugosité sur le champ de concentration.

Nous proposons un modèle prédictif permettant de calculer la surface exposée pour la fibre, la hauteur de celle-ci ainsi que le temps nécessaire pour obtenir le régime stationnaire.

En régime réactif, le champ de concentration est uniforme. Le modèle exposé au chapitre 2.3.1 devient simplement, dans le repère global :

$$c(\underline{x}) = C_0 \quad (4.11)$$

$$\underline{y} = -\Upsilon k C_0 \underline{n} \quad (4.12)$$

On note alors que dans ce modèle, les gradients de Υ et k jouent un rôle identique. Ainsi, en régime réactif, un matériau où le produit Υk est uniforme se comporte comme un solide homogène. Dans cette partie, les surfaces étudiées seront de volume molaire uniforme, tout le caractère hétérogène étant porté par k .

Dans les modèles analytiques que nous développons dans ce chapitre, il est plus aisés de suivre la position du front à une certaine abscisse x . On recherche alors

en un point x quelle est la vitesse de recul verticale $\partial_t h$. En nous appuyant sur la représentation donnée figure 4.3, on a :

$$\partial_t h = \frac{\underline{v} \cdot \underline{n}}{\underline{n} \cdot \underline{e}_z} = \frac{-\Upsilon k C_0}{\underline{n} \cdot \underline{e}_z} \quad (4.13)$$

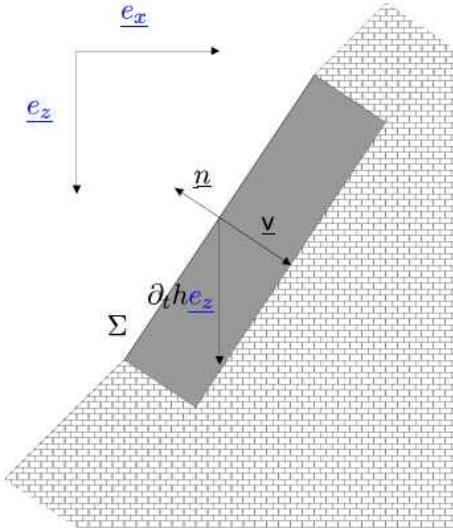


FIG. 4.3 – Paroi récessive Σ .

4.1.1 Évolution morphologique

Le cas considéré ici est celui d'un composite dont le motif élémentaire est une fibre verticale entourée par de la matrice. On se place en coordonnées cylindriques. On désigne par k_f la réactivité de la fibre et par k_m celle de la matrice. On pose $\tilde{K} = \frac{k_m}{k_f} > 1$.

On se place en régime réactif. La concentration c est alors uniforme dans le domaine fluide : $c(\underline{x}) = C_0$. On considère un incrément de temps infinitésimal dt . L'évolution d'une surface avec $\frac{k_m}{k_f} = \frac{4}{3}$ est représentée figure 4.4.

Temps $t = t_0$ Au temps initial , la surface est plane.

Temps $t_0 + dt$ Pendant l'intervalle de temps dt , la matrice recule verticalement à la vitesse $\partial_t h_m = \varpi k_m$ avec $\varpi = \Upsilon C_0$. Elle reste donc plane. Durant le même intervalle de temps, le haut de la fibre recule aussi mais à la vitesse $\partial_t h_f = \varpi k_f$. Les points de la paroi latérale de la fibre reculent proportionnellement au temps durant lequel ils ont été exposés au gaz. Nous obtenons alors une surface formée par un cône tronqué. Soit θ_c , l'angle entre \underline{e}_z et la paroi ainsi obtenue. On a $\sin \theta_c = \frac{\partial_t h_f}{\partial_t h_m} = \frac{k_f}{k_m}$.

4.1 Régime réactif

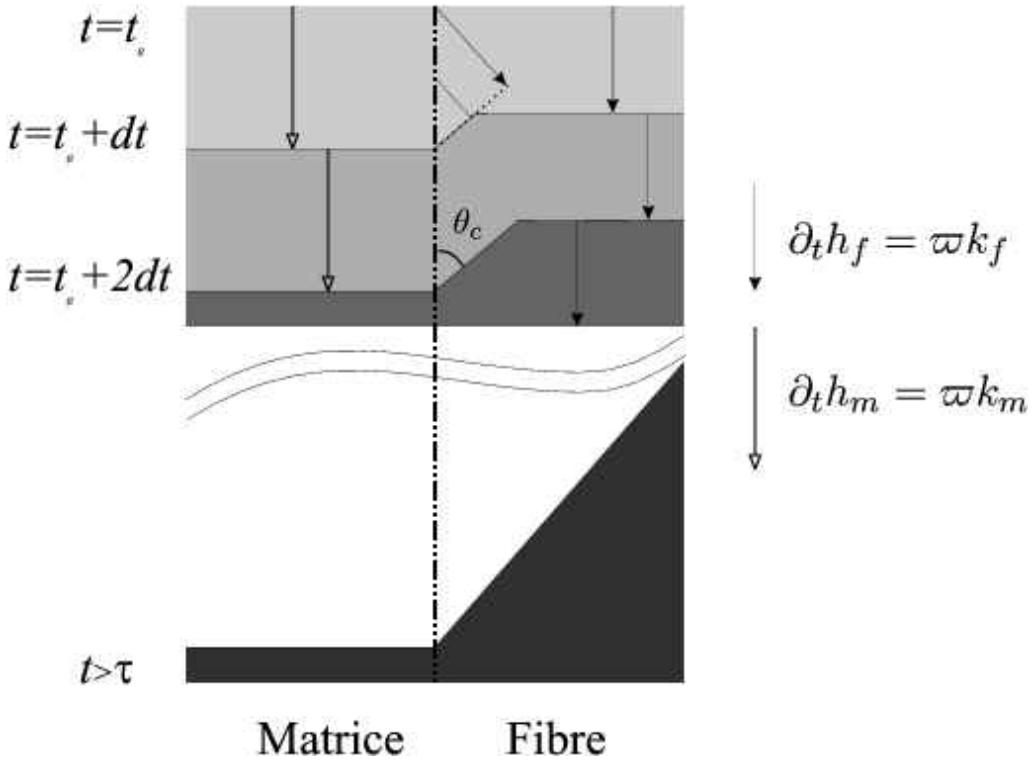


FIG. 4.4 – Représentation de l'évolution d'un système fibre-matrice avec $\frac{k_m}{k_f} = \frac{4}{3}$.

On en déduit alors la normale \underline{n} à la paroi de la fibre dirigée vers le fluide :

$$\underline{n} = \begin{Bmatrix} \cos \theta_c \\ -\sin \theta_c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sqrt{1 - \left(\frac{k_f}{k_m}\right)^2} \\ -\frac{k_f}{k_m} \end{Bmatrix} \quad (4.14)$$

Temps suivants Le phénomène décrit se reproduit à l'identique pour les segments qui sont dégagés latéralement. Les parties déjà dégagées se déplacent suivant leur normale et conservent leur pente. On vérifie que les deux segments ainsi obtenus sont bien alignés. La transformation se poursuit ainsi jusqu'à l'obtention de la pointe du cône. Le profil du cône ne se modifie plus. Sa paroi correspond aux points qui vérifient l'équation :

$$\cos \theta_c (r - R_f) - \sin \theta_c z = 0 \quad (4.15)$$

La hauteur du cône est ainsi :

$$h_c = R_f \cot \theta_c = R_f \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \quad (4.16)$$

On retrouve que pour un milieu homogène ($\tilde{K} = 1$) la hauteur de la pointe est nulle et que la surface reste lisse. Lorsque le contraste est grand ($\tilde{K} \gg 1$), on a une

proportionnalité simple $\frac{h_c}{R_f} = \tilde{K}$. Les morphologies stationnaires correspondant à $\tilde{K} = 2, 5, 10$ sont données figure 4.5.

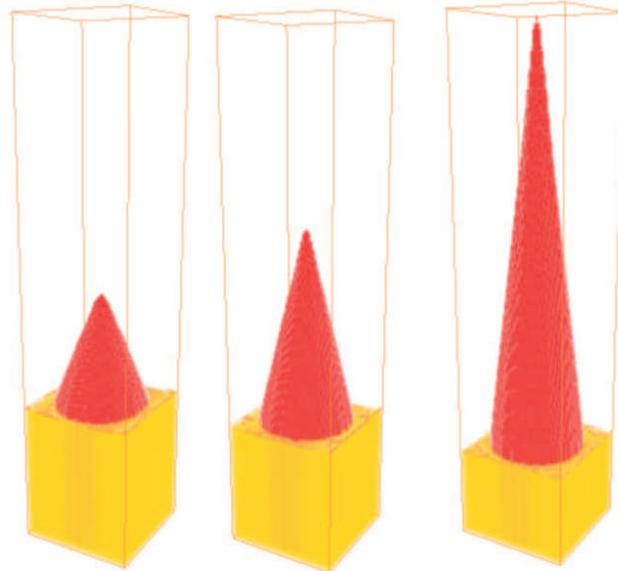


FIG. 4.5 – Représentation des profils obtenus pour $\tilde{K} = 2, 5, 10$ (Résultats obtenus par simulation numérique).

4.1.2 Vitesse stationnaire et réactivité effective

Nous avons vu que le cône était un profil stationnaire. Il est bon de vérifier que ce critère morphologique est bien en accord avec une vitesse de récession uniforme. Dans le repère global, la vitesse de recul de la matrice est simple à évaluer :

$$V_{a,m} = \partial_t h_m = \varpi k_m \quad (4.17)$$

Pour la fibre, on a :

$$V_{a,f} = -\partial_t h_f / n_z = \varpi k_f \tilde{K} = \varpi k_m \quad (4.18)$$

On obtient bien une vitesse de recul uniforme dictée par la réactivité de la matrice.

De même, à l'échelle de chaque phase, la stationnarité du profil dans le repère local implique l'égalité suivante :

$$\varpi k_m \frac{S_m}{S_{m,p}} = \varpi k_f \frac{S_f}{S_{f,p}} \quad (4.19)$$

où S_m et S_f sont les surfaces mouillées et $S_{m,p}$ et $S_{f,p}$ sont les surfaces respectives contenues dans une section horizontale de matériau non ablaté. Cette relation est générale et dépasse le cas géométrique considéré ici.

4.1 Régime réactif

Dans notre cas, tous les points de la matrice reculent à la même vitesse et la matrice reste plane. On a donc $\frac{S_m}{S_{m,p}} = 1$. Cela amène alors à :

$$\frac{S_f}{S_{f,p}} = \tilde{K} \quad (4.20)$$

On a les surfaces suivantes :

$$S_{f,p} = \pi R_f^2 \quad (4.21)$$

$$S_f = 2\pi \sqrt{R_f^2 + h_c^2} \quad (4.22)$$

En utilisant la définition de h_c par l'équation 4.16, on retrouve bien l'équation 4.20.

Réactivité effective stationnaire

Le flux consommé par unité de surface projetée est donné par :

$$\langle J \rangle = \frac{1}{\Sigma_p} \int_{\Sigma} k \, cdS \quad (4.23)$$

Sous les hypothèses utilisées ici, on obtient en régime stationnaire :

$$\langle J \rangle = \frac{1}{\Sigma_p} (k_m C_0 S_m + k_f C_0 S_f) \quad (4.24)$$

Le champ de concentration étant uniforme, la réactivité effective est simplement définie par $k_{eff} = \frac{\langle J \rangle}{C_0}$. En utilisant l'équation 4.20, on a alors :

$$k_{eff} = \frac{1}{S_m + S_{f,p}} (S_m k_m + S_{f,p} k_f) = k_m \quad (4.25)$$

La réactivité effective ainsi obtenue est celle du constituant le plus réactif :

$$k_{eff} = \max (k(\underline{x})) \quad (4.26)$$

4.1.3 Régime Transitoire

On considère maintenant le temps pendant lequel la morphologie de la paroi se modifie. A partir d'une surface lisse, on obtient un tronc de cône qui croît jusqu'à l'obtention d'un cône complet. Le plateau du tronc de cône monte par rapport à la base, à la vitesse $\varpi(k_m - k_f)$. A l'instant t , la hauteur du tronc de cône est $h_{tr} = \varpi(k_m - k_f)t$. Soit τ_K le temps nécessaire pour atteindre le régime stationnaire $h_{tr} = h_c$. Avec l'équation 4.16, on obtient :

$$\tau_K = \tau_M \frac{\sqrt{\tilde{K}^2 - 1}}{\tilde{K} - 1} \quad (4.27)$$

avec $\tau_M = \frac{R_f}{\varpi k_f}$. On note que τ_K est une fonction croissante de \tilde{K} à k_f fixé et que $\lim_{\tilde{K} \rightarrow \infty} \tau_K = \tau_M$. La durée du transitoire est proportionnelle à la dimension caractéristique de l'élément le plus résistant. Le rôle protecteur de l'élément le plus résistant, s'exerce durant le transitoire mais disparaît complètement lorsque le régime est établi. On donne à la figure 4.6 l'évolution de la réactivité effective pour un contraste $\tilde{K} = 4$ et un taux de fibre $\phi_f = 0.5$.

A titre d'exemple, avec $C_0 = 10 \text{ mol.m}^{-3}$, $\Upsilon = 6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$ et $k_f = 5 \text{ m.s}^{-1}$, pour une fibre de rayon $R_f = 3 \mu\text{m}$, on a $\tau_M = 0.01 \text{ s}$. Tout étant égal par ailleurs, pour une baguette de rayon $R_b = 1.5 \text{ mm}$, on a $\tau_M = 5 \text{ s}$. Ce calcul montre qu'une approche stationnaire est suffisante pour décrire l'ablation au niveau des fibres lorsque le régime est réactif. A l'échelle des fils et des baguettes, on ne peut pas faire, *a priori*, l'économie d'une approche transitoire.

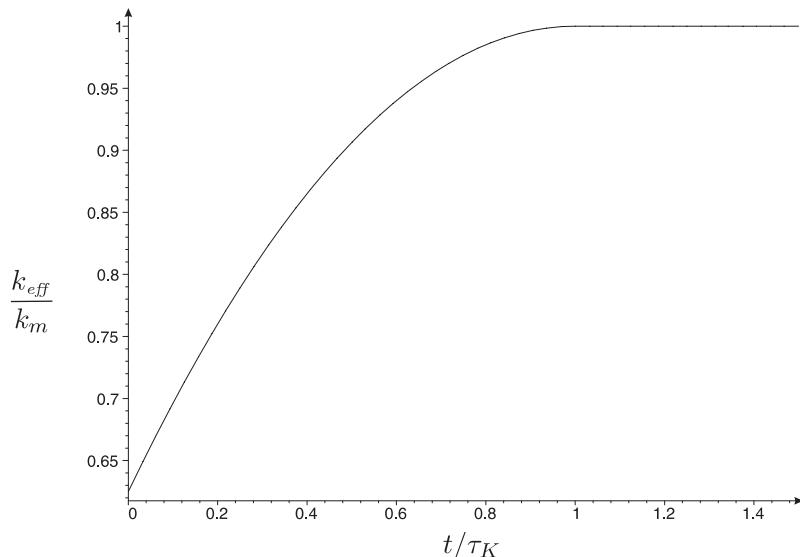


FIG. 4.6 – Évolution de la réactivité effective au cours du temps pour $\tilde{K} = 4$ et $\phi_f = 0.5$

4.1.4 Optimisation des fils et baguettes en régime réactif

Comme nous l'avons montré lorsque la température est suffisamment basse ($T < 1300 \text{ K}$ pour les carbones les plus réactifs), les fibres sont oxydées en régime réactif. Nous proposons ici une réflexion sur les optimisations possibles des fils et des baguettes dans ce régime. Bien qu'elles soient établies pour $Da \approx 0$, les pistes de conception qui sont exposées ici restent valides pour Da petit. Nous avons vu au paragraphe 1.2.2, que dans le fil comme dans la baguette, la phase la plus faible du matériau est le dépôt de pyrocarbone qui entoure les fibres. On suppose ici que ce dépôt est suffisamment épais pour qu'il constitue l'intégralité de la matrice. On note alors ici k_m la réactivité de ce dépôt.

En régime stationnaire, la réactivité effective du matériau est égale au maximum

4.1 Régime réactif

des réactivités individuelles. Pour résister à l'oxydation, le caractère homogène du composite est ainsi déterminant.

Les efforts de conception doivent porter principalement sur la qualité de la phase la plus faible. Il faut bien intégrer que, en régime stationnaire, la phase faible, même peu présente, contrôle totalement le comportement effectif du matériau indépendamment des caractéristiques des autres phases. Dans le cas où la phase la plus faible ne peut être améliorée, il est possible d'"économiser" en réduisant la quantité ou (et) la qualité de la phase la plus forte sans pour autant modifier le comportement effectif stationnaire.

Les phases fortes n'interviennent pas dans le comportement effectif stationnaire du composite. Cependant, il faut se rappeler que le régime transitoire dépend des caractéristiques de la phase forte (R_f et k_f). Il est donc possible de jouer sur ces paramètres pour augmenter la tenue du matériau pendant les premiers instants. Lorsque R_f augmente, le temps τ augmente. Le composite est donc plus résistant pendant une durée plus longue. On remarque ainsi que, à taux de fibre constant, l'utilisation de fibres de rayon supérieur augmente la résistance du composite. De plus, lorsque k_f diminue, le k_{eff} initial diminue puisqu'il est alors égal à la moyenne arithmétique des réactivités. Le composite est moins réactif au temps initial. De plus, k_f influe aussi sur le temps τ . A réactivité k_m donnée, τ augmente lorsque k_f diminue.

Nous insistons sur le fait que l'oxydation est un processus de maillon faible en régime réactif. En terme de conception, il faut retenir que :

- En régime stationnaire, la phase faible détermine seule le comportement du matériau ;
- Augmenter la dimension de la phase forte ralentit l'affaiblissement du matériau durant le transitoire ;
- Réduire la réactivité de la phase forte permet d'améliorer la résistance initiale et d'augmenter la durée du transitoire.

Un modèle pour la récession en régime réactif ($Da \ll 1$) a été construit. Il permet de décrire simplement l'évolution d'un système hétérogène. Les rugosités stationnaires alors obtenues sont angulaires et se rapprochent des pointes observées sur les microographies des pièces de col.

Cette étude a permis d'obtenir la réactivité effective du système dans ce régime réactif. En régime stationnaire : $k_{eff} = \max(k(x))$. Ceci montre que le comportement effectif est alors un processus de maillon faible.

La durée du transitoire est elle dictée par les caractéristiques chimiques et géométriques de la phase la moins réactive. On démontre le rôle protecteur de la phase la moins réactive durant cette période.

Nous avons vu en première partie que, dans notre application, le nombre de Damköhler pouvait *a priori* être supérieur à 1. Il faut donc développer un modèle plus complexe intégrant le couplage concentration-récession.

4.2 Ablation sous flux 1D

En régime réactif, le champ de concentration était découpé du comportement de la paroi. Or, nous avons vu dans le cas des modèles non-récessifs que la compétition diffusion-réaction joue un rôle important sur la réactivité effective. Le cas général n'est pas abordable par un modèle analytique et sera abordé au chapitre suivant par l'utilisation d'un modèle numérique. Pour aborder analytiquement ce couplage, un modèle d'ablation sous flux unidimensionnel est développé. Dans ce modèle, on décrit ainsi les surfaces pour lesquelles, la perturbation du champ de concentration est nulle.

Ce modèle permet d'observer l'impact de la compétition diffusion/réaction sur le comportement récessif tout d'abord sur une surface homogène mais rugueuse puis sur une surface hétérogène. Dans cette partie, les résultats donnés dans Duffa et al. (2005) sont repris en partie et étendus au cas d'une surface hétérogène.

4.2.1 Équation d'évolution de la surface

Dans le repère global, la paroi solide Σ est décrite par une fonction $\mathcal{S} = \mathcal{S}(r, z, t)$ telle que les points de Σ vérifient $\mathcal{S} = 0$. L'étude se limite à l'étude de surfaces sans recouvrements. Le repère utilisé est défini figure 4.8.

En tout point où elle est différentiable, l'évolution de la paroi obéit à l'équation de conservation suivante :

$$\partial_t \mathcal{S} = -\underline{\mathbf{v}} \cdot \underline{\nabla \mathcal{S}} \quad (4.28)$$

où $\underline{\mathbf{v}}$ est la vitesse locale de l'interface que nous avons déjà introduite. Cette vitesse $\underline{\mathbf{v}}$ est donnée par l'équation 2.8 que l'on reprend ici :

$$\underline{\mathbf{v}} = (\Upsilon \underline{\mathbf{J}} \cdot \underline{\mathbf{n}}) \underline{\mathbf{n}} \quad (4.29)$$

où $\underline{\mathbf{n}}$ est la normale sortante au solide. On a de plus Katardjiev (1989a) :

$$\underline{\mathbf{n}} = \underline{\nabla \mathcal{S}} / \|\underline{\nabla \mathcal{S}}\| \quad (4.30)$$

Ainsi l'équation 4.28 devient :

$$\partial_t \mathcal{S} = -\Upsilon \underline{\mathbf{J}} \cdot \underline{\nabla \mathcal{S}} \quad (4.31)$$

Nous faisons l'hypothèse que le flux est purement vertical $\underline{\mathbf{J}} = J_z \underline{\mathbf{e}_z}$. Pour illustrer le calcul on se place dans un cas à symétrie cylindrique. Les fonctions ne dépendent alors plus de θ .

Pour expliciter la fonction \mathcal{S} , on utilise la hauteur locale $h(r, t)$ telle que $\mathcal{S} = h(r, t) - z$. Cette définition n'apporte pas de restriction supplémentaire par rapport aux hypothèses faites plus haut sur les caractéristiques de la surface. Le gradient de S est alors :

$$\underline{\nabla \mathcal{S}} = \begin{pmatrix} \partial_r h \\ -1 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

et la normale à la paroi :

$$\underline{\nabla} \underline{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + (\partial_r h)^2}} \begin{pmatrix} \partial_r h \\ -1 \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

L'équation 4.31 donne alors :

$$\partial_t h - \Upsilon J_z = 0 \quad (4.34)$$

4.2.2 Surface homogène

La surface considérée ici est homogène. Soit k la réactivité de la paroi. On recherche à partir de l'équation 4.34, les profils stables de la paroi. Cette recherche est motivée par l'observation sur certaines fibres d'une rugosité semblable à celle illustrée par la figure 4.7. Les rugosités sont de l'échelle du rayon de la fibre. A cette échelle la fibre est chimiquement homogène. Le contraste de réactivité ne semble donc pas être la source de cette rugosité. Par ailleurs, nous avons pu montrer que le temps caractéristique de la récession est à chaque échelle très grand devant celui de la convection. Les tourbillons ne peuvent donc pas être à l'origine d'un tel motif même s'il peuvent ensuite le renforcer. En un point de la paroi placée à la hauteur

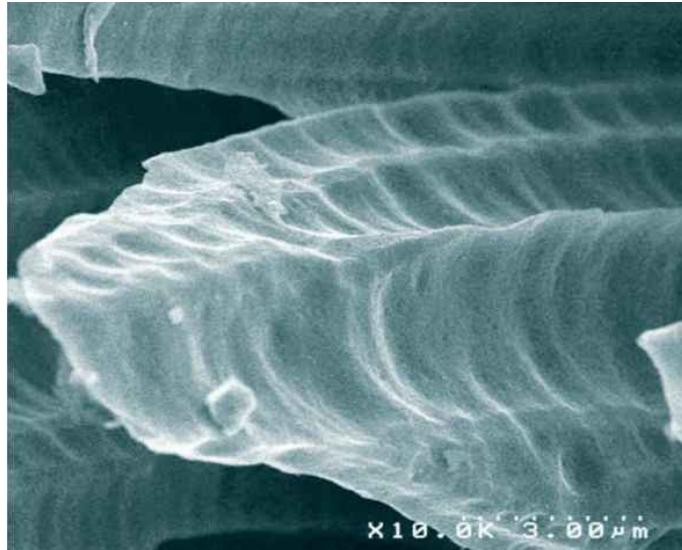


FIG. 4.7 – Observation MEB d'une fibre d'un composite C/C (extrait de Duffa et al. (2005)).

h , on a :

$$\underline{J} \cdot \underline{n} = -k c(h) \text{ sur } \Sigma \quad (4.35)$$

Par ailleurs, le flux diffusif est :

$$\underline{J} = D \frac{C_0 - c(h)}{h} \underline{e}_z \quad (4.36)$$

En utilisant le fait que $n_z = \frac{-1}{\sqrt{1+(\partial_r h)^2}}$, la combinaison des équations 4.35 et 4.36 amène à :

$$c(h) = \frac{C_0}{1 - \frac{h}{\mathcal{L}} \frac{1}{n_z}} = \frac{C_0}{1 + \frac{h}{\mathcal{L}} \sqrt{1 + (\partial_r h)^2}} \quad (4.37)$$

où $\mathcal{L} = \frac{D}{k}$ est une longueur caractéristique.

En injectant l'équation 4.35 avec la concentration donnée par 4.37 dans 4.34, on obtient :

$$\partial_t h = \frac{\Upsilon C_0 k}{\frac{h}{\mathcal{L}} - n_z} \quad (4.38)$$

En régime établi, tous les points reculent avec la même vitesse. On a donc $\partial_r(\partial_t h) = 0$. En régime établi, il n'y a pas d'évolution de la pente locale au cours du temps. On a donc $\partial_t(\partial_r h) = 0$. Les deux propositions sont bien équivalentes lorsque les propriétés de continuité de la surface sont suffisantes. Soit V_a cette vitesse de récession uniforme. On définit alors \bar{h} tel que :

$$\partial_t h = V_a = \frac{\Upsilon C_0 k}{\frac{\bar{h}}{\mathcal{L}} + 1} \quad (4.39)$$

En comparant cette définition avec l'équation 4.38, on observe que \bar{h} correspond à la hauteur où se situeraient les portions horizontales de la surface ($n_z = -1$). En combinant l'équation 4.38 et la définition de \bar{h} par 4.39, on obtient :

$$n_z = \frac{\bar{h} - h}{\mathcal{L}} - 1 \quad (4.40)$$

L'équation 4.40 donne deux solutions ; une solution plane pour $n_z = -1$ qui est la solution triviale attendue $h(r) = \bar{h}$ et une solution non plane :

$$h(r) = \bar{h} - \mathcal{L} \pm \sqrt{\mathcal{L}^2 - (r - \bar{r})^2} \quad (4.41)$$

où \bar{r} est tel que $n_z(r = \bar{r}) = -1$. La continuité de la paroi entre les portions planes et courbes impose $h(\bar{r}) = \bar{h}$. On a donc :

$$h(r) = \bar{h} - \mathcal{L} + \sqrt{\mathcal{L}^2 - (r - \bar{r})^2} \quad (4.42)$$

En élevant cette relation au carré, on a :

$$(h - (\bar{h} - \mathcal{L}))^2 + (r - \bar{r})^2 = \mathcal{L}^2 \quad (4.43)$$

La surface est donc formée localement par un arc de cercle de rayon \mathcal{L} centré en $C(\bar{r}, \bar{h} - \mathcal{L})$.

Une surface stationnaire est ainsi une collection d'arcs concaves de rayon \mathcal{L} connectés à des portions planes $h = \bar{h}$. Un exemple de surface est représenté figure 4.8. Les conditions de raccord entre les arcs ainsi que la démonstration de la

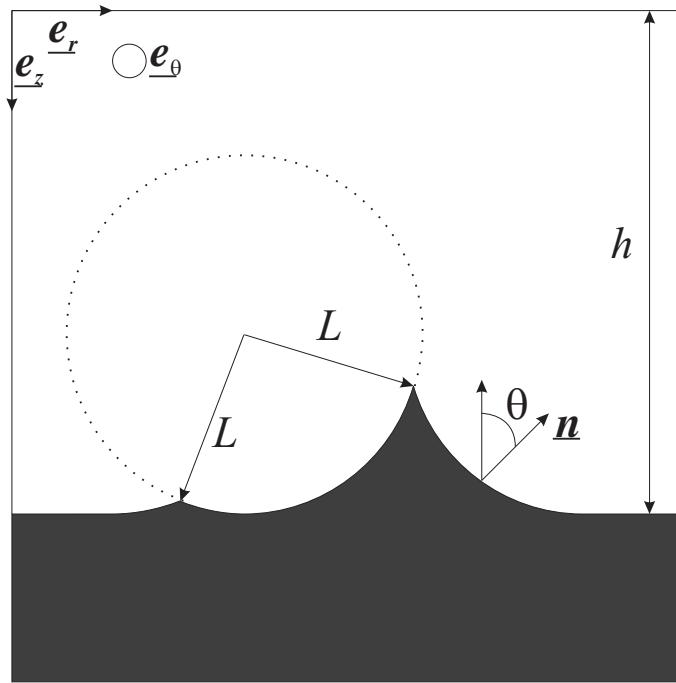


FIG. 4.8 – Système de coordonnées et représentation d'une surface stationnaire.

stabilité des ces profils est donnée dans Duffa et al. (2005). Le détail du profil de la surface dépend de la morphologie initiale de la surface.

Une méthode de simulation 2D de l'évolution de surface sous flux 1D a été développée. Elle est basée sur une application originale du principe de Huygens (Katardjiev, 1989a). Cette méthode offre une description pertinente des singularités de la surface ce qui ne peut être obtenu en résolvant directement numériquement l'équation d'évolution. Cette méthode ainsi que plusieurs exemples de calcul validant les résultats exposés ici sont présentés en annexe A.

Discussion sur l'application

Le flux a été supposé 1D. Ceci est acceptable quand :

$$J_z \gg \max(J_r, J_\theta) \quad (4.44)$$

Ceci n'est vrai que si la pente de la surface est faible dans le cas général. Il est démontré dans Duffa et al. (2005) que pour un rapport $|J_z/J_r| = 100$, la pente peut aller jusqu'à 45° i.e. $\partial_r h = 1$.

A partir du cliché MEB présenté figure 4.7, nous avons estimé la taille des rugosités comme étant de l'ordre de $3\mu m$. Comparons cette valeur aux dimensions de la rugosité prévues par notre modèle. Nous verrons au chapitre 6 que la réactivité de la fibre est de l'ordre de $0.5 m.s^{-1}$. Par ailleurs, le coefficient de diffusion est $D = 10^{-5} m^2.s^{-1}$. On en déduit :

$$\mathcal{L} = \frac{D}{k} \approx 5 \mu m \quad (4.45)$$

On obtient donc un rayon de courbure de l'ordre de deux fois le rayon des fibres. Une rugosité formée par des quarts d'arcs aura alors une profondeur de l'ordre de $2 \mu m$. Notre modèle semble donc pouvoir expliquer les rugosités observées sur la fibre. L'étude réalisée en régime réactif a permis d'expliquer les rugosités à l'échelle du système fibre-matrice. Cette étude ne faisait pas intervenir le couplage entre la rugosité et le transport de masse. Pour étudier analytiquement cet impact, on étend le modèle d'ablation sous flux 1D aux surfaces hétérogènes.

4.2.3 Surface hétérogène

La surface étudiée est maintenant composée de deux matériaux homogènes différents : une fibre cylindrique entourée de matrice. La fibre est moins réactive que la matrice comme dans le cas réactif. Dans l'étude consacrée au régime réactif nous avons montré l'impact de la récession sur la morphologie et la réactivité effective du système. Dans le chapitre 3, nous avons étudié l'impact de la compétition diffusion-réaction sur la réactivité effective d'une surface hétérogène non-récessive. On recherche l'effet de la compétition diffusion-réaction lorsqu'elle est couplée à la récession. Pour cela on étend l'approche développée pour les surfaces homogènes aux surfaces hétérogènes.

On considère le régime établi. On pose $h_m(r)$ la hauteur relative à la matrice et $h_f(r)$ celle relative à la fibre.

Profils stationnaires

Pour la matrice, le traitement est analogue à celui exposé plus haut pour un solide homogène. Ainsi, en posant \bar{h}_m tel que :

$$\partial_t h_m = V_a = \frac{\Upsilon_m C_0 k_m}{\frac{\bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} + 1} \quad (4.46)$$

où $\mathcal{L}_m = \frac{k_m}{D}$, on a comme profil stationnaire :

$$h_m(r) = \bar{h}_m - \mathcal{L}_m + \sqrt{\mathcal{L}_m^2 - (r - \bar{r}_m)^2} \quad (4.47)$$

ou le profil plan $h_m(r) = \bar{h}_m$.

La fibre doit, elle aussi, obéir à l'équation 4.38 qui se traduit par :

$$V_a = \frac{\Upsilon_f C_0 k_f}{\frac{h_f}{\mathcal{L}_f} - n_z} \quad (4.48)$$

où $\mathcal{L}_f = \frac{k_f}{D}$. Les vitesses de récession de la fibre et de la matrice étant identiques en régime établi, on a :

$$\frac{\Upsilon_f C_0 k_f}{\frac{h_f}{\mathcal{L}_f} - n_z} = \frac{\Upsilon_m C_0 k_m}{\frac{\bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} + 1} \quad (4.49)$$

On a alors pour la fibre :

$$n_z = \frac{h_f}{\mathcal{L}_f} - \frac{\bar{h}_m + \mathcal{L}_m}{\frac{\Upsilon_m}{\Upsilon_f} \mathcal{L}_f} \quad (4.50)$$

Cette équation est l'analogue de l'équation 4.40. La résolution de 4.50 donne une solution plane :

$$h_f(r) = \bar{h}_f = \frac{1}{\mathcal{A}} \left(\mathcal{L}_f + \frac{\mathcal{L}_f}{\mathcal{L}_m} \bar{h}_m \right) - \mathcal{L}_f \quad (4.51)$$

avec $\mathcal{A} = \frac{\Upsilon_m k_m}{\Upsilon_f k_f}$ et deux solutions en arcs de cercles :

$$h_f(r) = (\bar{h}_f + \mathcal{L}_f) \pm \sqrt{\mathcal{L}_f^2 - (r - \bar{r}_f)^2} \quad (4.52)$$

avec $\partial_r h_f(\bar{r}_f) = 0$. La solution physique est la solution convexe (signe $-$) car elle donne $h_f(\bar{r}_f) = \bar{h}_f$ et assure la continuité entre les segments plans et circulaires. Le profil de la fibre est donc donné par :

$$h_f = (\bar{h}_f + \mathcal{L}_f) - \sqrt{\mathcal{L}_f^2 - (r - \bar{r}_f)^2} \quad (4.53)$$

La surface est ainsi composée d'arcs concaves de rayon de courbure \mathcal{L}_m sur la matrice et d'arcs convexes de rayon \mathcal{L}_f sur la fibre comme illustré figure 4.9.

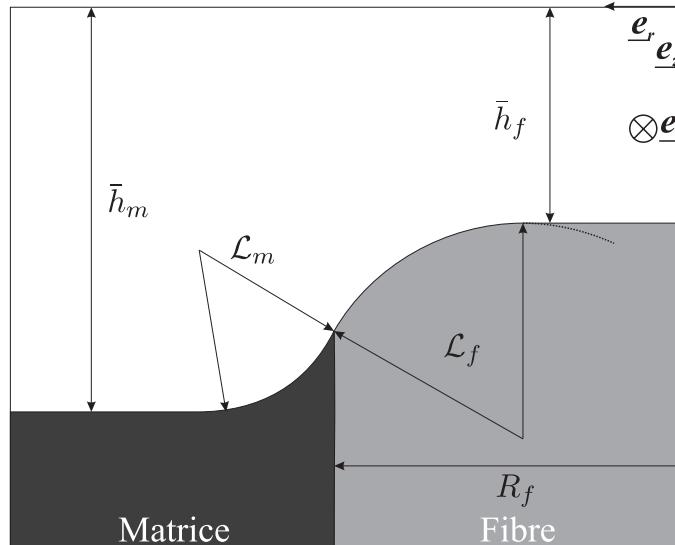


FIG. 4.9 – Représentation du profil d'une surface hétérogène stationnaire.

Remarque : Si on suppose que $\mathcal{L}_m \gg l_\mu$ et $\mathcal{L}_f \gg l_\mu$, ce qui est équivalent à $\langle Da \rangle \ll 1$, l'équation 4.50 devient :

$$n_z = -\frac{\mathcal{L}_m}{\frac{\Upsilon_m}{\Upsilon_f} \mathcal{L}_f} = \frac{\Upsilon_m k_m}{\Upsilon_f k_f} \quad (4.54)$$

La fibre est alors un cône (pente indépendante de r) dont la pente est identique à celle donnée par l'équation 4.14. On retrouve donc bien les résultats du paragraphe 4.1.

Les matériaux de notre application ont un faible gradient de densité et sont formé uniquement par du carbone. On se focalise alors sur les surfaces de volume molaire uniforme : $\Upsilon_f = \Upsilon_m$. On a alors :

$$\mathcal{A} = \frac{\Upsilon_m k_m}{\Upsilon_f k_f} = \frac{\mathcal{L}_f}{\mathcal{L}_m} = \tilde{K} \geq 1 \quad (4.55)$$

Ce qui donne :

$$\bar{h}_f = \bar{h}_m + \mathcal{L}_m - \mathcal{L}_f \quad (4.56)$$

On a alors pour les arcs :

$$h_f = (\bar{h}_m + \mathcal{L}_m) - \sqrt{\mathcal{L}_f^2 - (r - \bar{r}_f)^2} \quad (4.57)$$

$$h_m = (\bar{h}_m - \mathcal{L}_m) + \sqrt{\mathcal{L}_m^2 - (r - \bar{r}_m)^2} \quad (4.58)$$

Les deux profils se recouvrent alors complètement pour tout \bar{h}_m puisque le point le plus bas de la fibre $h_{f,max} = \bar{h}_m + \mathcal{L}_m$ est en dessous du point le plus bas de la matrice $h_{m,max} = \bar{h}_m$.

Les équations déterminant le profil de chacune des phases ont été obtenues. Chacune d'elle comporte une inconnue \bar{r} . Une de ces deux inconnues est déterminée par la continuité de la surface en $r = R_f$ interface des deux phases :

$$h_m(R_f) = h_f(R_f) \quad (4.59)$$

Il faut ajouter une condition supplémentaire pour obtenir la seconde inconnue.

Dans les différents cas abordés dans cette étude, la matrice est initialement plane. En régime réactif, nous avons vu qu'elle restait plane. En régime diffusif, le flux devient uniforme. Le volume molaire étant uniforme, il n'y a pas de déformation de la paroi. On fait alors l'hypothèse que, dans le régime mixte, en régime établi, la matrice est plane.

Pour la matrice, on a donc $h_m(r) = \bar{h}_m$. La continuité en $r = R_f$ donne $h_f(R_f) = \bar{h}_m$. On en déduit ainsi :

$$\bar{r}_f = R_f - \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \quad (4.60)$$

ainsi que la hauteur en \bar{r}_f :

$$\bar{h}_f = h_f(\bar{r}_f) = \bar{h}_m + \mathcal{L}_m - \mathcal{L}_f \quad (4.61)$$

Nous avons alors obtenu l'équation locale du profil stationnaire de notre cellule. Pour construire la surface, deux cas se présentent :

4.2 Ablation sous flux 1D

- Pour $R_f > \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$, la fibre présente une partie courbe pour $r > \bar{r}_f$ et un plateau sur $r < \bar{r}_f$ comme illustré sur les deux premières vignettes de la figure 4.10.
- Pour $R_f < \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$, la fibre présente une pointe en $r = 0$. On obtient alors une forme ogivale comme illustré sur les deux dernières vignettes de la figure 4.10.

Les longueurs qui interviennent dans l'expression de h_f ne sont pas, à ce stade, sous une forme satisfaisante. Tout d'abord, on introduit la fraction de fibre ϕ_f donnée par :

$$\phi_f = \frac{\pi R_f^2}{l^2} \quad (4.62)$$

où l est la période du matériau. On introduit ensuite le nombre de Damköhler Da_m défini par rapport à la matrice :

$$Da_m = \frac{(1 - \phi_f)l}{\mathcal{L}_m} \quad (4.63)$$

On définit finalement h'_f , la hauteur de la fibre par rapport à la matrice normée par la longueur l . On a alors :

$$h'_f = \frac{h_f(r) - \bar{h}_m}{l} = \sqrt{\frac{(1 - \phi_f)^2}{Da_m^2} \tilde{K}^2 - (r' - \bar{r}'_f)^2} - \frac{1 - \phi_f}{Da_m} \quad (4.64)$$

avec $r' = r/l$ et $\bar{r}'_f = \frac{\bar{r}_f}{l} = \sqrt{\phi_f/\pi} - \frac{1-\phi_f}{Da_m} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$. On peut alors étudier l'impact des différents paramètres sur la morphologie stationnaire de la surface. L'impact du nombre de Damköhler sur les morphologies obtenues pour la surface est illustré figure 4.10 pour $\phi_f = 0.75$, $\tilde{K} = 4$. On retrouve alors le comportement limite obtenu en régime réactif pour $Da \ll 1$. On observe que lorsque $Da \gg 1$, la surface reste plane comme attendu.

Réactivité effective stationnaire

Nous avons obtenu la morphologie stationnaire de la surface. Dans notre modèle le flux diffusif est 1D, il n'y a donc pas de perturbation au sens d'écart local à la moyenne. Quelles que soient les valeurs de Da_m et \tilde{K} , on a :

$$\langle J \rangle = J_z = -k_m \bar{c} \quad (4.65)$$

avec $\bar{c} = c(\bar{h}_m)$. La surface effective pourrait ainsi être une surface lisse de réactivité k_m placée en \bar{h}_m . Cependant, l'étude de la surface rugueuse non-récessive, a montré que l'on devait remplacer une surface rugueuse par une surface effective lisse remontée d'une hauteur δ par rapport à la base des rugosités. Pour tenir compte de cet effet, on place la surface effective en $z = \langle h \rangle$. On recherche alors la réactivité de la paroi effective placée en $z = \langle h \rangle$ qui consomme le flux moyen $\langle J \rangle$. On a alors :

$$\frac{k_{\text{eff}}}{k_m} = \frac{\bar{c}}{c(\langle h \rangle)} \quad (4.66)$$

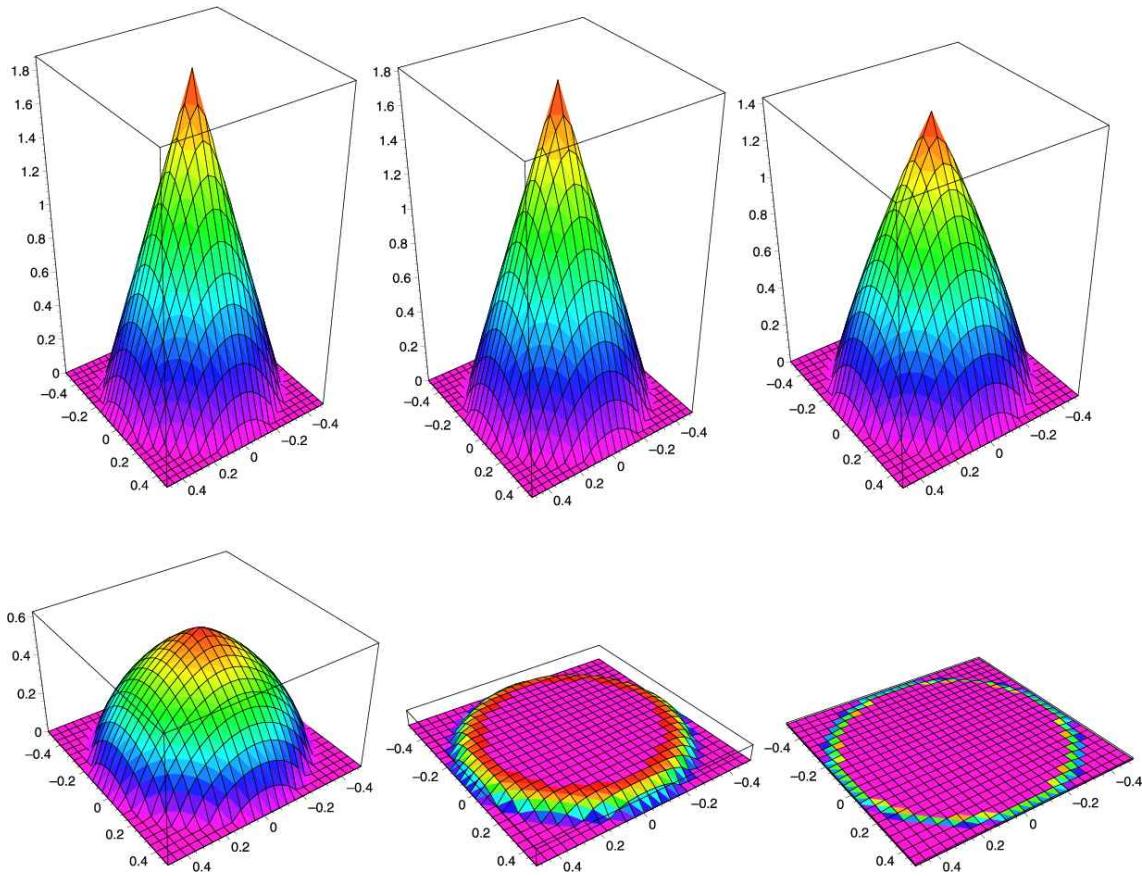


FIG. 4.10 – Profil stationnaire du composite obtenu par le modèle 1D pour $\phi_f = 0.75$, $\tilde{K} = 4$ et $Da_m = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10, 10^2$.

La concentration en z est donnée par :

$$c(z) = \bar{c} - (z - \bar{h}_m) \partial_z c \quad (4.67)$$

Or, le gradient de c est donné par :

$$\partial_z c = -\frac{J_z}{D} = \frac{k_m \bar{c}}{D} = \frac{\bar{c}}{\mathcal{L}_m} \quad (4.68)$$

On en déduit alors :

$$c(\langle h \rangle) = \bar{c} \left(1 - \frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} \right) \quad (4.69)$$

On en déduit alors l'expression de la réactivité effective en $\langle h \rangle$:

$$\frac{k_{eff}}{k_m} = \frac{1}{1 - \frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m}} \quad (4.70)$$

4.2 Ablation sous flux 1D

Il nous faut donc calculer ce dénominateur. Pour illustrer le calcul on se place dans le cas 2D. On a alors :

$$\frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} = \left\langle \frac{h - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} \right\rangle = \frac{1}{l} \left(\int_0^{R_f} \frac{h_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx + \int_{R_f}^l \frac{h_m - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx \right) \quad (4.71)$$

La matrice étant plane $h_m(x) = \bar{h}_m$, la moyenne s'écrit :

$$I = \frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} = \frac{1}{l} \int_0^{R_f} \frac{h_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx \quad (4.72)$$

Cas $\bar{r}_f > 0$: Dans le cas où la fibre présente un plateau ($\bar{r}_f > 0$), on scinde l'intégrale en deux termes :

$$I = \frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} = \frac{1}{l} \left(\int_0^{\bar{r}_f} \frac{\bar{h}_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx + \int_{\bar{r}_f}^{R_f} \frac{h_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx \right) \quad (4.73)$$

En utilisant $\bar{r}_f = R_f - \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$ et $\bar{h}_f = \bar{r}_m + \mathcal{L}_m(1 - \tilde{K})$, on a :

$$\int_0^{\bar{r}_f} \frac{\bar{h}_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx = (1 - \tilde{K})(R_f - \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}) \quad (4.74)$$

Pour la seconde intégrale, on a :

$$\int_{\bar{r}_f}^{R_f} \frac{h_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx = \int_{\bar{r}_f}^{R_f} 1 - \sqrt{\tilde{K}^2 - \left(\frac{x - \bar{r}_f}{\mathcal{L}_m}\right)^2} dx \quad (4.75)$$

En posant $u = \frac{x - \bar{r}_f}{\mathcal{L}_m}$, on a :

$$\int_{\bar{r}_f}^{R_f} \frac{h_f - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} dx = \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} + \int_0^{\sqrt{\tilde{K}^2 - 1}} \sqrt{\tilde{K}^2 - u^2} \mathcal{L}_m du \quad (4.76)$$

$$= \mathcal{L}_m \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} + \frac{\mathcal{L}_m}{2} \left(\sqrt{\tilde{K}^2 - 1} + \tilde{K}^2 \arctan \left(\sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \right) \right) \quad (4.77)$$

On introduit le taux de fibre qui est alors $\phi_f = R_f/l$ et toujours $Da_m = \frac{(1-\phi_f)l}{\mathcal{L}_m}$. En rassemblant les deux intégrales, on obtient :

$$I = (1 - \tilde{K})\phi_f - \frac{1 - \phi_f}{Da_m} \left((\tilde{K} + \frac{1}{2}) \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} + \frac{\tilde{K}^2}{2} \arctan \left(\sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \right) \right) \quad (4.78)$$

Cette expression a été trouvée dans le cas où la fibre présente un plateau, *i. e.* pour $\bar{r}_f > 0$. En utilisant les définitions de $\bar{r}_f > 0, R_f$ et \mathcal{L}_m , cette condition correspond alors à :

$$Da_m > \frac{\phi_f - 1}{\phi} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \quad (4.79)$$

On peut alors calculer la limite de la réactivité dans le régime diffusif $Da \gg 1$:

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} k_{eff} = \lim_{Da \rightarrow \infty} \frac{k_m}{1 - I} = \frac{k_m}{1 - \lim_{Da \rightarrow \infty} I} \quad (4.80)$$

En utilisant l'expression donnée par l'équation 4.78, on obtient :

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} I = (1 - \tilde{K})\phi_f \quad (4.81)$$

On a alors pour la réactivité effective :

$$\lim_{Da \rightarrow \infty} k_{eff} = \frac{k_m}{1 - (1 - \tilde{K})\phi_f} = \frac{1}{\frac{\phi_f}{k_f} + \frac{1 - \phi_f}{k_m}} = k^* \quad (4.82)$$

On obtient alors que la limite de la réactivité effective stationnaire est égale à la moyenne harmonique des réactivités. On retrouve alors le résultat obtenu dans le cas d'une surface non-récessive lisse. Ceci est en cohérence avec le fait que lorsque $Da \gg 1$, le flux au-dessus d'une surface lisse devient 1D. Nous avons obtenu l'expression analytique de la réactivité effective dans le cas $Da_m > \frac{\phi_f - 1}{\phi} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$. Il faut maintenant effectuer le calcul dans le cas $Da_m < \frac{\phi_f - 1}{\phi} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$ et vérifier la continuité des solutions.

Cas $\bar{r}_f > 0$: Dans ce cas, il n'y a plus de plateau sur la fibre et on a simplement :

$$I = \frac{\langle h \rangle - \bar{h}_m}{\mathcal{L}_m} = \frac{1}{l} \int_0^{R_f} 1 - \sqrt{\tilde{K}^2 - \left(\frac{x - \bar{r}_f}{\mathcal{L}_m} \right)^2} dx \quad (4.83)$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} I &= \phi_f - \frac{1 - \phi_f}{2 Da_m} \left(\sqrt{\tilde{K}^2 - 1} + \tilde{K}^2 \arctan \left(\sqrt{\tilde{K}^2 - 1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \beta \sqrt{\tilde{K}^2 - \beta^2} - \tilde{K}^2 \arctan \left(\frac{\beta}{\sqrt{\tilde{K}^2 - \beta^2}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.84)$$

avec $\beta = \sqrt{\tilde{K}^2 - 1} - \frac{\phi_f - 1}{\phi_f} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$.

On a alors obtenu deux expressions pour la réactivité effective. On vérifie la continuité de la solution en prenant $Da_m = \frac{\phi_f - 1}{\phi} \sqrt{\tilde{K}^2 - 1}$ dans chacune des expressions. Sur la figure 4.11, on représente la variation de la réactivité effective en fonction du nombre de Damköhler défini par rapport à la matrice pour un taux de fibre de $\phi_f = 0.5$ pour différents contrastes. Ce graphe rappelle visuellement celui obtenu dans le cas lisse non-récessif et présenté figure 3.11. Cependant, il faut bien remarquer que l'adimensionnement n'est pas le même dans les deux cas. Dans le cas lisse non-récessif, la réactivité effective k_{eff} était rapportée à la moyenne arithmétique alors qu'ici la mise à l'échelle se fait par rapport à k_m qui représente le maximum de réactivité.

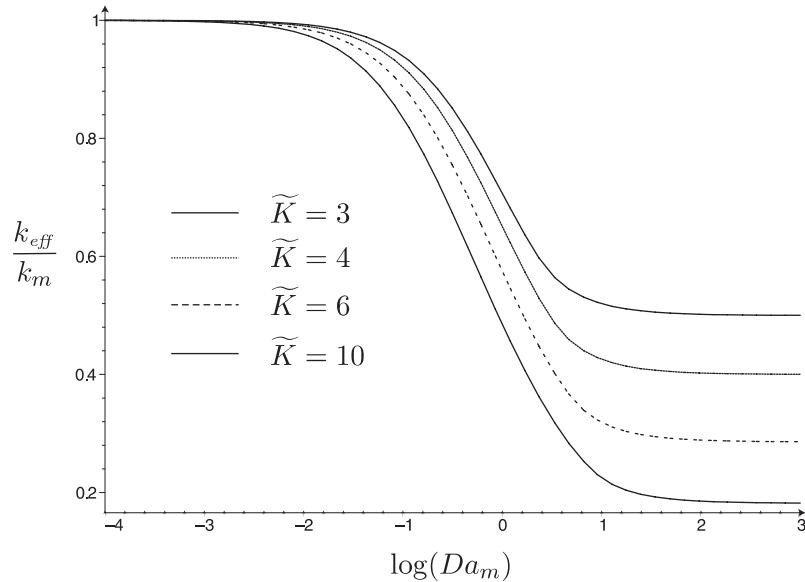


FIG. 4.11 – Réactivité effective analytique dans le cas 1D en fonction du nombre de Damköhler défini par rapport à la matrice pour un taux de fibre $\phi_f = 0.5$.

4.3 Conclusion

Dans une première partie, un modèle pour la récession en régime réactif ($Da \ll 1$) a été construit. Il permet de décrire simplement l'évolution d'un système hétérogène. Les rugosités stationnaires alors obtenues sont angulaires et se rapprochent des pointes observées sur les micrographies des pièces de col. Cette étude a permis d'obtenir la réactivité effective du système dans ce régime réactif. En régime stationnaire : $k_{eff} = \max(k(\underline{x}))$. Ceci montre que le comportement effectif est alors un processus de maillon faible. Dans ce régime, la durée du transitoire est, elle, dictée par les caractéristiques chimiques et géométriques de la phase la moins réactive. On démontre alors le rôle protecteur de la phase la moins réactive durant cette période. Dans une seconde partie, pour étudier l'impact de la compétition diffusion-réaction, nous avons développé un modèle récessif sous flux 1D pour des parois uniformes et non uniformes. L'étude du cas uniforme nous a appris l'existence d'une rugosité stationnaire due à la compétition réaction-diffusion. Les gradients de réactivité ne sont donc pas les seules sources de rugosité. Notre approche permet de retrouver l'échelle des rugosités observées sur les zones homogènes. Dans le cas hétérogène, nous avons construit la morphologie stationnaire de la surface. Cette étude nous a permis d'obtenir analytiquement la réactivité de la paroi lorsque le système évolue à perturbation nulle. Ce calcul a permis de retrouver la loi $k_{eff} = \max(k(\underline{x}))$ dans le cas $Da \ll 1$ ainsi que de démontrer la loi $k_{eff} = k^*$ dans le cas $Da \gg 1$ déjà obtenue dans le cas non-récessif.

Dans le modèle 1D présenté dans ce chapitre nous avons supposé *a priori* que la perturbation du champ de concentration était négligeable. Dans cette partie, nous avons atteint la complexité maximale d'un modèle analytique pour la récession d'une

paroi hétérogène. Pour évaluer la pertinence de l'hypothèse $1D$, il est donc nécessaire de procéder à une simulation numérique de la surface récessive. Dans le chapitre suivant, nous développons un modèle numérique pour la simulation de l'ablation de surfaces récessives. Le code ainsi constitué permet de mesurer l'écart entre le cas du flux $1D$ et le cas général de la diffusion.

Chapitre 5

Étude numérique de surfaces récessives

Dans le modèle 1D présenté dans le chapitre précédent, nous avons supposé que la perturbation du champ de concentration était négligeable. Pour évaluer la pertinence cette hypothèse, il est nécessaire de procéder à une simulation numérique de l'ablation de surface récessive tel que nous l'avons défini à la fin du chapitre 2. Les couplages sont alors ceux donnés par la figure 5.1.

Pour réaliser cette simulation, nous développons un modèle numérique pour la simulation de l'ablation de surfaces récessives Aspa et al. (2006a). Le code ainsi constitué permet de mesurer l'écart entre le cas du flux 1D et le cas général de la diffusion. Il nous permet, de plus, d'estimer les effets que peuvent avoir les changements de géométrie du composite sur son comportement effectif.

5.1 Code de simulation numérique

Comme nous l'avons vu au chapitre 2, dans notre application la vitesse de récession est très lente devant celle de diffusion : $\varpi Da = \frac{\gamma k l}{D} \ll 1$. Avec cette observation,

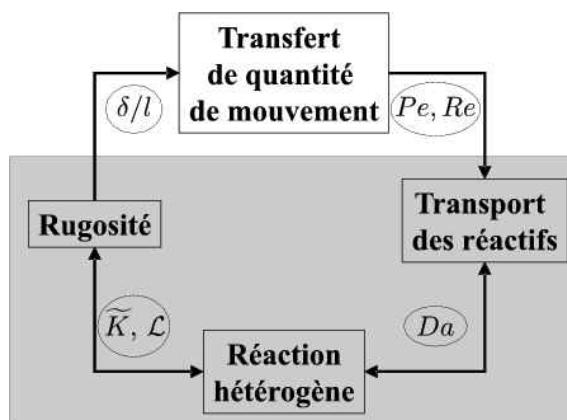


FIG. 5.1 – Couplages implantés dans le modèle numérique.

le système étudié est décrit dans le repère global par le problème suivant :

$$\partial_t c = \nabla \cdot D \underline{\nabla} \underline{c} \text{ sur } \Omega \quad (5.1)$$

$$D \underline{\nabla} \underline{c} \cdot \underline{n} = k c \text{ sur } \Sigma \quad (5.2)$$

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c) \underline{n} \text{ sur } \Sigma \quad (5.3)$$

On rappelle que le système étudié est isotherme et isobare. Ce problème fait intervenir une évolution couplée du solide et du fluide. De plus, nous souhaitons effectuer des simulations 3D pour prendre en compte l'architecture complexe des composites. Les conditions limites associées au domaine de calcul sont :

- Une concentration imposée $c = C_0$ en haut du domaine.
- Une condition de périodicité sur les parois latérales.
- Une concentration nulle $c = 0$ en bas du domaine (occupé par le solide).

5.1.1 Méthode numérique

Nous sommes ici dans le cadre d'un problème à interface mobile. Les conditions de thermochimie données par l'avancement de la réaction sont donc appliquées en différents points au cours du temps. Les approches qui permettent de traiter ce type de problème sont nombreuses. On peut tout d'abord séparer ces approches en deux familles suivant qu'elles proposent un suivi lagrangien ou eulérien de l'interface.

Dans les méthodes de suivi lagrangien de l'interface l'évolution des points qui constituent l'interface est calculée explicitement. Le champ de concentration est calculé avec l'interface figée. La vitesse de chaque noeud de l'interface est calculée puis la géométrie est actualisée. On peut par exemple utiliser une telle méthode dans un calcul par éléments finis. Dans ce cas, les éléments à l'interface se déforment et les méthodes classiques d'éléments finis requièrent un remaillage du système ce qui est très coûteux en temps CPU. La méthode ALE (Adapted Lagrangian-Eulerian) permet une déformation limitée des éléments. Cependant cette méthode ne semble pas être adaptée telle quelle à des fronts où des singularités peuvent apparaître comme dans notre cas (Véran, 2006). On peut aussi utiliser une méthode lagrangienne-lagrangienne. Dans ce cas, les équations font elles aussi l'objet d'un traitement lagrangien. Un outil de ce type a été développé au LCTS par G. Vignoles et J. Lachaud .

Ce code assure une description de l'interface par une méthode de marching cubes simplifiée (Vignoles, 1995) et une résolution du problème de diffusion-réaction par une méthode de Monte-Carlo marche aléatoire (Lachaud et al., 2006). Cette méthode est particulièrement adaptée aux régimes raréfiés ce qui n'est pas notre cas. Nous souhaitons, à terme, coupler notre outil avec un solveur Navier-Stokes externe. Or l'introduction de la convection dans une telle méthode est relativement complexe.

Dans les méthodes eulériennes, on transforme le problème en un problème continu. Il existe alors deux grands types de méthodes de transformation. Tout d'abord celles qui amènent à un front diffus comme la méthode *phase field* et celles qui permettent de traiter des fronts raides. Nos tentatives avec la méthode *phase field* ont montré qu'il était difficile de maintenir l'épaisseur du front numérique constante durant le calcul (Véran, 2006). On s'oriente alors vers une méthode de front raide. Dans cette

dernière famille deux méthodes se distinguent. D'un côté la méthode VOF (*volume of fluid*) (Scardovelli and Zaleski, 2000; Welch and Wilson, 2000; Gueyffier et al., 1999). Elle utilise un indicateur de phase *i.e.* un scalaire indiquant en chaque point quelle est la phase présente. Cette méthode est le plus souvent utilisée pour effectuer des simulations d'écoulements avec frontière libre. Une autre méthode utilisée pour traiter ce type de problèmes est la méthode *level-set* (Adalsteinsson and Sethian, 2003; Sethian, 2001). Elle utilise une variable continue s pour décrire le champ d'occupation des différentes phases. L'interface est alors décrite par $s = 0$.

Dans Sethian (2001), la méthode VOF est définie par l'étude d'une fonction ε , égale à 1 d'un côté de l'interface et nulle de l'autre dont l'évolution est donnée par (Sethian, 2001) :

$$\partial_t \varepsilon + \underline{u} \cdot \nabla \varepsilon = 0 \quad (5.4)$$

Alors que la méthode level-set est définie (Sethian, 2001) par la recherche de la fonction implicite s telle que s soit nulle sur l'interface et dont l'évolution obéit à :

$$\partial_t s = \underline{v} \cdot \nabla s \quad (5.5)$$

Bien que les traitements mathématiques qui découlent de ces approches soient différents, ces deux méthodes sont relativement équivalentes dans les problèmes qu'elles permettent de traiter et dans leur mise en œuvre. La méthode VOF est la plus répandue dans les codes commerciaux de mécanique des fluides. Ainsi pour permettre un couplage avec un code calculant l'écoulement, notre choix se porte sur la méthode VOF. Nous utiliserons comme indicateur de phase le taux local de solide $\varepsilon_\kappa = \frac{d\Omega_\kappa}{d\Omega}$. Le système d'équations est discrétisé suivant un schéma volumes finis.

Équations dans le volume élémentaire

On considère un volume élémentaire Ω_e . Par analogie avec l'image discrétisée du système, on parlera aussi de voxel. Ce volume contient une phase fluide et une phase solide. Soit Ω_κ le volume solide contenu dans Ω_e et Ω_γ le volume fluide correspondant. La vitesse de l'interface dans le repère global est :

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c) \underline{n} \quad (5.6)$$

On en déduit le volume consommé dans Ω_e :

$$\partial_t \Omega_\kappa = \int_{\partial\Omega_{\kappa/\gamma}} -\Upsilon k c d\Sigma \quad (5.7)$$

où $\partial\Omega_{\kappa/\gamma}$ est l'interface de Ω_κ avec le fluide. En définissant ε_κ relativement à Ω_e , le bilan de solide s'écrit :

$$\partial_t \varepsilon_\kappa = -\frac{1}{\Omega_e} \int_{\partial\Omega_{\gamma/\kappa}} \Upsilon k c dS \quad (5.8)$$

où $\partial\Omega_{\gamma/\kappa}$ correspond aux frontières fluide/solide de Ω_e . Pour le champ de concentration, l'équation 5.1 amène à :

$$\int_{\Omega_\gamma} (\nabla \cdot D \underline{\nabla c}) dV = \int_{\Omega_\gamma} \partial_t c dV \quad (5.9)$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on obtient :

$$\int_{\partial\Omega_{\gamma/\gamma}} D \underline{\nabla c} \cdot \underline{n}_\gamma dS + \int_{\partial\Omega_{\gamma/\kappa}} D \underline{\nabla c} \cdot \underline{n}_{\gamma\kappa} dS = \int_{\Omega_\gamma} \partial_t c dV \quad (5.10)$$

où $\partial\Omega_{\gamma/\gamma}$ correspond aux frontières fluide/fluide de Ω_e . En utilisant l'équation 5.2, on a alors :

$$\int_{\partial\Omega_{\gamma/\gamma}} D \underline{\nabla c} \cdot \underline{n}_\gamma dS + \int_{\partial\Omega_{\gamma/\kappa}} k c dS = \int_{\Omega_\gamma} \partial_t c dV \quad (5.11)$$

Le système est isotherme et isobare. La concentration totale c_t est alors uniforme. En introduisant $x_{ox} = \frac{c}{c_t}$ la fraction molaire d'oxydant, le problème que nous souhaitons résoudre est alors :

$$\underbrace{D \int_{\partial\Omega_{\gamma/\gamma}} \underline{\nabla x_{ox}} \cdot \underline{n}_\gamma dS}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\int_{\partial\Omega_{\gamma/\kappa}} k x_{ox} dS}_{\text{Réaction}} = \int_{\Omega_\gamma} \partial_t x_{ox} dV \quad (5.12)$$

$$\partial_t \varepsilon_s = \frac{-1}{\Omega_e} \int_{\partial\Omega_{\kappa/\gamma}} \Upsilon C_0 k x_{ox} dS \quad (5.13)$$

Maillage du système et description de l'interface

Nous avons choisi la méthode VOF pour obtenir un maillage stationnaire. Le maillage est ainsi indépendant de la position de l'interface. Nous choisissons un maillage cartésien régulier pour sa simplicité.

On discrétise l'espace du système par un maillage régulier de cubes de dimensions δx^3 . Les indices i, j, k renvoient respectivement aux coordonnées x, y et z . Le centre des cellules est occupé par les points d'indices entiers. Nous désignons les différentes faces comme suit, par exemple, pour la cellule centrée en i, j, k :

- Face Ouest Σ_O de centre $i - \frac{1}{2}, j, k$;
- Face Est Σ_E de centre $i + \frac{1}{2}, j, k$;
- Face Sud Σ_S de centre $i, j - \frac{1}{2}, k$;
- Face Nord Σ_N de centre $i, j + \frac{1}{2}, k$;
- Face Bas Σ_B de centre $i, j, k - \frac{1}{2}$;
- Face Haut Σ_H de centre $i, j, k + \frac{1}{2}$;

L'interface réelle est donc projetée sur un maillage de cubes élémentaires. L'interface contenue dans une cellule élémentaire peut être de géométrie quelconque. Nous choisissons de décrire l'interface à l'échelle de la cellule élémentaire par un plan. Ce plan est positionné de telle sorte que le volume de solide soit conservé et que la

5.1 Code de simulation numérique

normale \underline{n} soit égale à la normale moyenne sur le voxel.¹ On note qu'avec ce choix de description, l'interface n'est pas obligatoirement continue d'un voxel à l'autre. Une illustration de la discréétisation spatiale est donnée en figure 5.2.

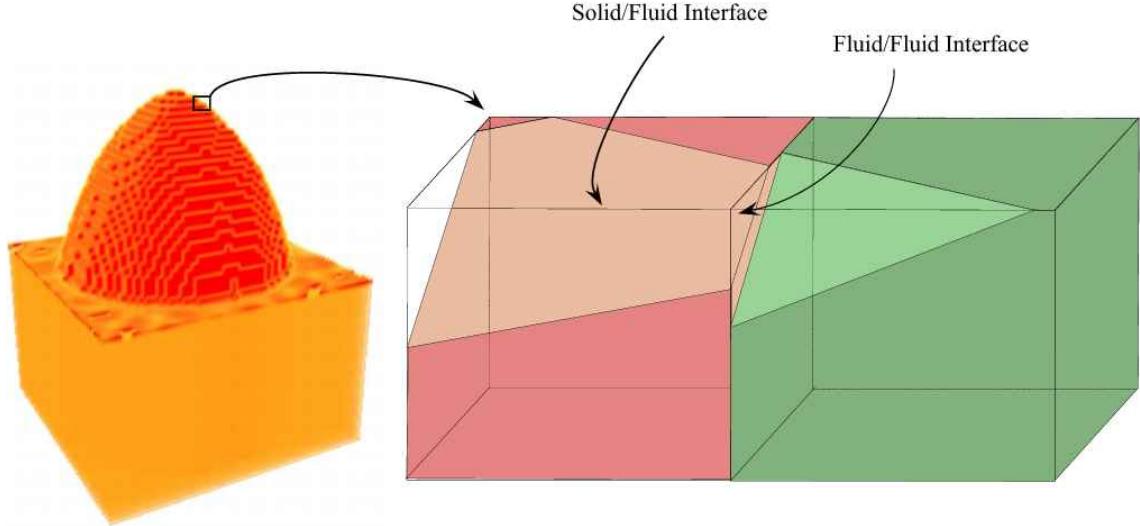


FIG. 5.2 – Représentation de l'interface à l'échelle des voxels.

On pose $\Sigma_{\beta,\iota}$, la surface occupée par la phase β sur la face ι . On note Σ_c la surface d'interface fluide/solide strictement contenue dans le voxel. On définit alors par :

$$S_{\gamma/\gamma,O}(i, j, k) = \frac{1}{\delta x^2} |\Sigma_{\gamma,O}(i, j, k) - \Sigma_{\gamma,E}(i - 1, j, k)| \quad (5.14)$$

la fraction surfacique d'interface fluide/fluide sur la face Σ_O du voxel centré en (i, j, k) . Pour les surfaces d'interface fluide/solide, on définit :

$$S_{\gamma/\kappa,O}(i, j, k) = \frac{1}{\delta x^2} \max(0, \Sigma_{\kappa,E}(i - 1, j, k) - \Sigma_{\kappa,O}(i, j, k)) \quad (5.15)$$

la fraction surfacique d'interface de $\Omega_\gamma(i, j, k)$ avec $\Omega_\kappa(i - 1, j, k)$ sur la face $\Sigma_O(i, j, k)$ et :

$$S_{\kappa/\gamma,O}(i, j, k) = \frac{1}{\delta x^2} \max(0, \Sigma_{\kappa,O}(i, j, k) - \Sigma_{\kappa,E}(i - 1, j, k)) \quad (5.16)$$

la fraction surfacique d'interface de $\Omega_\gamma(i, j, k)$ avec $\Omega_\kappa(i - 1, j, k)$ sur la face $\Sigma_O(i, j, k)$. Ces définitions sont étendues à l'ensemble des faces Σ_ι . On pose $S_c = \frac{1}{\delta x^2} \Sigma_c$.

¹On peut noter que des méthodes numériques permettent de prendre en compte des interfaces approchées par des splines d'ordre deux à l'échelle du voxel Greaves (2004). Une telle précision est recherchée pour les modèles où intervient la courbure locale de l'interface ce qui n'est pas notre cas. De plus, l'ablation peut conduire à des surfaces non-différentiables. L'utilisation d'interpolations de ce type serait alors un handicap.

Discrétisation des équations

On assigne aux champs x_{ox} et ε_s des valeurs constantes par bloc. Les valeurs sont assignées aux centres des voxels indépendamment de ε_s . Le champ D est uniforme dans le fluide. On note sans exposant les variables à l'instant t et par l'exposant * les variables en $t + \delta t$. Le traitement des conditions limites de périodicité et en haut du domaine ne pose pas de problème particulier. Avec les hypothèses faites ici, l'équation 5.12 donne pour le voxel centré en (i, j, k) :

$$\underbrace{D \sum_{\Sigma_\ell} (\underline{\nabla} x_{ox}^* \cdot \underline{n}_\gamma) \Big|_{\Sigma_\ell}}_{\text{Diffusion}} S_{\gamma/\gamma,\ell} + \underbrace{k x_{ox}^* \left(\sum_{\Sigma_\ell} S_{\gamma/\kappa,\ell} + S_c \right)}_{\text{Réaction}} = (1 - \varepsilon_\kappa) \frac{x_{ox}^* - x_{ox}}{\delta t} \quad (5.17)$$

La contribution diffusive sur la face Ouest donne :

$$D \frac{2}{\delta x_{ox}} (x_{ox}(i - 1/2, j, k) - x_{ox}(i, j, k)) S_{\gamma,O} \quad (5.18)$$

avec :

$$x_{ox}(i - 1/2, j, k) = \frac{x_{ox}(i - 1, j, k) + x_{ox}(i, j, k)}{2} \quad (5.19)$$

La symétrie de la définition de $S_{\gamma/\gamma,\ell}$, assure la continuité des flux :

$$\left(\underline{\nabla} x_{ox} \cdot \underline{n}_\gamma \right) \Big|_{i-1/2-\epsilon,j,k} S_{\gamma/\gamma,E}(i - 1, j, k) \quad (5.20)$$

$$= \left(\underline{\nabla} x_{ox} \cdot \underline{n}_\gamma \right) \Big|_{i-1/2+\epsilon,j,k} S_{\gamma/\gamma,O}(i, j, k) \quad (5.21)$$

L'intégration temporelle sur un intervalle $t, t + \delta t$ de l'équation 5.13 donne l'expression explicite de la fraction de solide :

$$\varepsilon_\kappa^* = \varepsilon_\kappa - \frac{\delta t}{\delta x} C_0 \Upsilon_c k_c \left(\sum_{\Sigma_\ell} k_\ell x_{ox,\ell} S_{\kappa/\gamma,\ell} + x_{ox}(i, j, k) S_c \right) \quad (5.22)$$

On a, par exemple, sur la face Ouest :

$$\sum_{\Sigma_O} k_O x_{ox,O} S_{\kappa/\gamma,O} = k(i - 1, j, k) x_{ox}(i - 1, j, k) S_{\kappa/\gamma,O}(i, j, k) \quad (5.23)$$

Calcul des surfaces élémentaires

Dans les équations 5.17 et 5.22, nous avons séparé l'intégrale de surface en deux termes puisque les échanges sur les surfaces dépendent du type d'interface rencontrée : fluide/fluide ou solide/fluide. D'après la définition de ε_s , on connaît dans chaque volume élémentaire les volumes occupés respectivement par le fluide et par le solide. Nous devons donc calculer les surfaces d'interface à partir des volumes

5.1 Code de simulation numérique

occupés par chaque phase. Le plan d'interface peut être représenté de manière unique par un vecteur normal \underline{m} et par un coefficient réel α tel que l'ensemble des points de l'interface vérifient :

$$\underline{m} \cdot \underline{x} = \alpha \quad (5.24)$$

où \underline{x} est le vecteur position défini dans Ω_e .

Nous devons donc maintenant évaluer les termes \underline{m} et α dans chaque cellule à partir du champ scalaire ε_s . On se place donc dans une cellule élémentaire adimensionnée.

L'interface est le plan qui vérifie $\underline{m} \cdot \underline{x} = \alpha$. La normale à la surface est donnée par $\underline{m} = -\nabla \varepsilon_\kappa$ Greaves (2004). Nous choisissons d'estimer le gradient de ε_κ par :

$$\begin{cases} m_x = \nabla \varepsilon_\kappa \cdot \underline{e}_x = \frac{1}{2\delta x} (\varepsilon_{\kappa,w} - \varepsilon_{\kappa,e}) \\ m_y = \nabla \varepsilon_\kappa \cdot \underline{e}_y = \frac{1}{2\delta y} (\varepsilon_{\kappa,n} - \varepsilon_{\kappa,s}) \\ m_z = \nabla \varepsilon_\kappa \cdot \underline{e}_z = \frac{1}{2\delta z} (\varepsilon_{\kappa,h} + \varepsilon_{\kappa,b}) \end{cases}$$

On prend m_1 , m_2 et m_3 , les valeurs absolues des composantes de \underline{m} ordonnées dans le sens croissant et normées par $\sum_i m_i = 1$. Ceci permet un calcul de α simplifié (Scardovelli and Zaleski, 2000). De plus, l'évolution des surfaces occupées sur chaque face est continue vis-à-vis des composantes de la normale. Malheureusement, les cas où une ou deux composantes sont nulles pose des problèmes numériques. On prend alors $m_i = \max(m_i, \epsilon)$ avec ϵ suffisamment petit. Ce changement évite les difficultés numériques liées à $m_i = 0$ sans changer notablement les valeurs obtenues. Ceci permet de construire des formules générales qui autorisent les calculs avec des interfaces verticales ou horizontales.

ε_κ et α sont liés par Scardovelli and Zaleski (2000) :

$$\varepsilon_\kappa = \frac{1}{6m_1m_2m_3} \left(\alpha^3 - \sum_i F_3(\alpha - m_i) - \sum_i F_3(\alpha - 1 + m_i) \right)$$

avec $F_3(x) = x^3 Heaviside(x)$.

Le calcul de α à partir de ε_κ peut alors se faire par résolution numérique de l'équation précédente telle quelle ou en recherchant les volumes limites qui font changer F_3 de régime et dans chaque cas la relation simplifiée $\varepsilon_\kappa(\alpha)$. Nous optons pour cette dernière stratégie car elle est plus rentable numériquement. On retrouve le détail du calcul de α dans Scardovelli and Zaleski (2000)².

Nous devons maintenant calculer la surface d'interface solide/fluide Σ_c qui est strictement inclue dans la cellule d'étude. On note alors x, y, z les coordonnées définies

²L'article présente cependant une erreur. Dans le cas où α est racine d'un polynôme (p.234), la valeur recherchée n'est pas celle fournie mais :

$$\alpha = \frac{2}{3} \sqrt{-3p_0} \cos(\varphi + \frac{\pi}{3}) - \frac{a_2}{3a_3} \quad \text{avec} \quad \varphi = \frac{1}{3} \arccos\left(\frac{27}{2} \cdot \frac{q_0}{(-3p_0)^{\frac{3}{2}}}\right)$$

dans le cube adimensionné qui se rapportent aux composantes m_1, m_2, m_3 du vecteur normal. Mathématiquement l'aire de Ssi est définie par :

$$S_c = \int_{\Sigma_c} d\Sigma \quad (5.25)$$

où $\Sigma_c = \{(x, y, z) \in \Omega | m_1x + m_2y + m_3z = \alpha\}$ et $d\Sigma$ est l'élément de surface dans le plan Σ_c .

Nous sommes donc dans le cas d'une intégrale implicite. Les bornes de l'intégrale ne sont en effet pas données explicitement mais par un ensemble d'inéquations-équations. Pour calculer notre surface, il nous faut exprimer l'élément de surface de l'interface dans la base (x, y) et expliciter le domaine d'intégration. Pour cela utilisons le paramétrage suivant pour la surface :

$$f: \mathcal{D} \rightarrow R^3 \quad (5.26)$$

$$(x, y) \rightarrow (u = x, v = y, w = \frac{1}{m_3}(\alpha - m_1u - m_2v)) \quad (5.27)$$

On a donc, suivant les formules classiques de changement de variables :

$$S_c = \int_{\Sigma_c} d\Sigma = \int_{\mathcal{D}} ||D_u(f)(x, y) \wedge D_v(f)(x, y)|| dx dy \quad (5.28)$$

Il faut maintenant expliciter le domaine \mathcal{D} . Celui-ci correspond aux points $(x, y) \subset [0, 1]^2$ tels que $(u, v, w) \subset [0, 1]^3$.

On doit donc obtenir une intégrale de la forme :

$$S_c = \int_0^1 \int_{x_{inf}}^{x_{sup}} J_a dx dy \quad (5.29)$$

avec $J_a = ||D_u(f)(x, y) \wedge D_v(f)(x, y)|| = \sqrt{1 + m_1^2/m_3^2 + m_2^2/m_3^2}$.

Suivant l'ordre d'intégration que nous avons choisi dans l'équation 5.28, nous avons, en utilisant les propriétés des m_i :

$$\begin{cases} w < 1 \Rightarrow x > x_{min} = \frac{\alpha - m_2 y - m_3}{m_1} \\ w > 0 \Rightarrow x < x_{max} = \frac{\alpha - m_2 y}{m_1} \end{cases}$$

Il faut de plus que $0 < x < 1$, on a donc quatre inéquations sur y à partir de x_{min}

et x_{max} . Nous obtenons quatre bornes caractéristiques³ :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = \frac{\alpha - m_3 - m_1}{m_2} \\ y_2 = \frac{\alpha - m_3}{m_2} \\ y_3 = \frac{\alpha - m_1}{m_2} \\ y_4 = \frac{\alpha}{m_2} \end{array} \right.$$

Les variations des bornes sur x en fonction de y sont données dans le tableau 5.1.

y	$0 - y_1$	$y_1 - y_2$	$y_2 - y_3$	$y_3 - y_4$	$y_4 - 1$
$x_{sup} =$	1	x_{min}	0	0	0
$x_{inf} =$	1	1	1	x_{max}	0

TAB. 5.1 – Variations des bornes d'intégration en x en fonction de y

Ce qui nous donne finalement :

$$S_c = Ja \left(\begin{array}{l} \int_{y_1}^{y_2} \int_{x_{min}}^1 dx dy \\ + \int_{y_2}^{y_3} \int_0^1 dx dy \\ + \int_{y_3}^{y_4} \int_0^{x_{max}} dx dy \end{array} \right) \quad (5.30)$$

On calcule facilement ces intégrales pour obtenir :

$$S_c = \frac{Ja}{m_1} \left(\begin{array}{l} \frac{m_2}{2} (y_2^2 - y_1^2) + (1 - \alpha + m_3) (y_2 - y_1) \\ + y_3 - y_2 \\ - \frac{m_2}{2} (y_4^2 - y_3^2) + \alpha (y_4 - y_3) \end{array} \right) \quad (5.31)$$

Après avoir calculé l'interface contenue strictement dans notre cellule élémentaire, nous allons calculer les surfaces d'interface sur les faces de notre cellule. Le principe est le même que dans le cas précédent. Le calcul est cependant plus simple puisqu'il ne nécessite plus de changement de variable. Sur chaque face, le calcul de la surface solide est effectué, la surface fluide est ensuite déduite par différence.

³Il faut aussi avoir $y_i \in [0, 1]$ pour $i \in [1, 4]$.
On a par exemple, en toute rigueur, $y_1 = \max(0, \min(1, \frac{\alpha - m_3 - m_1}{m_2}))$

Pour illustrer comment se déroule le calcul, on détaille le calcul sur une face. On se place sur la face Σ_1 définie par $z = 0$. On y calcule l'aire solide notée $S_{\kappa,1}$. Elle est définie par :

$$S_{\kappa,1} = \int_{\Sigma_1} d\Sigma = \int_{\Sigma_1} dx dy \quad (5.32)$$

avec $\Sigma_1 = \{(x, y) \in \partial\Omega_1 \mid m_1 x + m_2 y < \alpha\}$.

Il nous faut à nouveau expliciter le domaine d'intégration. En utilisant les propriétés des m_i , on trouve :

$$S_{\kappa,1} = \int_0^1 \int_0^{x_{max}} dx dy = \int_0^{y_{min}} \int_0^1 dx dy + \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_0^{\frac{\alpha - m_2 y}{m_1}} dx dy \quad (5.33)$$

Soit :

$$S_{\kappa,1} = y_{min} + \frac{\alpha}{m_1} (y_{max} - y_{min}) - \frac{m_2}{2m_1} (y_{max}^2 - y_{min}^2) \quad (5.34)$$

avec :

$$\begin{cases} y_{min} = \frac{\alpha - m_1}{m_1} \\ y_{max} = \frac{\alpha}{m_2} \end{cases}$$

Le calcul est le même pour la face définie par $z = 1$ avec α qui devient $\alpha - m_3$. On a simplement une surface solide nulle si $\alpha - m_3 < 0$.

A ce stade, on a su calculer les surfaces solides $S_{\kappa,2}, S_{\kappa,3}, \dots, S_{\kappa,6}$. Il faut désormais retrouver les surfaces réelles auxquelles elles correspondent.

Lors du passage des composantes (m_x, m_y, m_z) à (m_1, m_2, m_3) , deux opérations ont été faites qui modifient la répartition des faces. La première est la prise de valeur absolue, elle correspond à une symétrie par rapport au plan médian correspondant. Par exemple, le passage de m_y à $-m_y$ est une symétrie par rapport au plan $y = 1/2$. Cette opération correspond donc à la permutation de deux surfaces ($\Sigma_{\kappa,S}$ et $\Sigma_{\kappa,N}$ dans cet exemple).

La seconde opération est le réordonnancement des composantes. Cette opération correspond une rotation du cube.

Pour retrouver les surfaces *ad hoc*, on utilise une matrice 6×6 pour passer du vecteur $[S_{\kappa,2}, \dots, S_{\kappa,6}]$ à $[\Sigma_{\kappa,W}, \dots, \Sigma_{\kappa,N}]$. Par exemple avec :

$$\underline{m} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{10} \\ \frac{4}{5} \end{bmatrix}$$

on a :

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{\kappa,O} \\ \Sigma_{\kappa,E} \\ \Sigma_{\kappa,S} \\ \Sigma_{\kappa,N} \\ \Sigma_{\kappa,B} \\ \Sigma_{\kappa,H} \end{bmatrix} = \delta x^2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} S_{\kappa,1} \\ S_{\kappa,2} \\ S_{\kappa,3} \\ S_{\kappa,4} \\ S_{\kappa,5} \\ S_{\kappa,6} \end{bmatrix}$$

Stratégie de résolution

Deux équations algébriques 5.17 et 5.22 ont été obtenues pour les deux variables ε_s et x_{ox} . Cependant ces équations sont couplées puisque x_{ox} apparaît dans l'équation 5.22 mais aussi parce que les différentes surfaces dépendent de ε_s . Cette dépendance illustré ci-dessus est complexe. Il est donc préférable de ne pas réaliser de couplage fort entre le calcul des surfaces et celui de ε . Ainsi, nous découplons x_{ox} et ε_s en calculant implicitement x_{ox} à interface figée et en actualisant ensuite explicitement le champ de ε_s . L'algorithme de calcul global est le suivant :

1. Les surfaces sont calculées en chaque voxel.
2. Le champ x_{ox} est calculé par l'inversion du système linéaire formé à partir de l'équation 5.17.
3. Le taux de solide ε_s est calculé explicitement suivant l'équation 5.22.
4. Retour à l'étape 1.

Pour éviter une équation du type $0 = 0$ dans les voxels pleins, on y résout simplement $x_{ox} = 0$.

L'ensemble du modèle détaillé ici a été implanté en FORTRAN90. Pour l'inversion du système linéaire obtenu à partir de l'équation 5.17, nous choisissons l'algorithme BiCG-STAB fourni par SPARSE KIT. Le code numérique ainsi constitué porte le nom de DiAbl3D .

Afin de conserver l'épaisseur moyenne de la couche limite, les simulations sont réalisées dans le repère mobile. Ce repère est celui qui recule à la vitesse moyenne de la paroi. Pour obtenir la vitesse de la paroi dans ce repère, il faut retrancher le comportement moyen à l'évolution locale. Nous faisons le choix d'effectuer cette opération de manière discrète. Dès qu'une quantité supérieure au volume d'une couche de voxels a été consommée, l'ensemble du matériau est décalé vers le haut d'une quantité δx .

5.1.2 Validation

Le problème global résolu par DiAbl3D ne possède pas de solution validée pour l'évolution 3D de surface hétérogènes aussi simple que soit leur géométrie. Il faut alors procéder à des validations successives des briques élémentaires de DiAbl3D .

Champ de concentration

La première validation concerne le calcul de champ de concentration pour des surfaces non-récessives. Cette validation est tout d'abord faite en 1D par rapport à une loi analytique puis en 2D par rapport à un code commercial.

Nous considérons ici une surface lisse homogène de réactivité placée à une distance h de la source oxydante. Le flux consommé par la surface est alors :

$$J = \frac{J_D}{1 + \frac{\mathcal{L}}{h}} \quad (5.35)$$

avec $J_D = \frac{D C_0}{h}$ et $\mathcal{L} = D/k$. Le calcul avec DiAbl3D est effectué sur une cellule $100 \times 1 \times 1$. En introduisant l'erreur : $E = \frac{J_{analytique} - J_{DiAbl3D}}{J_{analytique}}$, on trace le graphe figure 5.3. L'erreur E est bien décrite par la fonction

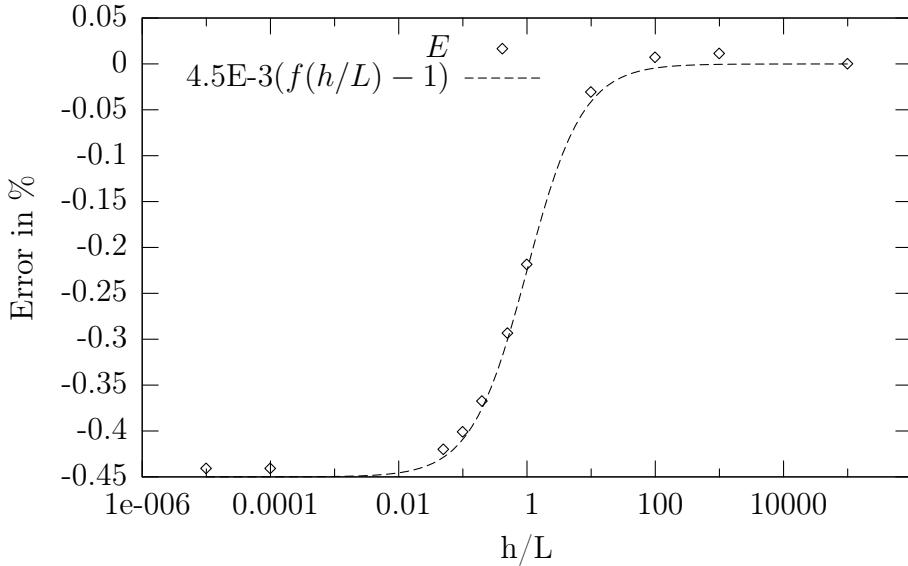


FIG. 5.3 – Erreur entre le flux calculé par DiAbl3D et le modèle analytique pour une surface homogène.

$$E = 4.5 \cdot 10^{-3}(f(h/\mathcal{L}) - 1)$$

où $f(h/\mathcal{L}) = \frac{1}{1 + \frac{\mathcal{L}}{h}}$. DiAbl3D surestime le flux sur tout le domaine, avec une erreur très proche de zéro pour $h \gg \mathcal{L}$ et au pire égale à 0.45%.

Nous réalisons ensuite une validation de DiAbl3D par comparaison avec un calcul élément fini réalisé par Comsol. Le système considéré est présenté figure 5.4. Le champ de concentration est perturbé à la fois par le caractère rugueux et hétérogène de la paroi. La figure 5.4 montre un très bon accord entre les deux approches sur les coupes verticales comme horizontales.

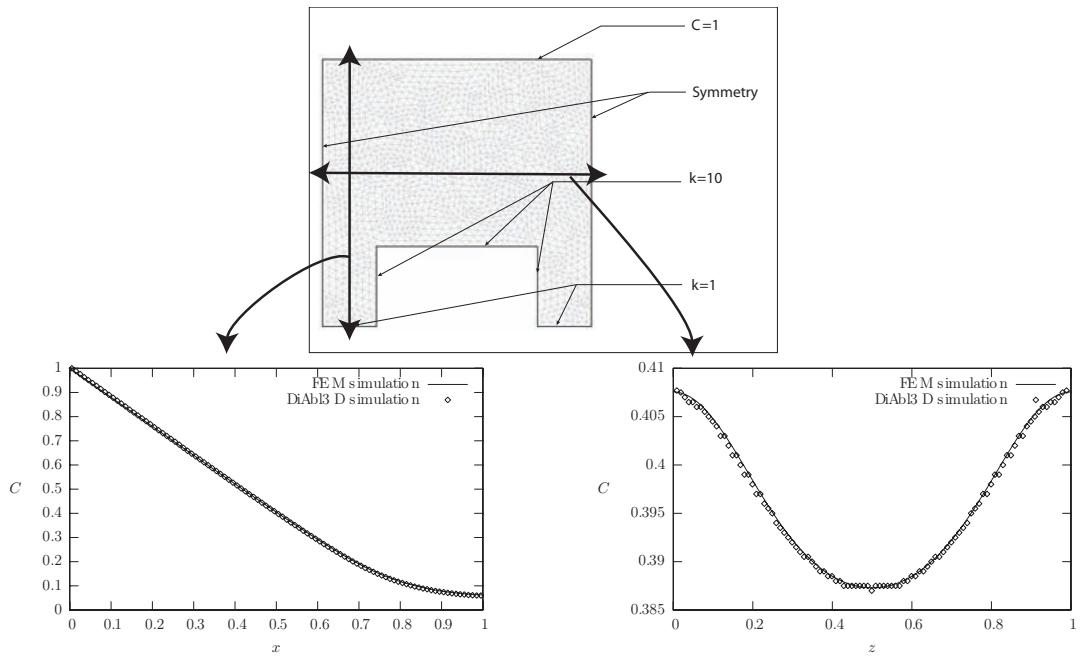


FIG. 5.4 – Comparaison entre les champs de concentrations calculés par DiAbl3D et Comsol.

Évolution morphologique

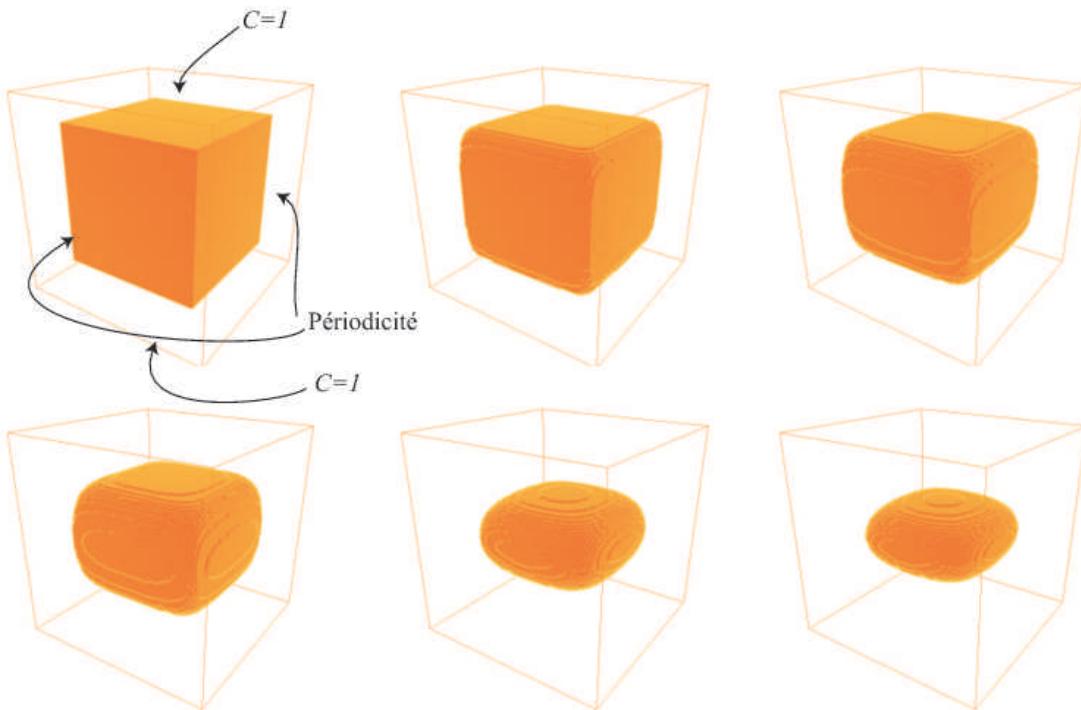
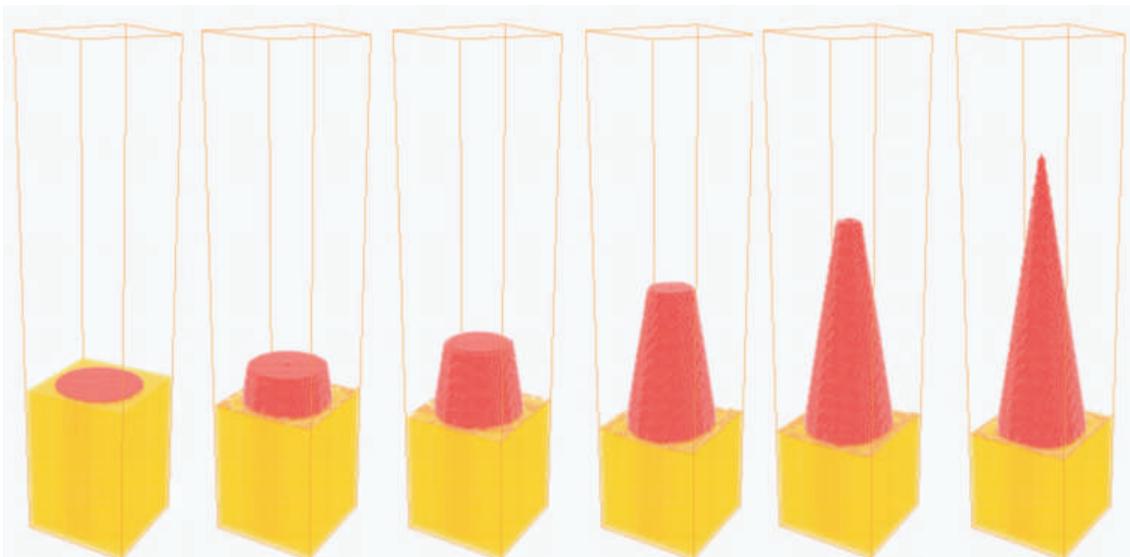
Après avoir validé le calcul du champ de concentration sur une surface non-récessive, nous validons le moteur d'évolution des surfaces. Tout d'abord, nous vérifions l'influence du maillage sur l'évolution puis comparons l'évolution simulée par DiAbl3D avec les modèles donnés au chapitre 4.1.

Nous avons choisi un maillage cartésien régulier. Nous souhaitons vérifier que le choix d'un tel maillage ne favorise pas artificiellement les directions parallèles aux axes du système. Pour cela nous réalisons la simulation de l'évolution d'un cube homogène placé en régime diffusif. Dans ce régime, l'impact de l'opérateur laplacien doit amener à des morphologies arrondies comme nous l'avons vu avec le modèle analytique. On impose $x_{ox} = 1$ en haut et en bas du système. Compte tenu des conditions de périodicité sur les bords, le système doit évoluer vers un ellipsoïde de révolution. L'évolution présentée figure 5.5 est très satisfaisante. On peut constater sur la dernière image que la couche supérieure a bien acquis le profil circulaire recherché.

Dans le chapitre 4.1, nous avons décrit l'évolution récessive d'une surface hétérogène en régime réactif. Nous réalisons donc la simulation numérique équivalente. Pour cela nous utilisons une version dégradée de DiAbl3D appelée RAbl3D dans laquelle, le champ de concentration est uniforme :

$$x_{ox}(i, j, k) = 1 \quad (5.36)$$

La simulation d'un motif formé par une fibre verticale de réactivité k_f est donné figure 5.6 pour un contraste $\tilde{K} = 6$. L'évolution obtenue est conforme au processus


 FIG. 5.5 – Simulation de l'évolution d'un cube en régime diffusif ($Da = 10^3$).

 FIG. 5.6 – Évolution morphologique en régime réactif avec $\tilde{K} = 6$.

décrit au paragraphe 4.1.1. Nous obtenons bien le cône attendu.

Il est de plus possible de calculer la surface $\frac{S_f}{S_{f,p}}$ en évaluant la surface du tronc de cône au cours du temps. On a :

$$S_f = \pi \left(r_f \sqrt{R_f^2 + h_c^2} - R_{tr} \sqrt{R_f^2 + h_{tr}^2} \right) + \pi R_{tr}^2 \quad (5.37)$$

5.2 Expérimentation numérique

$$S_{f,p} = \pi R_f^2 \quad (5.38)$$

avec $R_{tr} = R_f \frac{h_{tr}}{h_c}$ le rayon de la section supérieure du cône. En utilisant le ratio $\frac{S_m}{S_{m,p}} / \frac{S_f}{S_{f,p}}$ et en le comparant à la loi analytique 5.38, on obtient le graphe figure 5.7 pour un contraste $\tilde{K} = 3$. Ce graphe montre un bon accord entre les deux approches tant au niveau du comportement asymptotique que du temps caractéristique de l'évolution τ_K .

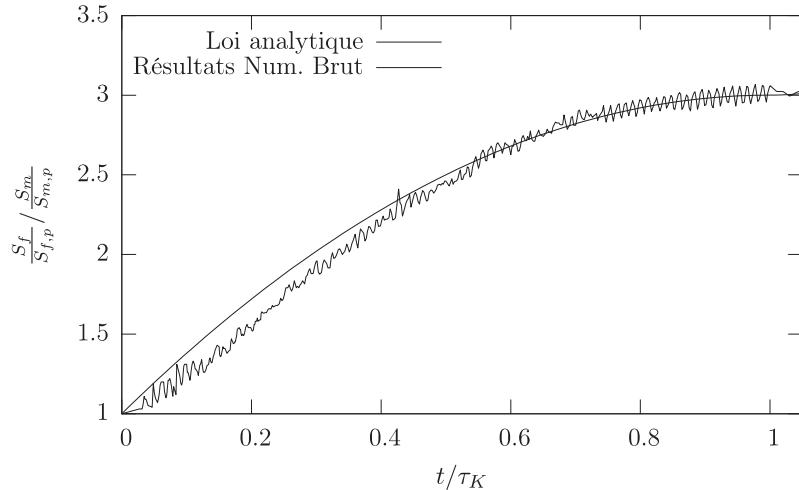


FIG. 5.7 – Comparaison entre le rapport des surfaces calculé par DiAbl3D et le modèle analytique.

5.2 Expérimentation numérique

Au chapitre précédent nous avons établi un modèle d'ablation sous flux 1D. Nous n'avons cependant pas pu justifier les conditions dans lesquelles celui-ci permettait de décrire le processus réel. Pour mesurer l'écart entre ce modèle et le cas complet nous devons procéder à des calculs numériques. Ainsi, dans cette partie, le code DiAbl3D est utilisé pour réaliser des expériences numériques d'ablation. Celles-ci permettent d'obtenir le comportement stationnaire mais aussi transitoire d'une surface hétérogène. Ces simulations permettent d'obtenir des lois de réactivité effective en fonction des propriétés de la surface et du régime d'ablation et de les comparer avec le modèle 1D. Pour mieux appréhender les phénomènes qui se déroulent durant l'ablation l'étude porte sur un système 2D, constitué par une fibre perpendiculaire à l'écoulement entourée de matrice. L'impact de la géométrie du solide sur l'ablation est ensuite abordé. La période spatiale du motif est l . Les deux phases ont le même volume molaire.

Les domaines de calculs sont dimensionnés pour que le critère $J_x(z < \frac{\langle h \rangle}{3}) < 1\% J_z$ soit satisfait. Une hauteur de couche limite $\langle h \rangle$ égale à deux fois la rugosité atteinte en régime réactif se révèle largement suffisante. On rappelle que les calculs récessifs

sont faits dans le repère local avec conservation de la hauteur moyenne du domaine fluide.

5.2.1 Comportement instationnaire

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, durant les premiers instants de l'ablation, le composite va se déformer, les parties les moins réactives émergeant peu à peu de la paroi. On a pu montrer qu'après ce régime transitoire, la récession devenait uniforme et les propriétés effectives de la paroi étaient alors stationnaires. Le cas "3D" amène lui aussi à de tels régimes. Dans cette partie, on décrit l'évolution morphologique du système ainsi que la variation de la durée du transitoire en fonction du régime d'ablation.

5.2 Expérimentation numérique

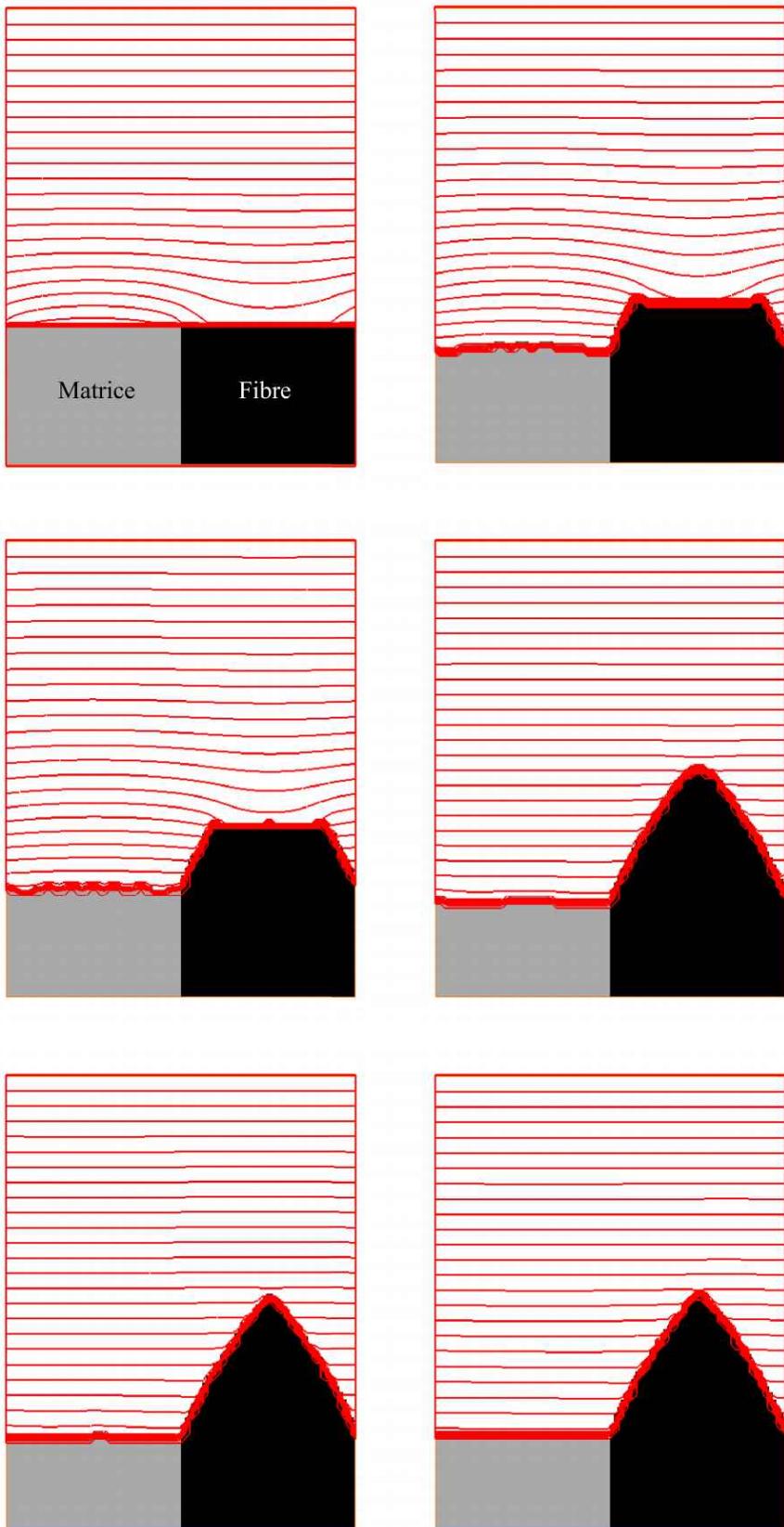


FIG. 5.8 – Évolution d'un système fibre-matrice avec $\frac{k_m}{k_f} = 4$, $Da_m = 4$ et **127** contours de concentration associés.

Évolution morphologique

La partie sur le modèle 1D a permis d'illustrer le lien qu'il y a entre la morphologie et la réactivité effective. Il est donc important de comprendre les phénomènes qui conduisent à cette modification morphologique. Pour cela on s'appuie sur la description de l'évolution du système en régime mixte $Da = O(1)$. Ce cas est, comme nous l'observerons par la suite, celui qui présente le plus de différences avec le modèle 1D que nous avons développé. Ainsi, on considère ici l'évolution d'un système 2D dans le cas $\frac{k_m}{k_f} = 4$, $Da_m = \frac{(1-\phi_f)k_m l}{D} = 2$, $\phi_f = 0.5$. L'évolution morphologique du système est présentée figure 5.8. La concentration est nulle dans le solide. Les iso-contours de concentration forment ainsi une zone dense dans les voxels partiellement pleins.

Au temps $t = 0$ de l'ablation, le champ de concentration est celui d'une surface plane non récessive identique à celle étudiée au chapitre 3.1. Le champ de concentration est déformé par le caractère non uniforme de $k(\underline{x})$. Sur la matrice, la concentration est maximale à l'interface fibre/matrice. Le recul débute donc en ce point comme illustré sur la deuxième vignette de la figure 5.8. Sur la fibre, la concentration est maximale au centre de la fibre. Ainsi, le plateau supérieur de la fibre devient concave. Ces courbures correspondent aux effets des perturbations du champ de concentration qui étaient absentes du modèle 1D. A ces courbures locales, s'ajoute la modification globale du motif qui était, elle, bien décrite par le modèle 1D. Ainsi, au cours de son évolution, la paroi latérale de la fibre devient convexe. On obtient alors une nouvelle fois une morphologie stationnaire, tous les points reculant alors verticalement à la même vitesse. Il est bon d'observer sur les vignettes 3 à 6 de la figure 5.8 que les perturbations concaves de la matrice comme de la fibre disparaissent au cours du régime transitoire. La matrice stationnaire est alors plane.

On peut alors vérifier que la perturbation du champ de concentration est en ac-

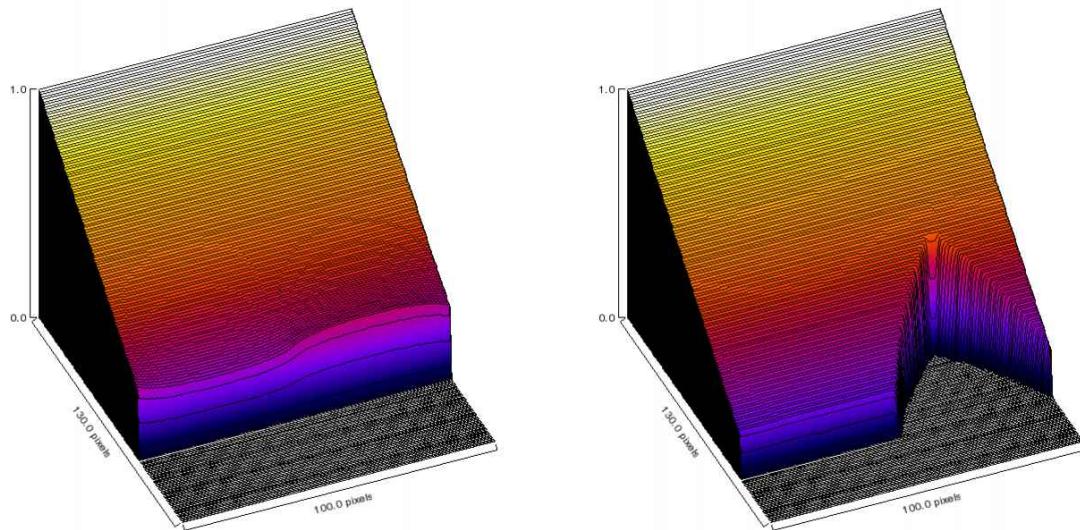


FIG. 5.9 – Champs de concentration initial et final.

5.2 Expérimentation numérique

cord avec les hypothèses d'homogénéisation. La figure 5.9 présente les champs de concentration initial et celui obtenu en régime établi. Les champs de concentration

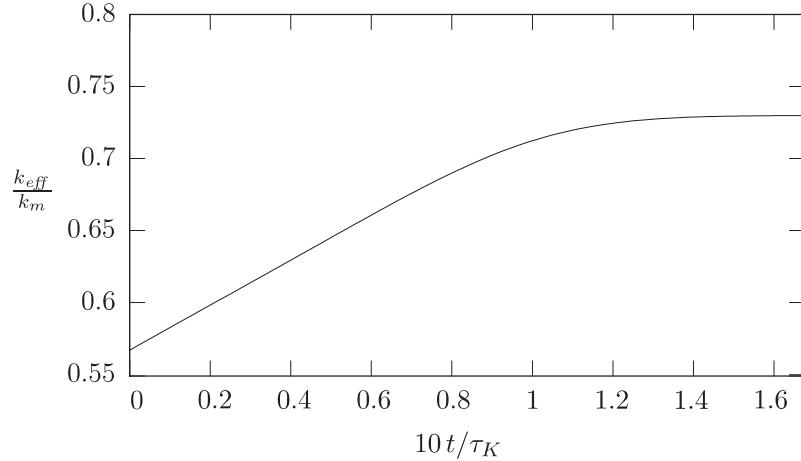


FIG. 5.10 – Évolution de la réactivité effective k_{eff} en fonction du temps normalisé par la durée τ_K du transitoire en régime réactif, dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.

présentés figure 5.9 montrent que le flux est proche du flux 1D. Ceci nous invite à comparer les profils obtenus numériquement et analytiquement par le modèle de flux 1D. Ceci est représenté figure 5.11. Le profil obtenu par simulation numérique est proche du profil analytique mais il est légèrement plus pointu. Ceci est du au fait que dans le modèle 1D, la présence de la paroi ne déformait pas les lignes de courant. Dans le cas 2D, ces lignes se déforment et viennent diminuer le gradient de concentration le long de l'interface. La morphologie est ainsi plus proche de celle obtenue en régime réactif. On peut ainsi s'attendre à obtenir une réactivité effective stationnaire k_{eff}/k_m plus grande que celle prévue par le modèle 1D.

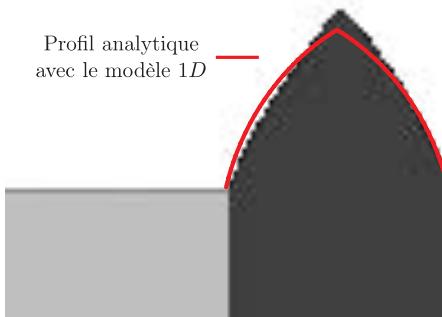


FIG. 5.11 – Comparaison entre le profil stationnaire obtenu par simulation et le profil donné par le modèle 1D pour $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.

On calcule ainsi l'évolution de la réactivité effective au cours de du temps. L'évolution de k_{eff} est donnée figure 5.10. Le temps est adimensionné par le temps τ_K de

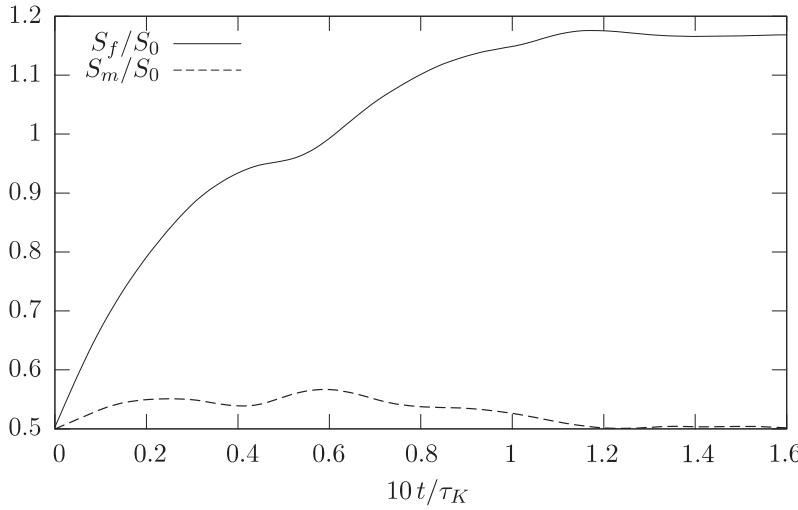


FIG. 5.12 – Évolution des surfaces de chaque phase ramenées à la surface totale initiale en fonction du temps normalisé par la durée τ_K du transitoire en régime réactif, dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$.

stationnarisation en régime réactif donné par l'équation 4.27 pour les réactivités choisies. On relève la réactivité initiale $k_{\text{eff}} = 0.57$ $k_m = 0.9$ $\langle k \rangle$. On retrouve ainsi la réactivité de la surface lisse correspondante. La surface de la fibre augmentant au cours de l'ablation, la réactivité effective augmente. En maintenant la hauteur moyenne de la surface, la réactivité récessive est donc toujours supérieure à celle de la surface lisse correspondante. On observe que le transitoire est plus court que celui prévu pour une même réactivité dans le cas réactif. On a, en effet, un transitoire de l'ordre de $0.1\tau_K$. Tout étant égal par ailleurs, l'évolution pour D tel que $Da_m = 2$ est dix fois plus rapide que pour D tel que $Da_m \ll 1$.

Le caractère transitoire de l'évolution du système est aussi observable sur l'évolution des surfaces mouillées de chacune des phases présentées sur la figure 5.12. On remarque des oscillations pour l'évolution des surfaces. Celles-ci traduisent l'apparition et la dissipation des concavités de la fibre et de la matrice. Ces oscillations semblent se compenser puisque l'évolution de k_{eff} reste régulière.

Ces résultats sont caractéristiques du régime mixte $Da = O(1)$. On fait maintenant varier Da_m pour observer l'impact du régime sur les rugosités transitaires obtenues. La figure 5.13 montre que, comme attendu, plus Da_m est grand plus la rugosité est faible. On retrouve de plus la limite pour $Da \ll 1$ démontrée dans l'étude du régime réactif au paragraphe 4.1 qui est $S_f = \tilde{K} S_m$ soit ici S_f/S_0 qui tend vers 2. Sur la figure 5.13, l'abscisse est donnée par l'itération. Or, une itération correspond approximativement à un recul de la matrice de $3 \cdot 10^{-3} l$. On observe ainsi que, pour tous les régimes, l'épaisseur consommée durant le transitoire est du même ordre. Avec les paramètres $\tilde{K} = 4$ et $\phi_f = 0.5$ on obtient une épaisseur du transitoire de l'ordre de $1.2l$.

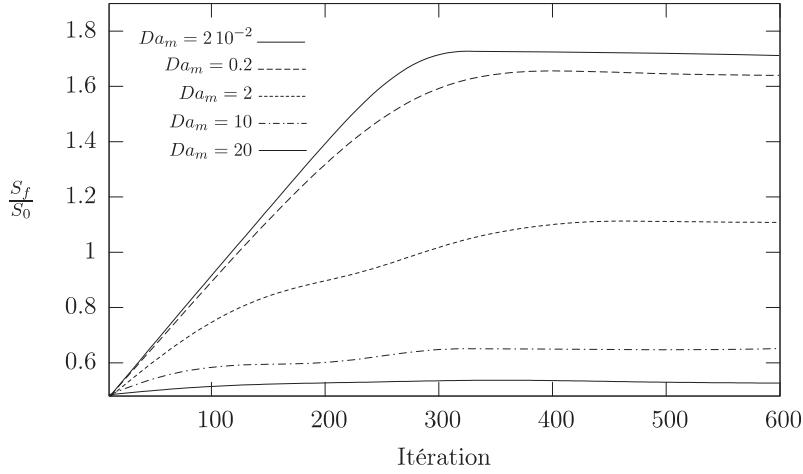


FIG. 5.13 – Évolution des surfaces de la fibre ramenées à la surface totale initiale avec $\tilde{K} = 4$ et $\phi_f = 0.5$ en fonction du nombre d’itérations pour différents nombres de Damköhler .

Temps caractéristique de stationnarisation

On compare maintenant l’effet à contraste \tilde{K} fixé, du nombre de Damköhler Da_m sur la durée du transitoire. Comme attendu, tous les systèmes étudiés atteignent un équilibre morphologique pour la géométrie choisie. On observe sur la figure 5.14 que plus Da_m est grand plus la stationnarisation est rapide. Pour $Da_m > 50$, la stationnarisation est quasi-instantanée. La surface restant lisse dans ce cas, la morphologie initiale est déjà la morphologie d’équilibre. Au chapitre 4.1, nous avons vu, que pour $Da \ll 1$, la durée du transitoire est courte devant celle du tir pour l’échelle microscopique (τ_K est de l’ordre de 10 ms). L’évolution étant encore plus rapide dans les autres régimes nous centrons l’étude sur les propriétés effectives stationnaires de la surface.

5.2.2 Réactivité effective stationnaire

L’évolution microscopique du matériau est très rapide par rapport à la durée de notre application. Notre étude se focalise donc sur le régime récessif établi. On étudie numériquement l’impact du nombre de Damköhler et des fractions volumiques sur la réactivité effective stationnaire. On mesure alors l’écart qui sépare le modèle 2D du modèle avec flux 1D.

Dans un premier temps, on étudie l’impact du régime d’ablation sur la réactivité effective. Les réactivités effectives stationnaires en fonction du nombre de Damköhler et du contraste \tilde{K} données par la simulation numérique et par le modèle 1D sont présentées figure 5.15. Ces courbes montrent que dans les deux modèles :

- pour $Da_m \ll 1$, on a $k_{\text{eff}} \approx k_m$
- pour $Da_m \gg 1$, on a $k_{\text{eff}} \approx k^*$

Cependant, on observe un écart important lorsque le régime est mixte ($Da = O(1)$). Conformément à ce que laissait entrevoir la morphologie présentée figure 5.11, la

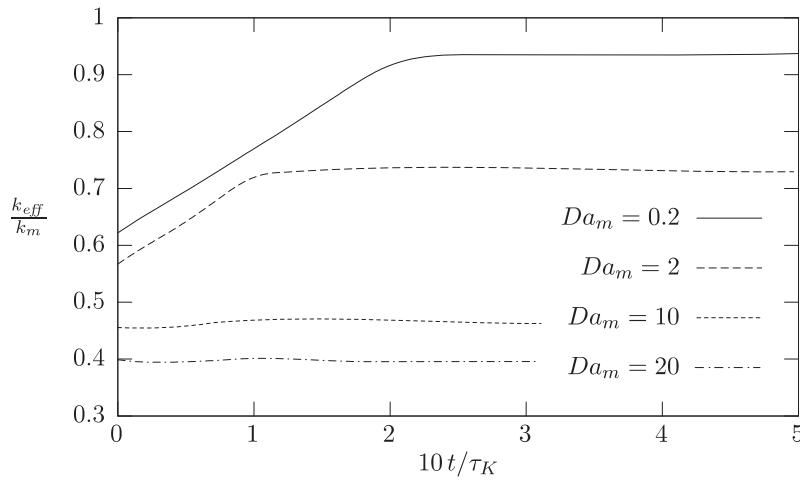


FIG. 5.14 – Évolution de la réactivité effective k_{eff} en fonction du temps normalisé par la durée τ_K ($Da_m = 2$) du transitoire en régime réactif pour différents nombre de Damköhler , dans le cas $\tilde{K} = 4, \phi_f = 0.5$.

réactivité effective obtenue numériquement est toujours supérieure à celle donnée par le cas 1D. L'écart maximal est obtenu en $Da_m = 1$ et, pour tous les contrastes \tilde{K} , on a $\frac{k_{\text{eff}}}{k_{1D}}(Da_m = 1) \approx 1.24$.

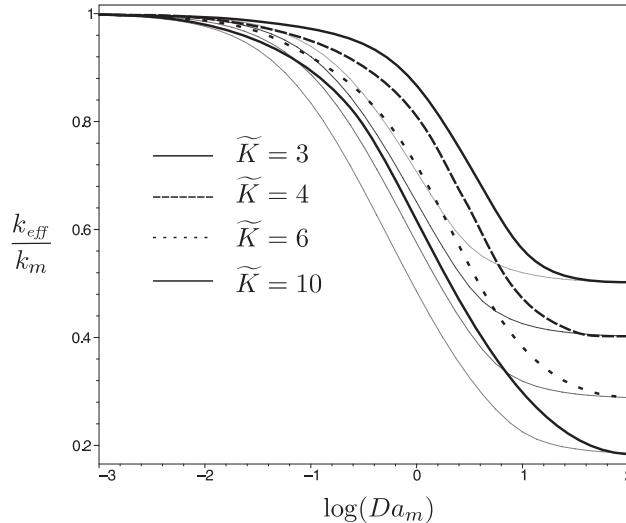


FIG. 5.15 – Réactivité effective stationnaire en fonction du nombre de Damköhler et du contraste \tilde{K} donnée par la simulation numérique et par le modèle 1D (courbes grisées).

Effet des fractions volumiques

On recherche maintenant l'impact de la fraction de fibre ϕ_f sur la réactivité effective. Les résultats relatifs aux simulations réalisées à contraste fixe $\tilde{K} = 4$ sont

5.2 Expérimentation numérique

présentés figure 5.16. On observe que même avec 10 % de matrice, pour $Da_m < 1$, on a déjà $k_{eff} > 0.9 k_m$. Ceci souligne une nouvelle fois l'impact de la phase réactive sur le comportement effectif. Les écarts observés avec le modèle 1D croissent avec le

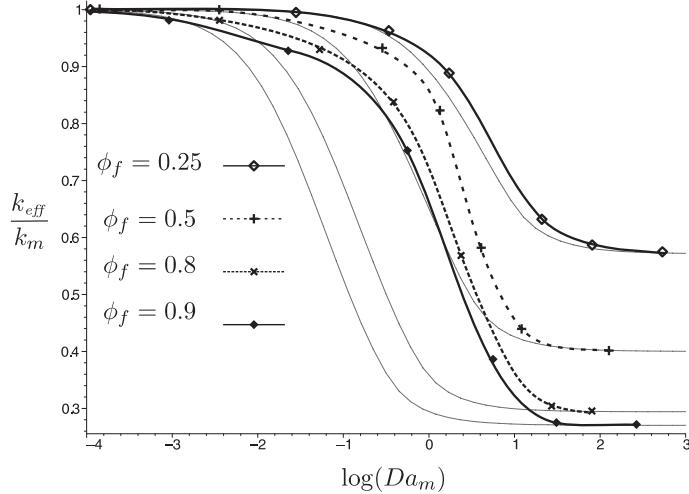


FIG. 5.16 – Réactivité effective en fonction du nombre de Damköhler et du taux de fibre ϕ_f pour $\tilde{K} = 4$ donnée par la simulation numérique et par le modèle 1D (courbes grisées).

taux de fibre. Lorsque une phase est très majoritaire comme illustré par la fibre sur la figure 5.17, le flux moyen qu'elle reçoit est proche du flux 1D. Or, nous avons vu que dans le cas des surfaces récessives c'est la phase faible qui contrôle l'évolution morphologique et le comportement effectif qui en découle. Ainsi, la matrice étant bien décrite par le modèle 1D pour ϕ_f faible, l'écart entre les deux modèles est faible. Au contraire, quand ϕ_f est grand, le flux reçu par la matrice est plus grand que le flux 1D. La matrice se comporte donc comme une zone plus réactive que dans le cas 1D et l'écart entre les modèles augmente. Ainsi, pour $\tilde{K} = 4$, $Da_m = 1$, on passe d'un écart de 3% pour $\phi_f = 0.25$ à un écart de 210% pour $\phi_f = 0.9$.

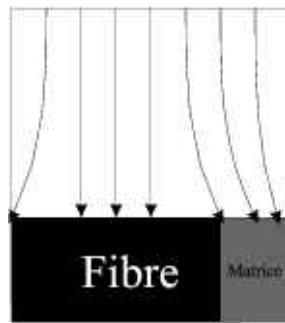


FIG. 5.17 – Représentation des flux au-dessus de la paroi hétérogène.

5.2.3 Autres géométries

Dans les différents modèles de surface ablatives que nous avons étudiés, la géométrie était toujours identique. Il s'agissait d'une fibre verticale. Nous recherchons maintenant l'évolution du comportement effectif lorsque la géométrie du milieu composite change. Les géométries possibles sont indénombrables. Nous proposons ici uniquement les tendances observées lors de variations simples autour des géométries que nous avons abordées.

Cylindre incliné

On recherche l'effet de l'inclinaison du cylindre sur le comportement en ablation. Soit α_f , l'angle entre l'axe de ce cylindre et la verticale.

Régime Réactif : $Da \ll 1$ Une première cellule est formée par une fibre inclinée à 45° dont l'évolution est donnée figure 5.18 et la surface stationnaire 5.19. Une seconde cellule est formée par une structure type 4D. En régime réactif, l'évolution est indépendante de ϕ_f mais dépend de R_f . Dans ces deux cellules la quantité de chaque phase présente dans chacune des tranches est constante et identique à la cellule "fibre verticale" avec $\tilde{K} = 3$. Or, en régime réactif, les points évoluent indépendamment de leur voisinage. Le code doit donc, en régime réactif, fournir des évolutions identiques. Le résultat est présenté figure 5.20. On constate la très bonne adéquation entre les différentes simulations.

Régime Diffusif : $Da \gg 1$ Dans ce cas, la surface reste plane. L'inclinaison du cylindre n'intervient plus. La réactivité reste $k_{\text{eff}} = k^*$. Cependant, il n'y a plus équivalence entre les fractions volumiques et les fractions surfaciques. On remplace alors ϕ_f par la fraction surfacique dans une tranche horizontale du composite.

Régime Mixte : $Da = O(1)$ Pour observer l'impact de l'inclinaison sur le comportement du composite, nous réalisons une simulation numérique avec une cellule formée par une fibre inclinée à 45° et nous choisissons $\tilde{K} = 4$, $\phi_f = 0.5$ et $Da_m = 2$. On obtient alors une réactivité effective stationnaire $\frac{k_{\text{eff}}}{k_m} = 0.77$. En comparant cette valeur avec le cas 2D dont l'évolution de la réactivité effective est donnée par la figure 5.10, on obtient un écart de seulement 4%. A ce stade, l'inclinaison ne semble pas jouer un rôle important sur la réactivité du système.

Lorsque la fibre est inclinée, il existe un point de la surface où elle émerge si l'angle α_f n'est pas strictement égal à 90° . Lorsque la fibre est parallèle à la paroi initiale, ce point d'émergence n'existe pas. Le cas $\alpha_f = 90^\circ$, n'est donc pas une simple limite du cas incliné et doit être traité spécifiquement.



FIG. 5.18 – Évolution d'un fil à 45° en régime réactif avec $\tilde{K} = 3$.

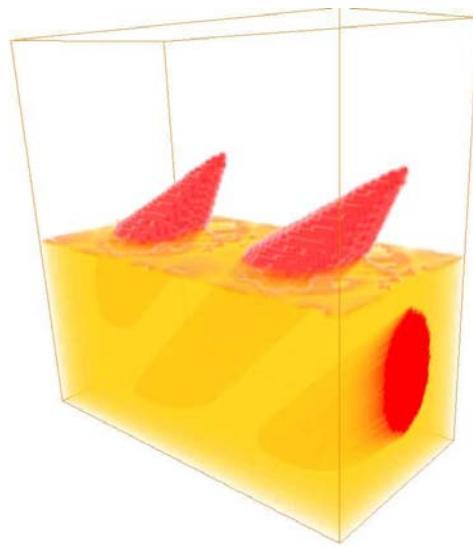


FIG. 5.19 – Profil stationnaire d'un fil à 45° en régime réactif avec $\tilde{K} = 3$.

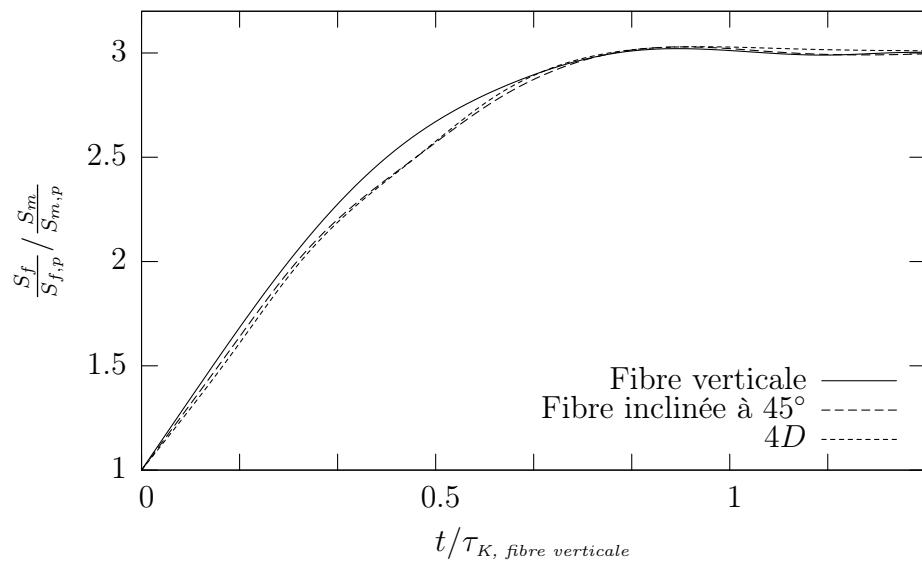


FIG. 5.20 – Évolution du rapport des surfaces en régime réactif pour différentes morphologies avec $\tilde{K} = 3$ et $\phi_f = 0.75$.

Cylindre transverse

Nous considérons maintenant le cas d'un cylindre parallèle à la surface. Le motif est alors un motif 2D comme illustré par la figure 5.21. L'arrangement est toujours carré. On a alors égalité des périodes verticale et horizontale du motif. Avec une

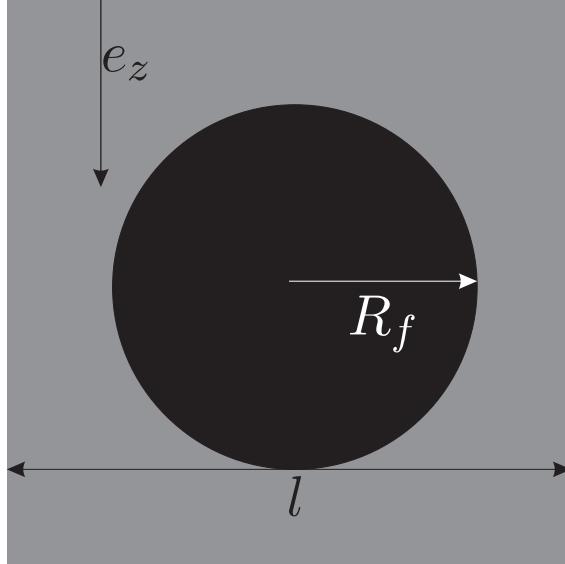


FIG. 5.21 – Motif du composite avec les renforts parallèles à la surface.

telle géométrie, il n'existe plus de géométrie stationnaire. Il existe toujours un régime établi mais celui-ci est un régime périodique. On aura donc une variation périodique de k_{eff} avec une période spatiale imposée par l la période du motif.

Régime Diffusif : $Da \gg 1$ Une nouvelle fois, la surface reste plane dans ce régime. La réactivité effective est alors la moyenne harmonique des réactivités effectives relatives aux surfaces exposées. Dans ce cas, nous pouvons calculer analytiquement la surface occupée par chaque phase au cours de la récession. On prend $z = 0$ à la surface du motif illustré par la figure 5.21. Soit S_p , la section du motif. Tant que $z < \frac{l}{2} - R_f$, on a $S_f = 0$. Pour $z \in [\frac{l}{2} - R_f, l/2]$, on a $S_f/S_p = \frac{1}{l} \sqrt{R_f^2 - (l/2 - z)^2}$. On peut alors calculer :

$$k_{eff} = \frac{1}{\frac{S_f/S_p}{k_f} + \frac{1-S_f/S_p}{k_m}} \quad (5.39)$$

Pour $z < \frac{l}{2} - R_f$, on a simplement :

$$k_{eff} = \frac{1}{\frac{0/S_p}{k_f} + \frac{1-0/S_p}{k_m}} = k_m \quad (5.40)$$

Et pour $z \in [\frac{l}{2} - R_f, l/2]$:

$$k_{eff} = \frac{k_m}{1 + \frac{\tilde{K}-1}{l} \sqrt{R_f^2 - (l/2 - z)^2}} \quad (5.41)$$

On en déduit alors la valeur moyenne de la réactivité sur le motif :

$$\begin{aligned}\bar{k}_{\text{eff}} &= \frac{2}{l} \int_0^{l/2} k_{\text{eff}} dz \\ &= \left(1 - \frac{2R_f}{l} + \int_{\frac{l}{2}-R_f}^{l/2} \frac{2}{l + (\tilde{K} - 1)\sqrt{R_f^2 - (l/2 - z)^2}} dz \right) k_m\end{aligned}\quad (5.42)$$

Sur $z \in [\frac{l}{2} - R_f, l/2]$, on a $k_{\text{eff}} < k_m$. On en déduit $\bar{k}_{\text{eff}} < k_m$. On souhaite comparer la réactivité ainsi obtenue à celle obtenue dans le cas vertical. Dans le cas vertical, on a :

$$k_{\text{eff}} = k^* = \frac{k_m}{1 + (\tilde{K} - 1)\phi_f} \quad (5.43)$$

On calcule alors numériquement le rapport $\frac{\bar{k}_{\text{eff}}}{k^*}$. On obtient alors le graphe donné figure 5.22. On obtient que, dans le cas diffusif ($Da \gg 1$), la réactivité effective moyenne d'un composite avec les renforts parallèles à la surface est toujours supérieure à la réactivité effective d'un composite avec les renforts orthogonaux à la surface. On remarque que ce rapport passe par un maximum. Pour $\tilde{K} = 4$ ce maximum est obtenu pour $\frac{R_f}{l} = 0.46$ soit $\phi_f \approx \frac{2}{3}$, il vaut alors $\frac{\bar{k}_{\text{eff}}}{k^*} = 1.6$. Lorsque $Da \gg 1$, l'inversion de la loi $\langle J \rangle = f(k_{\text{eff}})$ requiert une grande précision sur le flux moyen. Le caractère oscillant rend ce calcul difficile. Il ne nous a donc pas été possible de valider numériquement ce calcul asymptotique.

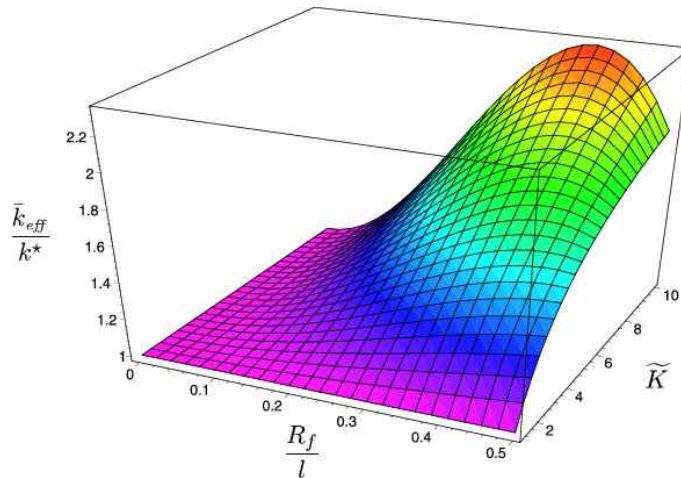


FIG. 5.22 – Réactivité effective moyenne d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité effective d'un composite avec les renforts orthogonaux à la surface dans le cas diffusif ($Da \gg 1$).

Autres régimes Lorsque le nombre de Damköhler n'est pas grand devant l'unité nous ne savons plus calculer la réactivité analytiquement. On procède alors

à la simulation numérique du système. Nous ne cherchons pas à réaliser une étude complète de ce cas géométrique. On présente ici ce qu'il se produit dans le régime réactif. Ainsi, une simulation est réalisée avec Rabl3D, la version dégradée de DiAbl3D pour le calcul en régime réactif. Pour comparer avec les autres résultats présentés dans cette partie, on prend $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$. L'évolution de la réactivité effective est donnée par la figure 5.23. Cette figure montre que une période représente environ $10^{-2}\tau_K$ et que le système atteint très rapidement un régime oscillant établi. En effet, dès la deuxième pseudo-période, il n'y a plus de modification notable du motif périodique. Pour obtenir la réactivité moyenne au cours du temps, on introduit la moyenne courante $\frac{1}{k_m t} \int_0^t k_{\text{eff}} dt$. La variation de cette fonction sur les premiers temps est donnée 5.24. On observe alors que la réactivité effective tend vers une valeur moyenne supérieure à la réactivité de la matrice : $k_{\text{eff}} = 1.16 k_m$. On obtient ainsi, qu'en moyenne, le motif est plus réactif que le plus réactif de ces composants. Ceci illustre un effet composite qui n'est pas désiré dans le cas des composites C/C. L'évolution morphologique du composite est donnée par la figure 5.25. On observe qu'après la première période, il y a des fibres déchaussées. Ceci peut entraîner une plus grande fragilité du composite.

Remarque On note que, dans cette configuration géométrique, avec Da petit, il est possible d'augmenter la gazéification d'un matériau homogène en rajoutant un renfort moins réactif au matériau. L'étude de cette géométrie montre que le passage de la fibre au fil amène à une réactivité anisotrope du fil avec une réactivité apparemment plus grande lorsqu'il est oxydé par le côté que par le dessus.

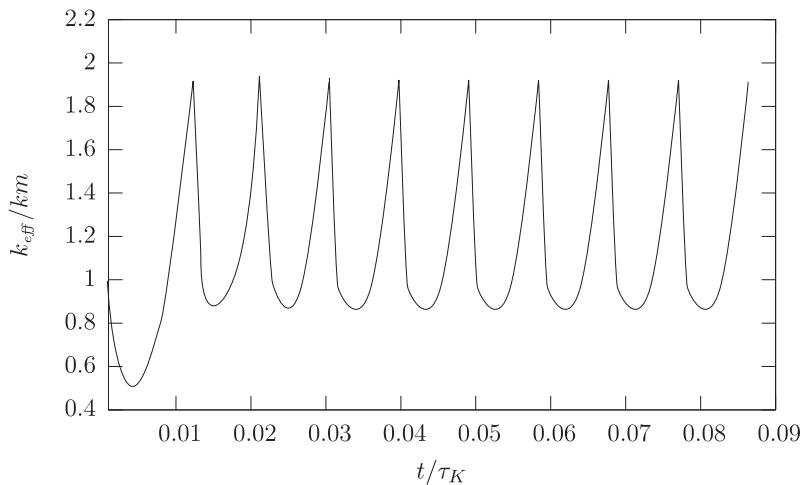


FIG. 5.23 – Réactivité effective d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité de la matrice dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$.

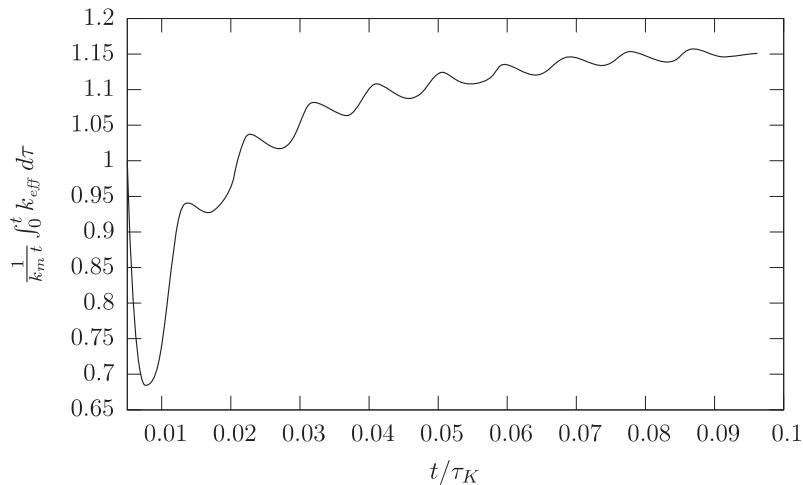


FIG. 5.24 – Moyenne courante de la réactivité effective d'un composite avec les renforts parallèles à la surface rapportée à la réactivité de la matrice dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $K = 4$.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié par simulation numérique les caractéristiques du régime transitoire et établi pour une surface hétérogène récessive. Cette approche nous a permis de retrouver par l'expérience les résultats asymptotiques établis théoriquement sous flux 1D.

Ce chapitre a démontré la capacité de DiAbl3D à décrire l'évolution récessive d'une surface hétérogène et d'en dégager le comportement effectif. On retiendra que :

- L'opérateur qui à $k(\underline{x})$ associe k_{eff} passe de l'opérateur max à l'opérateur moyenne harmonique en fonction des conditions de sollicitations. Le comportement effectif n'est donc pas intrinsèque au composite.
- La réactivité effective de la surface récessive est toujours supérieure à celle de la surface non-récessive associée.

Les résultats que nous avons obtenus dans ce chapitre reposent sur la connaissance des réactivités élémentaires : k_f et k_m . Cependant, ces réactivités microscopiques sont le plus souvent mal connues. C'est pourquoi dans le chapitre suivant nous allons utiliser les outils numériques dont nous disposons pour obtenir ces réactivités par une approche inverse. Une fois ces réactivités estimées, nous étudierons le comportement à l'échelle mésoscopique de composites d'architectures 4D et tissés.

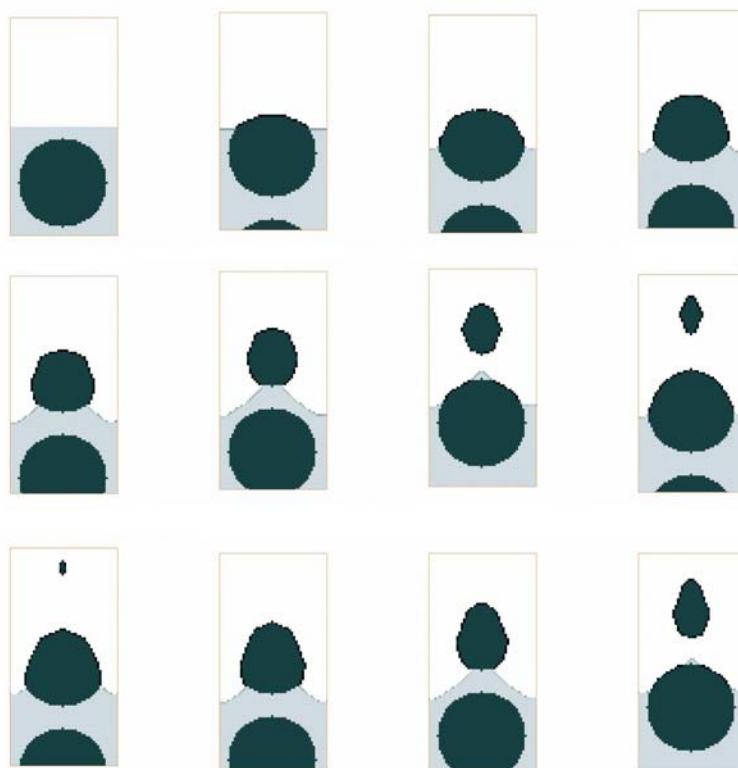


FIG. 5.25 – Évolution morphologique d'un composite avec les renforts parallèles à la surface dans le cas réactif ($Da \ll 1$) avec $\phi_f = 0.5$ et $\tilde{K} = 4$.

Troisième partie

Applications aux composites C/C pour les cols de tuyère

Chapitre 6

Identification des réactivités élémentaires par approche inverse

L'ensemble des travaux que nous avons exposés sur les parois non-récessives et récessives repose sur la construction des réactivités effectives à partir des réactivités élémentaires des fibres et matrices. Malheureusement dans un certain nombre de cas, le nôtre y compris, ces réactivités sont peu ou mal connues. Dans le cas de l'ablation des composites C/C, la difficulté à connaître les réactivités à haute température de la fibre et de la matrice a une double origine :

1. La microstructure de la matrice et les propriétés associées dépendent de la fibre sur laquelle elle est déposée (Quli et al., 1998). Il est donc très difficile d'obtenir une matrice isolée représentative du comportement à petite échelle de la matrice qui entoure les fibres.
2. La fibre peut facilement être isolée. Cependant un amas de fibres constitue un milieu poreux. L'expérimentation se déroulant à l'échelle de ce milieu et non des fibres isolées, la réactivité observée résulte d'un changement d'échelle. Dans le chapitre suivant le cas des composites poreux est abordés et illustre que le lien entre réactivité intrinsèque et effective en fonction de la température n'est pas trivial.

Une méthode classique pour les matériaux homogènes, ou supposés comme tels, est de retrouver la réactivité connaissant la vitesse de recul du matériau. C'est en effet la méthode utilisée par Borie et al. (1990) et Chelliah et al. (1996). Cependant, nous ne disposons pas des vitesses de recul relatives à chacun des composants élémentaires du composite. Il faut alors se résoudre à déterminer les réactivités élémentaires à partir du comportement apparent du matériau par une approche inverse Aspa et al. (2006b).

Le but de ce chapitre est de mettre au point une procédure d'identification. L'application de cette procédure fournit une estimation des réactivités des composants microscopiques. Dans ce chapitre, le problème inverse d'identification est illustré dans son application au matériau 4D de référence.

6.1 Position du problème inverse

Dans les parties consacrées à l'étude des surfaces non-récessives puis récessives, le comportement effectif du composite a été obtenu à partir de ses caractéristiques élémentaires. Il s'agit alors d'une approche directe. Dans ce chapitre, on recherche à établir une procédure permettant, à partir de propriétés résultant du processus d'ablation, d'identifier les caractéristiques élémentaires du matériau. Il s'agit alors d'une approche inverse. Soit $\phi(x, t)$ un ensemble de variables physiques (température, pression, concentration, position d'un interface,...), solution d'un système d'équations aux dérivées partielles dont les p_1, \dots, p_N sont les paramètres d'entrée. Soit Φ_i un certain nombre d'observations des variables $\phi(x, t)$, par exemple

$$\Phi_i = \phi(x_i, t_i) \quad (6.1)$$

Dans l'approche inverse, on cherche à estimer les paramètres d'entrée p_1, \dots, p_N à partir des observations Φ_i . On estime alors ϕ en fixant a priori les paramètres d'entrée. On note $E = \{p_1^E, \dots, p_N^E\}$ l'ensemble des paramètres testés, et $\phi^E(x, t)$ la solution obtenue. On définit alors une fonction objectif qui mesure une distance entre les résultats prédicts pour E, ϕ^E et les valeurs mesurées Φ_i . La fonction objectif doit alors être positive :

$$F(\phi_i^E, \Phi_i) \geq 0 \quad (6.2)$$

On peut prendre par exemple, une moyenne pondérée des écart quadratiques :

$$F(\phi_i^E, \Phi_i) = \sum_i \lambda_i (\phi_i^E - \Phi_i)^2 \quad (6.3)$$

Les poids λ_i permettent notamment, de mettre dans la fonction objectif des variables d'ordre de grandeur différentes.

Le problème inverse revient à chercher $E_{optimal}$ qui minimise la fonction objectif F . Pour pouvoir inverser le problème, il faut que l'ensemble des équations soit de dimension supérieure ou égale à la dimension de l'ensemble des inconnues. Cette condition n'est cependant pas suffisante puisqu'il faut de plus que la fonction ϕ dépende bien des inconnues recherchées au voisinage de Φ_i . Par exemple, nous avons montré au chapitre 4.1 consacré au régime réactif que, dans ce régime, la réactivité effective stationnaire ne dépend ni des fractions occupées par chaque phase ni des caractéristiques des phases fortes. On ne peut ainsi retrouver d'informations concernant la fibre à partir de la réactivité effective du fil si le régime est réactif. De même, si le régime est limité par la diffusion, la morphologie reste plane indépendamment des valeurs des réactivités. Dans ce cas il n'y a donc pas de sensibilité de l'objectif "morphologie" aux inconnues que sont les réactivités. Le choix de la fonction objectif n'est donc pas direct. Pour notre problème, il est difficile de définir la procédure d'identification dans le cas général. Il faut définir au cas par cas l'objectif en fonction des paramètres mesurables qui sont sensibles aux inconnues.

Nous ne disposons pas de données concernant le comportement du composite initial ou sur des temps courts. Le modèle de surface non récessive ne pourra donc pas être

utilisé. Notre modèle d’ablation pour les surfaces récessives permet d’obtenir les morphologies et la réactivité effective du composite à partir des réactivités élémentaires. La fonction objectif doit donc être construite autour des éléments morphologiques et de réactivité effective dont nous disposons. De plus, l’observation du composite ablaté permet de définir la géométrie initiale du problème étudié.

Dans ce chapitre, on illustre les capacités d’identification de notre modèle en considérant le cas d’une baguette de composite 4D. On recherche alors une évaluation des réactivités des composants microscopiques (fibres, matrice, ...) de la baguette.

6.2 Identification des paramètres morphologiques

On revient ici sur les observations MEB exposées dans la première partie. On reprend une vue microscopique de la baguette figure 6.1. Les observations ont ici un double but :

- Premièrement, obtenir la répartition dans la baguette des différentes phases. Ceci nous permettra de constituer la géométrie de notre cellule d’étude.
- Deuxièmement, mesurer des paramètres morphologiques qui nous permettront de constituer notre objectif.

Au vu de ce que nous avons appris dans les chapitres précédents consacrés aux surfaces récessives, le cliché MEB présenté figure 6.1, réalisé au cœur de baguette, montre que :

- Les fibres résistent mieux que la matrice qui les entoure ;
- Le profil des fibres est époustouflant. Le caractère conique des fibres permet de déduire que l’ablation se déroule alors dans un régime dominé par la réaction :
 $Da < 1$.

Sur le cliché figure 6.1, il est difficile de distinguer le dépôt de matrice qui entoure les fibres. Sur le bord des baguettes, la densité de fibre est légèrement plus faible. L’épaisseur de matrice autour de chaque fibre est alors plus importante. Le cliché figure 6.2 est réalisé en bord de baguette. Il complète les observations faites à cœur en montrant que :

- Il existe une interphase plus faible que la matrice et les fibres. Son épaisseur est de l’ordre d’un demi-micromètre.
- Les pentes que prennent la matrice et la fibre sont identiques. Après notre étude du régime réactif au chapitre 4.1, ceci tend à montrer que la matrice réagit de façon équivalente à la fibre.

Nous avons donc :

$$k_i \gg k_f \approx k_m$$

On peut alors construire notre cellule d’étude élémentaire. Celle-ci est présentée figure 6.3. L’observation morphologique, nous a permis de dégager deux inconnues à identifier. Il faut désormais rechercher des données expérimentales sensibles au couple $k_i, k_f = k_m$.

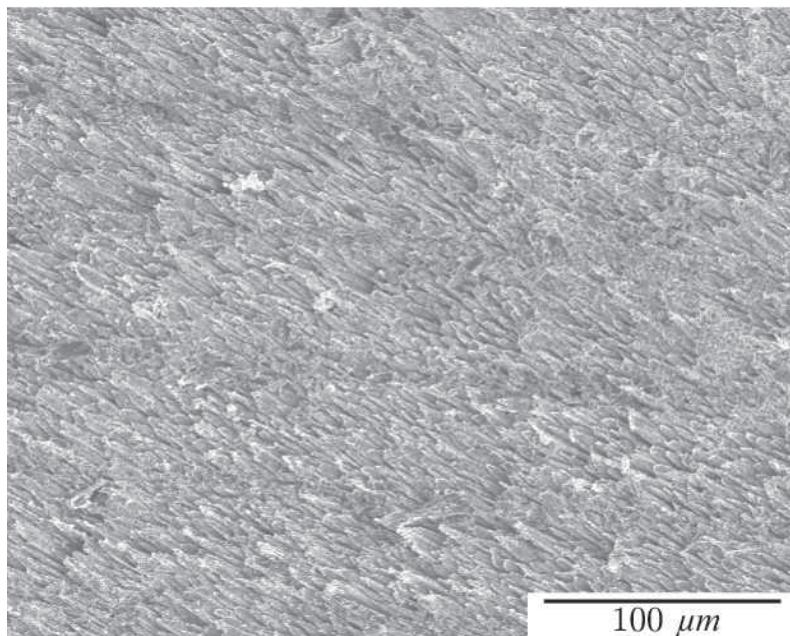


FIG. 6.1 – Cliché MEB d'une baguette ablatée.

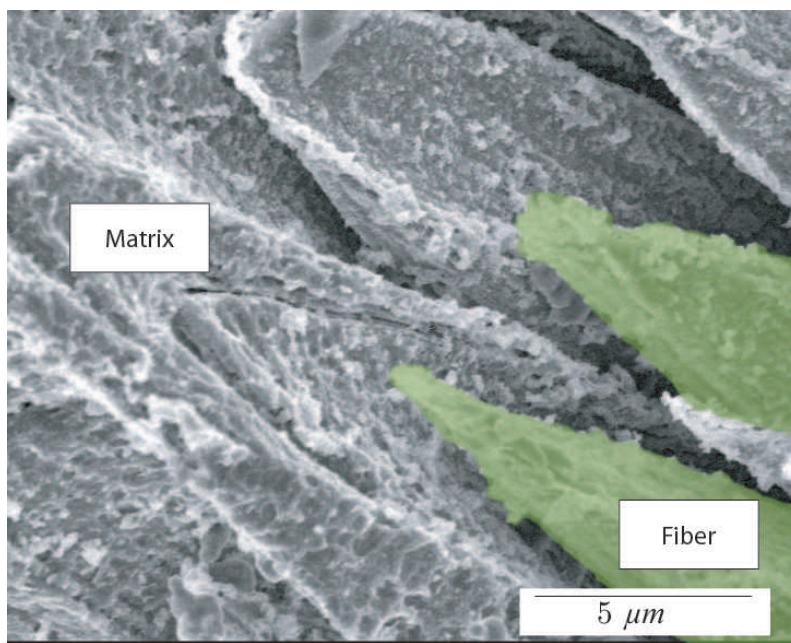


FIG. 6.2 – Cliché MEB de la zone d'interphase.

On utilise maintenant les observations pour dégager des paramètres quantitatifs caractéristiques de la composition de la baguette. La morphologie donne *a priori* un nombre important de paramètres quantifiables. Cependant, ils ne sont pas tous mesurables sur les observations dont nous disposons. Il n'est par exemple pas possible, à partir de nos clichés, de mesurer la hauteur des pointes de fibres. Pour cela il fau-

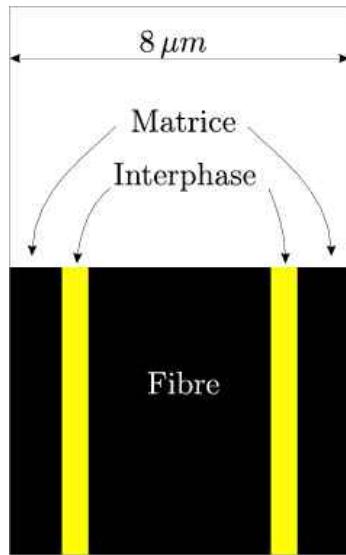


FIG. 6.3 – Cellule élémentaire représentant le motif périodique de la baguette.

drait utiliser une image 3D issue d'une tomographie à haute résolution par exemple. Avec une telle image, il est théoriquement possible de mesurer un nombre suffisant de paramètres morphologiques et ainsi de s'affranchir de l'utilisation de la vitesse de recul. Dans notre cas, nous ne disposons pas de tels clichés. Le seul paramètre ablatif pertinent accessible à la mesure est l'angle Θ au sommet des fibres. La mesure de l'angle au sommet sur le cliché 2D est relativement délicat et conduit à une incertitude importante des mesures. On estime alors $\Theta = 30^\circ \pm 5^\circ$.

L'observation du matériau ablaté a permis de définir la géométrie et les inconnues de notre problème : la réactivité de l'interphase k_i et celle jugée égale de la matrice et de la fibre. Cependant un seul paramètre observable Φ a été obtenu. On utilise alors la réactivité effective de la baguette comme second paramètre observable. Celle-ci est obtenue à partir de la vitesse de recul mesurée expérimentalement.

6.3 Calcul de la réactivité effective

Nous avons obtenu un premier paramètre observable Θ à partir de l'étude morphologique du composite. Dans cette partie, on recherche à exprimer la réactivité effective de la baguette qui sera notre seconde variable observable. Comme nous l'avons observé au paragraphe 1.2.2, le composite 4D de référence est lisse à l'échelle mésoscopique. Nous avons pu calculer au chapitre 2, qu'à cette échelle, le nombre de Damköhler maximal était de l'ordre de la dizaine pour une réactivité caractéristique de l'ordre de 200 m/s. On montrera que, pour le 4D de référence, qui est un matériau très résistant à l'ablation, le nombre de Damköhler est de l'ordre de 0.1. Or, avec $Da < 1$, un gradient de contraste amène à une rugosité du composite. Une surface lisse implique alors que les réactivités des composants soient très proches. Ainsi, la réactivité des baguettes et de la matrice est équivalente. Le matériau à

l'échelle mésoscopique est alors uniforme. Le changement d'échelle méso→macro est donc trivial :

$$k_{\text{composite}} = k_b = k_M \quad (6.4)$$

où k_b est la réactivité de la baguette et k_M celle de la matrice qui entoure les baguettes.

Remarque : Dans le cas des composites tissés, cette étape n'est pas aussi simplement réalisable. En effet, le composite tissé est poreux à l'échelle mésoscopique. Le passage de l'échelle macroscopique à l'échelle mésoscopique est alors complexe comme nous le montrerons au paragraphe 7.2 où sont comparées deux architectures tissées.

La vitesse de recul apparente du composite est donnée par :

$$V_a = \Upsilon k_{\text{composite}} c_p = \Upsilon k_b c_p \quad (6.5)$$

où c_p est la concentration en oxydant à la paroi. Le volume molaire du matériau est connu, la vitesse de recul stationnaire est mesurée expérimentalement, il ne reste plus qu'à évaluer c_p . Compte tenu des fractions molaires données tableau 1.1, la contribution de CO_2 à l'oxydation est négligée et seule l'ablation due à la vapeur d'eau est prise en compte. On a donc $c_p = c_{H_2O,p}$.

Comme cela a été vu au chapitre 2, à l'échelle mésoscopique, le transport de masse est dominé par la diffusion turbulente. Dans ce cas, un calcul explicite du transport de masse est complexe. On choisit ici d'approcher les effets de la turbulence par un modèle simple. Notre système est uniforme à l'échelle mésoscopique. On suppose alors que le gradient de concentration est uniquement porté par y et que la vitesse est portée par x . On obtient alors un flux de réactif purement diffusif et porté par y . La paroi qui représente la baguette est traitée comme une paroi lisse et uniforme. En turbulence, tout les transports sont contrôlés par les tourbillons. Il est donc raisonnable de poser $Sc^{(t)} = \frac{\nu^{(t)}}{D^{(t)}} = 1$. Le composite étudié ici a été tiré dans une tuyère de petites dimensions. La couche limite est alors de l'ordre de 0.1 mm et $D = 7.8\text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. La viscosité turbulente $\mu^{(t)}$ est donnée par le code CLIC comme présenté figure 1.6. Le code CLIC est destiné à des calculs à l'échelle de la couche limite. On suppose cependant que les valeurs qu'il fournit dans le voisinage de la paroi ($y \approx 10\mu\text{m}$) ont un sens physique. En utilisant la masse volumique du mélange gazeux $\rho = 4.93\text{ kg.m}^{-3}$, on calcule alors le coefficient de diffusion turbulente $D^{(t)}$. La diffusion ordinaire et turbulente se déroulent en parallèle. Les vitesses des phénomènes s'ajoutent alors. On obtient le coefficient de diffusion effectif D_{eff} représenté sur le graphe figure 6.4. Le coefficient $D^{(t)}$ est nul à la paroi et augmente très rapidement ensuite suivant une pente quasi-constante.

Pour faciliter les calculs suivants, nous substituons à la loi de D_{eff} complète, la loi

6.3 Calcul de la réactivité effective

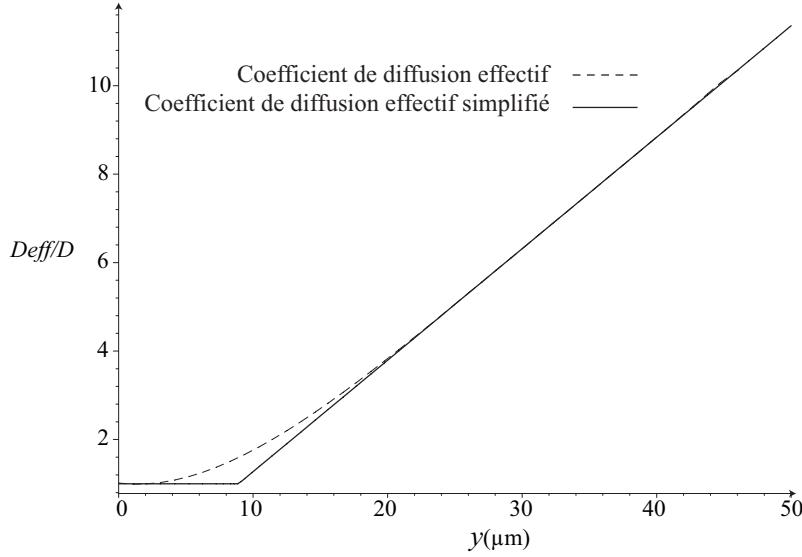


FIG. 6.4 – Coefficient de diffusion effectif dans le cas du $4D$ de référence.

donnée en traits plein sur le graphe 6.4 :

$$D_{eff}(y) = \begin{cases} D & \text{si } y < \delta \\ D(1 + \frac{y-\delta}{l_t}) & \text{si } y > \delta \end{cases} \quad (6.6)$$

où D est le coefficient de diffusion ordinaire et D/l_t la pente du coefficient turbulent. Nous avons obtenu une loi pour le coefficient D_{eff} . Pour calculer le champ de concentration, on procède par raccordement entre le domaine laminaire et turbulent. Le raccordement est fait en $y = \delta$. Soient c_δ , J_δ la concentration et le flux en $y = \delta$ et h la hauteur totale de la couche limite. Le problème dans le domaine laminaire s'écrit :

$$D\partial_y c_l = k_b c_l \text{ en } y = 0 \quad (6.7)$$

$$\partial_y^2 c_l = 0 \text{ sur } 0 < y < \delta \quad (6.8)$$

$$c_l = c_\delta \text{ en } y = \delta \quad (6.9)$$

On obtient alors le champ de concentration laminaire :

$$c_l = \frac{c_\delta}{1 + \frac{D}{k_b \delta}} \frac{y}{\delta} + \frac{c_\delta}{1 + \frac{k_b \delta}{D}} \quad (6.10)$$

On en déduit le flux en $y = \delta$:

$$J_\delta = -k_b c_\delta \frac{1}{1 + \frac{k_b \delta}{D}} \quad (6.11)$$

On peut maintenant calculer le champ de concentration dans le domaine turbulent. Le problème dans le domaine turbulent s'écrit :

$$c_T = C_0 \text{ en } y = h \quad (6.12)$$

$$D\left(1 + \frac{y - \delta}{l_t}\right)\partial_{y^2}^2 c_T + \frac{D \partial_y c_T}{l_t} = 0 \text{ sur } y > \delta \quad (6.13)$$

$$-D\partial_y c_T = J_\delta \text{ en } \delta < y < h \quad (6.14)$$

$$c_T = c_\delta \text{ en } y = \delta \quad (6.15)$$

où C_0 est la concentration en vapeur d'eau dans la veine. Ce système permet de calculer $c_T(y)$ et d'éliminer c_δ . On obtient alors :

$$c_T = C_0 \frac{\ln\left(1 + \frac{y-\delta}{l_t}\right) + \frac{D+\delta k_b}{l_t k_b}}{\ln\left(1 + \frac{h-\delta}{l_t}\right) + \frac{D+\delta k_b}{l_t k_b}} \quad (6.16)$$

Comme attendu le champ de concentration a un profil logarithmique dans la partie turbulente. On en déduit la concentration en $y = \delta$:

$$c_\delta = C_0 \frac{\frac{D+\delta k_b}{l_t k_b}}{\ln\left(1 + \frac{h-\delta}{l_t}\right) + \frac{D+\delta k_b}{l_t k_b}} \quad (6.17)$$

En injectant cette expression dans le profil linéaire de concentration c_l , on obtient alors la concentration à la paroi :

$$c_p = C_0 \frac{\frac{D}{l_t k_b}}{\ln\left(1 + \frac{h-\delta}{l_t}\right) + \frac{D+\delta k_b}{l_t k_b}} \quad (6.18)$$

On revient alors à notre expression de la vitesse de recul :

$$V_a = \Upsilon k_b c_p \quad (6.19)$$

En utilisant l'expression obtenue pour la concentration à la paroi, on déduit alors la réactivité de la baguette :

$$k_b = \frac{D/l_t}{\frac{\Upsilon C_0 D}{V_a l_t} - \frac{\delta}{l_t} + \ln\left(\frac{l_t}{l_t+h-\delta}\right)} \quad (6.20)$$

A partir des paramètres du tir et des vitesses de recul fournies par Snecma Propulsion Solide issues des tirs expérimentaux, on obtient :

$$k_b = 2.4 \pm 0.2 \text{ m.s}^{-1} \quad (6.21)$$

L'incertitude donnée ici provient de la dispersion des vitesses de recul. Notre incertitude vraie sur la valeur de k_b est assurément plus grande car nous avons décrit le transport de masse en turbulence se déroulant au niveau de la pièce de col par une équation de diffusion 1D. Ne disposant pas d'un modèle plus complexe, il est difficile d'évaluer l'impact des hypothèses faites ici. Cette réactivité est du même ordre que celle obtenue à partir des travaux ONERA (Borie et al., 1990) pour le même type

de composite : $k_{exp} = 7 \text{ m.s}^{-1}$ à 3000 K pour une étude avec une couche limite à l'équilibre. Si de plus, on remarque que dans les travaux de Borie et al. (1990) la dispersion est de l'ordre de 200%, on en conclut que notre valeur est parfaitement acceptable.

A ce stade, nous disposons de deux grandeurs mesurées pour notre fonction objectif que sont l'angle au sommet des fibres et la réactivité effective de la baguette. De plus, nous avons la relation :

$$k_i = k_f < k_i \quad (6.22)$$

ainsi que la géométrie de la cellule d'étude. Nous pouvons alors procéder à l'identification par approche inverse.

6.4 Simulations

Nous avons vu dans les chapitres consacrés aux surfaces récessives que le lien entre réactivité effective et réactivité élémentaires est complexe. Nous ne savons donc pas écrire la fonction analytique inverse permettant de passer de la réactivité effective et des fractions volumiques aux réactivités élémentaires. Nous effectuons alors un recherche heuristique des valeurs élémentaires par essai et erreur, sans chercher à utiliser des méthodes mathématiques complexes. Ces outils devront cependant être développés dans la perspective d'une utilisation systématique de cette approche inverse.

A la suite des observations nous avons pu constituer une cellule élémentaire dont la largeur est d'environ $l_\mu = 8 \mu\text{m}$. On a $D = 7.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ et $k_b = 2.4 \pm 0.2 \text{ m.s}^{-1}$. Notre système représente un motif élémentaire de la baguette. On doit donc avoir pour notre cellule $k_{eff} = k_b \approx 2.4 \text{ m.s}^{-1}$. On obtient alors un nombre de Damköhler défini par rapport à la réactivité effective égal à :

$$Da_{eff} = \frac{k_{eff} l_\mu}{D} \approx 0.24 \quad (6.23)$$

On sait que lorsque $Da < 1$, k_{eff} est proche de $\max(k) = k_i$ et inversement. On débute donc notre recherche avec k_i de l'ordre de 2.4 et on fait varier la valeur $k_m = k_f$. On recherche k_f et k_i en procédant par dichotomie avec $k_{eff} = k_b$ pour objectif. La réactivité k_b étant connue à $\pm 0.2 \text{ m.s}^{-1}$, on recherche k_i avec la même précision. Ainsi, en procédant par simulations numériques successives sur une cellule $2D$, on définit un domaine où $k_{eff} \in [2.2, 2.6] \text{ m.s}^{-1}$. En mesurant l'angle au sommet obtenu pour chacune des simulations du domaine k_{eff} objectif, on recherche l'intersection de ce domaine avec le domaine des points qui vérifient $\Theta \in [25^\circ, 35^\circ]$. On obtient alors le domaine représenté figure 6.5. Lorsque le nombre de Damköhler est faible la réactivité effective dépend essentiellement du composant le plus réactif. C'est pour cela que la frontière relative à k_{eff} est quasiment horizontale. On vérifie bien que les paramètres k_{eff} et Θ que nous avons choisis comme objectifs ne sont pas totalement

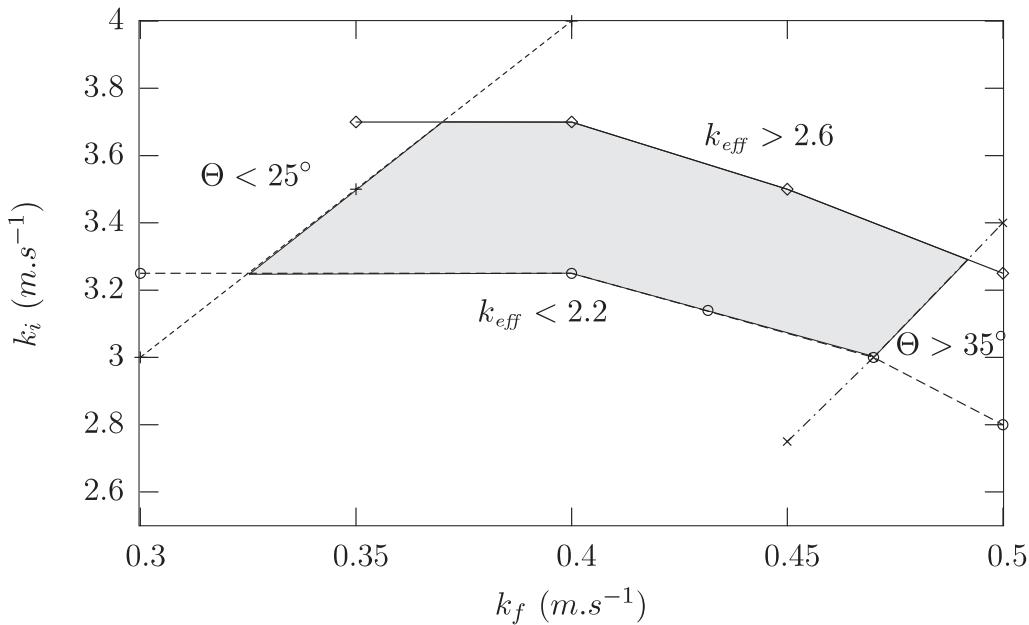


FIG. 6.5 – Domaine des réactivités identifiées par approche inverse pour les critères $k_{eff} \in [2.2, 2.6] m.s^{-s}$ et $\Theta \in [25^\circ, 35^\circ]$.

dépendants puisque nous arrivons bien à définir un domaine fermé. Nous identifions donc un domaine pour les réactivités qui correspond à :

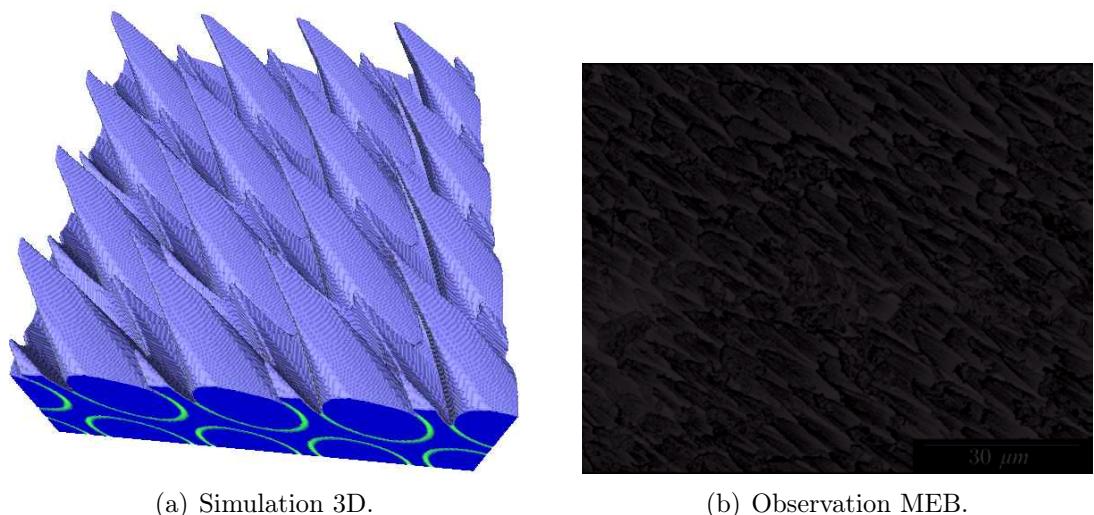
$$k_i \in [3.0, 3.7] m.s^{-1} \quad (6.24)$$

$$k_f = k_m \in [0.3, 0.5] m.s^{-1} \quad (6.25)$$

Nous pouvons alors réaliser une simulation 3D pour vérifier si le domaine que nous avons défini ici est valide. Pour cela, on modélise la baguette par un arrangement carré de fibres ayant la direction (1, 1, 1) pour axe. Pour les réactivité on choisit un point au centre de notre domaine : $k_i = 3.4 m.s^{-1}$ et $k_f = 0.4 m.s^{-1}$. On obtient alors $k_{eff} = 2.4 m.s^{-1}$ ce qui confirme le faible impact du caractère 3D sur le comportement du composite. On observe en effet sur la figure 6.6 qu'en dépit de la complexité de la morphologie, l'interphase est bien alimentée en oxydant. On observe de plus qu'à cause de son inclinaison la fibre a perdu sa symétrie de révolution. L'accord qualitatif de la surface simulée figure 6.7(a) avec celle observée est donnée par la figure 6.7(b).



FIG. 6.6 – Morphologie stationnaire et lignes de courant pour le flux diffusif colorées par $\frac{c}{C_0}$, obtenues pour $k_i = 3.4 \text{ m.s}^{-1}$ et $k_f = 0.4 \text{ m.s}^{-1}$ avec $D = 7.8 \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$.



(a) Simulation 3D.

(b) Observation MEB.

FIG. 6.7 – Comparaison de la reconstruction de la surface à partir de la simulation 3D avec l'observation

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une approche originale qui permet d'obtenir les réactivités élémentaires des composants du matériau sans que ceux-ci soient séparés. Cette approche n'est cependant pas généralisable puisqu'elle utilise le fait qu'à l'échelle mésoscopique le composite étudié est uniforme. Dans le cas général, les réactivités microscopiques ne peuvent être obtenues qu'à partir d'un double processus de descente d'échelle.

Dans le cas que nous avons illustré ici, nous avons utilisé une grandeur morphologique ainsi qu'une grandeur liée au comportement effectif. Comme nous l'avons mentionné, il est théoriquement possible de réaliser une identification à partir de paramètres uniquement morphologiques s'ils sont en nombre suffisant. Pour cela les clichés MEB ne semblent pas les mieux adaptés. En effet, la mesure d'angles obtenus sur les morphologies est un exercice difficile lors qu'on s'appuie sur des clichés MEB. L'utilisation de micro-tomographies 3D permettraient de résoudre ce problème. On pourrait alors s'affranchir des mesures faites à chaud durant le tir pour obtenir les réactivités.

L'approche que nous avons présenté ici ne permet pas de s'affranchir d'essais expérimentaux pour obtenir la réactivité du composite. L'intérêt est que les réactivités à une échelle inférieure ont été obtenues alors qu'elles ne peuvent l'être en séparant fibre et matrice. On peut alors calculer la réactivité effective d'un composite qui utilise les mêmes composants élémentaires dans une architecture différente sans faire un nouvel essai.

Chapitre 7

Application à l'échelle mésoscopique du composite

Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé nos outils pour obtenir par approche inverse les réactivités élémentaires à l'échelle microscopique de la baguette. Dans ce chapitre, nous utilisons les outils dans une approche directe afin d'obtenir le comportement effectif de plusieurs composites à l'échelle mésoscopique. Dans un premier temps, l'étude porte sur un composite 4D dont la matrice mal infiltrée est poreuse. Cette étude permet d'illustrer pourquoi une loi $k_{\text{eff}} = f(\rho_{\text{macroscopique}})$ peut être prise à défaut. Dans un second temps, DiAbl3D est utilisé pour comparer le comportement ablatif de composites d'architectures différentes placés dans un écoulement laminaire. Ce calcul simule ce qu'on pourrait espérer observer dans une expérimentation d'oxydation en four.

7.1 Matériaux 4D atypiques

Sneecma Propulsion Solide dispose, pour chacune des familles de matériaux, d'une loi semi-empirique reliant la densité macroscopique du composite C/C à sa réactivité apparente. Cependant un certain nombre de composites n'obéissent pas à ces lois. Le composite 4D – 1 a une réactivité significativement plus grande que celle prévue par la loi $k = f(\rho_{\text{macroscopique}})$. Une première hypothèse est que ceci est dû à une mauvaise infiltration de la matrice. Le but de cette partie est d'évaluer la pertinence de cette hypothèse.

7.1.1 Matrice effective

Le composite considéré est moins dense que le 4D de référence. On a $\frac{\rho_{4D-1}}{\rho_{\text{ref}}} = 0.95$. Cependant on observe expérimentalement que ce composite est plus réactif qu'un composite standard de même densité qui, lui, obéit à la loi $k = f(\rho_{\text{macroscopique}})$. Les composites 4D sont conçus à partir de préformes de baguettes infiltrées par un bain liquide. Il est raisonnable de penser qu'entre le matériau de référence et 4D – 1, les baguettes sont identiques tant au niveau de la densité que de la réactivité. La perte

de densité globale résulte alors intégralement d'une infiltration insuffisante lors de la conception du composite. Le résultat est une matrice poreuse. On a donc pour la matrice :

$$\frac{\rho_{M-1}}{\rho_{ref}} = \frac{\frac{\rho_{4D-1}}{\rho_{ref}} - \phi_{baguette}}{1 - \phi_{baguette}} \quad (7.1)$$

où $\phi_{baguette}$ est la fraction volumique de baguette dans l'architecture 4D. On a $\phi_{baguette} = 0.75$, on en déduit alors :

$$\frac{\rho_{M-1}}{\rho_{ref}} = 0.8 \quad (7.2)$$

La porosité de la matrice est alors de 20%. Il faut maintenant se donner un pore type pour constituer une cellule élémentaire de matrice.

D'après les informations mises à notre disposition les pores sont des fentes fines dont la dimension la plus petite est de l'ordre du diamètre des fibres. En conséquence, les pores sont modélisés par des parallélépipèdes de $5 \mu\text{m}$ de large, infiniment haut et de longueur aléatoire tel que représenté sur la première image de la figure 7.1. D'après le raisonnement fait plus haut, la réactivité intrinsèque de la matrice k_M est celle du composite de référence. On a donc $k_M = 2.4 \text{ m.s}^{-1}$. On a toujours $D = 7.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. Lors de la simulation, le système représenté doit être suffisamment haut pour que la condition $c = 0$ imposée en bas n'influe pas sur le comportement en proche surface. Sur la figure 7.1, le système et le champ de concentration initial sont représentés. Sur la coupe verticale présentée en bas, on observe que, comme attendu, la décroissance est linéaire dans la partie libre et exponentielle dans la fissure. On vérifie alors que le zéro de concentration est atteint assez loin du bas du système modélisé.

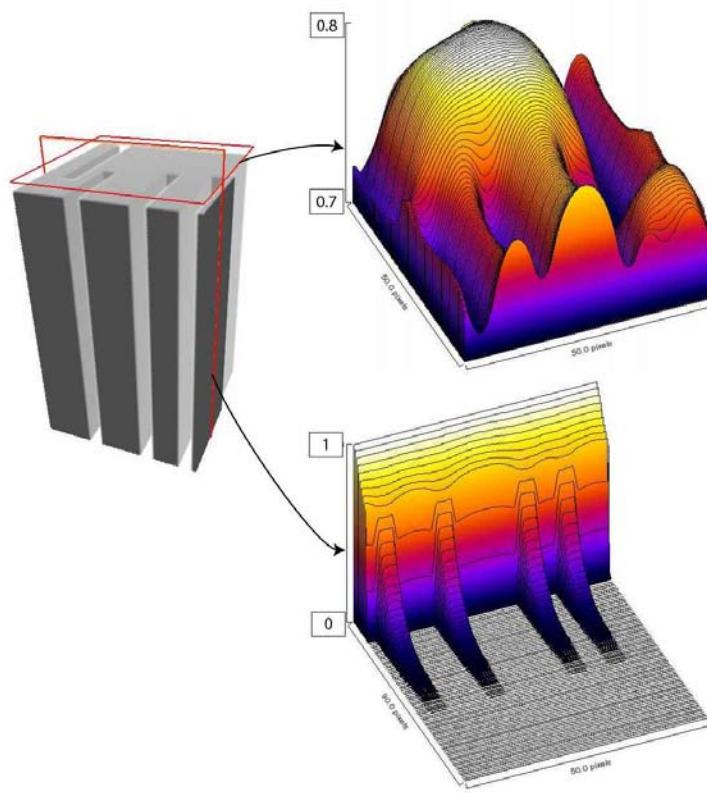


FIG. 7.1 – Modélisation de la matrice poreuse et champ de concentration initial.

On procède alors à la simulation de l'évolution morphologique du système. Le résultat du calcul est présenté sur la figure 7.2. La dernière vignette de la série correspond à la morphologie stationnaire de notre matrice poreuse. Dans le cas d'un milieu poreux, la notion de hauteur moyenne de la surface est mal définie puisqu'il n'y a pas de base. Il est donc préférable d'utiliser la hauteur maximale de la surface, qui est clairement définie, à la fois pour maintenir la hauteur de couche limite durant la simulation mais aussi pour positionner la surface effective. De plus lorsque la surface est très rugueuse, la distance δ qui représente l'impact de la rugosité sur l'écoulement tend vers la hauteur du sommet des rugosités. Ce choix de maximum est donc bien adapté à notre matrice poreuse.

L'évolution de la réactivité effective est donnée figure 7.3. En maintenant la hauteur maximale, la surface recule par rapport à sa position initiale, ainsi le flux diminue au cours du temps. La réactivité effective stationnaire est alors $k_{\text{eff}} = 4.8 \text{ m.s}^{-1}$.

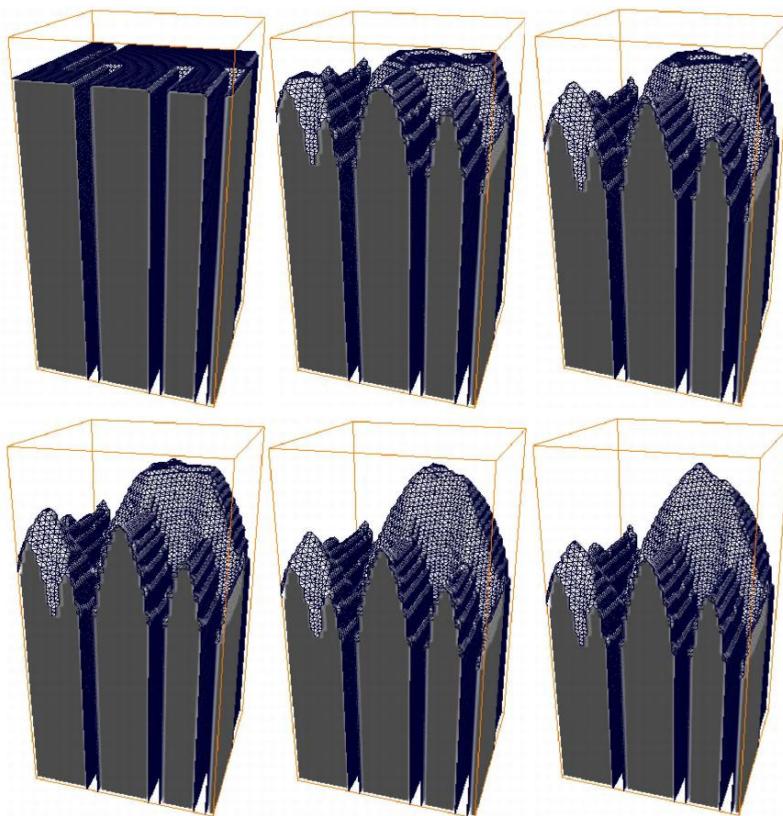


FIG. 7.2 – Évolution de la matrice poreuse dans le cas du composite 4D atypique.

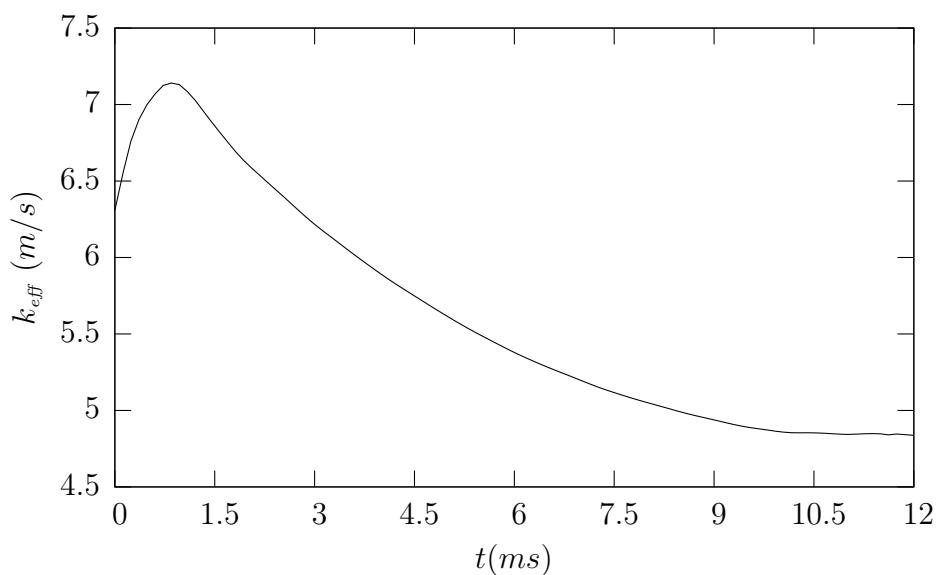


FIG. 7.3 – Évolution de la réactivité effective de la matrice du composite 4D atypique.

7.1.2 Comportement du composite

On souhaite décrire l'évolution du composite à l'échelle mésoscopique. A cette échelle le transfert de masse est dominé par la turbulence. Le champ de concentration a un profil logarithmique. Il n'est pas possible de calculer le champ de vitesse turbulent réel durant l'ablation. Il faut alors utiliser un modèle simplifié.

Le champ de concentration a un profil comme celui présenté figure 7.4. Celui-ci correspond à un coefficient de diffusion turbulente variable dans l'espace. On choisit de la remplacer par un coefficient constant $D^{(t)} = 0.1 \text{ m}^2/\text{s}$. Ce choix ne permet pas de retrouver la concentration à la paroi mais permet de retrouver le gradient à l'échelle des baguettes $l_m = 1 \text{ mm}$.

On peut alors réaliser le calcul dans DiAbl3D avec $k_b = 2.4 \text{ m.s}^{-1}$, $k_M = 4.8 \text{ m.s}^{-1}$, $\Upsilon_b = 6.6 \text{ mol.m}^{-3}$, $\Upsilon_b = 6.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$ et $\Upsilon_M = 7.9 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$. L'évolution du matériau est présentée figure 7.5. Comme attendu, on obtient une morphologie stationnaire représentée sur les deux dernières vignettes de la figure 7.5. Cette morphologie stationnaire est comparée avec l'observation du matériau. On obtient un bon accord qualitatif entre la simulation et l'observation comme illustré figure 7.6.

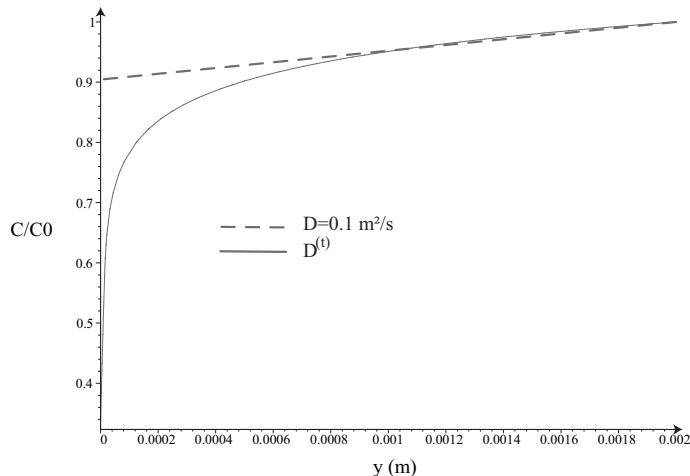


FIG. 7.4 – Champ de concentration simplifié dans le cas de l'étude mésoscopique du composite 4D atypique.

L'évolution de la réactivité effective est donnée figure 7.7. On obtient la réactivité stationnaire $k_{eff} = 6.1 \text{ m/s}$. Cette réactivité est supérieure au maximum des réactivités des constituants. Ceci est en accord avec ce que nous avons montré pour le régime réactif au chapitre 4.1. En effet, en régime réactif, les contrastes de densité jouent le même rôle que les contrastes de réactivité et augmentent les réactivités effectives obtenues. On obtient ainsi un matériau plus de deux fois plus réactif que le matériau de référence. Il faut remarquer que les rugosités obtenus durant le calcul sont de l'ordre de grandeur de la couche limite dynamique. Il est donc difficile de tirer des conclusions par rapport à cette réactivité effective. Ce calcul a néanmoins été l'occasion de montrer l'impact que pouvait avoir une porosité à petite échelle



FIG. 7.5 – Évolution morphologique du composite 4D atypique $k_b = 2.4 \text{ m.s}^{-1}$, $k_M = 4.8 \text{ m.s}^{-1}$, $\Upsilon_b = 6.6 \text{ mol.m}^{-3}$, $\Upsilon_b = 6.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$ et $\Upsilon_M = 7.9 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3.\text{mol}^{-1}$.

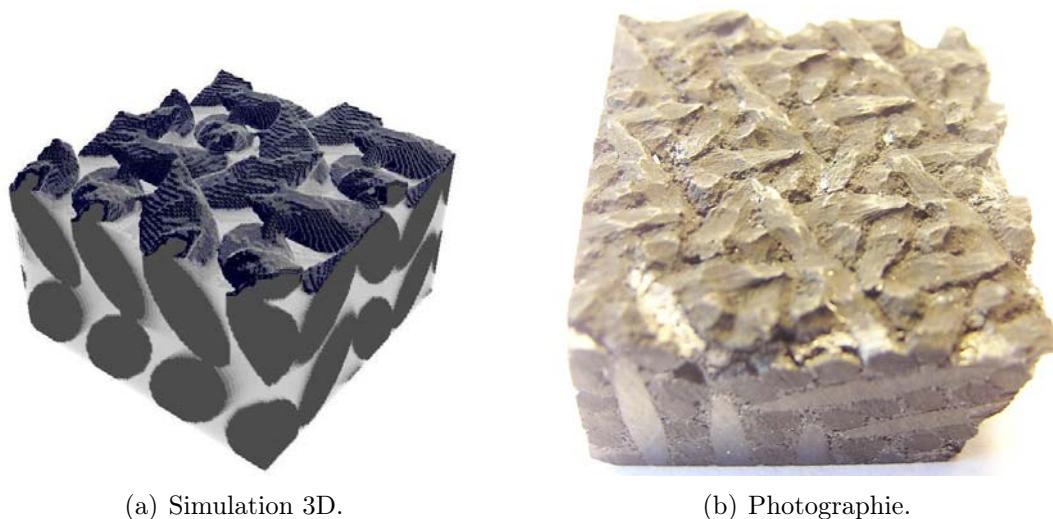


FIG. 7.6 – Comparaison de la reconstruction de la surface à partir de la simulation 3D représentée figure 7.5 avec l'observation.

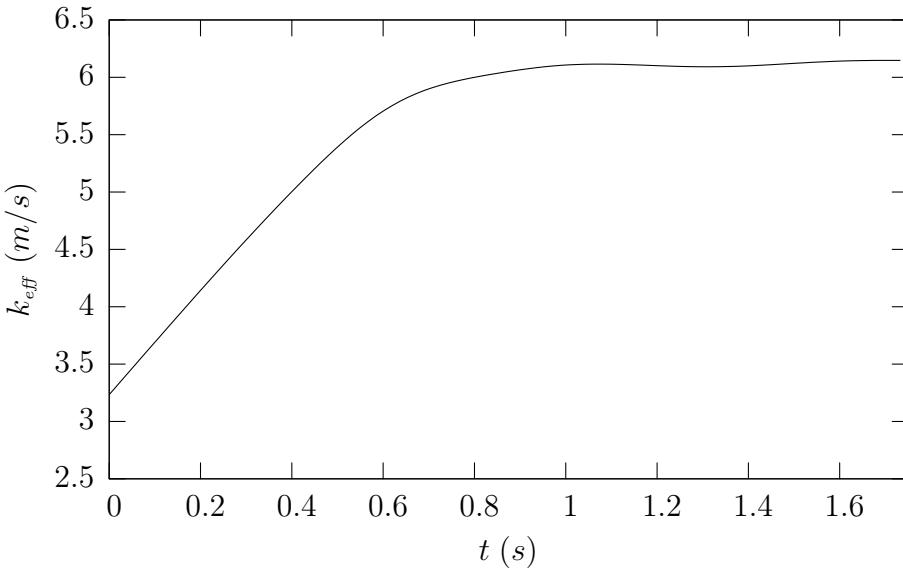


FIG. 7.7 – Évolution de la réactivité effective du composite 4D atypique.

sur le comportement mésoscopique du matériau.

7.2 Comparaison d'architectures tissées

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons observé l'impact d'un défaut d'infiltration sur le comportement effectif du composite. Nos outils peuvent aussi être utilisés pour comparer le comportement de composites différents. En effet, l'un des atouts de DiAbl3D est qu'il permet de comparer le comportement en ablation d'architectures réelles ou virtuelles complexes. Dans cette partie, deux architecture tissées sont comparées en utilisation dans un cas laminaire typique d'oxydation dans un four.

7.2.1 Comparaison des composites

Les matériaux tissés aiguilletés ont une architecture très complexe assez éloignée de la description théorique du motif de tissage. De plus, les dépôts de matrice par voie gazeuse sont loin d'être uniformes. Il est donc difficile de décrire géométriquement un matériau tissé comme nous l'avons fait dans le cas du 4D. Il est cependant possible d'obtenir une représentation 3D fidèle du matériau par micro-tomographie par absorption de rayons X. Ce procédé permet de restituer la morphologie du composite mais aussi sa composition, chaque phase ayant un comportement absorbant distinct (Coindreau et al., 2003). Les tomographies misent à notre disposition, son de résolution moyenne avec une taille de pixel de $20\ \mu m^3$. Cette échelle permet de bien distinguer les fils et la matrice qui les entoure. Dans les deux tomographies, un sous-domaine de $2 \times 6\ mm$ est extrait. Ce sous domaine est choisi au cœur des échantillons pour éviter les effets de bords du au procédé tomographique. Une

échelle supérieure à 1 mm permet de représenter un nombre significatif de fils.

Le matériau A présenté figure 7.8 est un matériau tissé de porosité moyenne $\epsilon_A = 10.4\%$ avec un taux de matrice identifié à $\phi_M = 13\%$. Le matériau B présenté figure 7.9 est un matériau nappé de porosité moyenne $\epsilon_B = 9.7\%$ avec un taux de matrice $\phi_M = 12\%$. Le code DiAbl3D permet de calculer les diffusivités effectives liées à chacun des matériaux dans la direction d'aiguillatage. Nous obtenons alors les tortuosités $\eta_i = \epsilon \frac{D_{eff}}{D}$ suivantes : $\eta_A = 15$ et $\eta_B = 26$. Ces résultats sont en accord avec les travaux de Tomadakis and Sortichos (1991) sur le régime de diffusion ordinaire pour des matériaux fibreux à structure 3D.

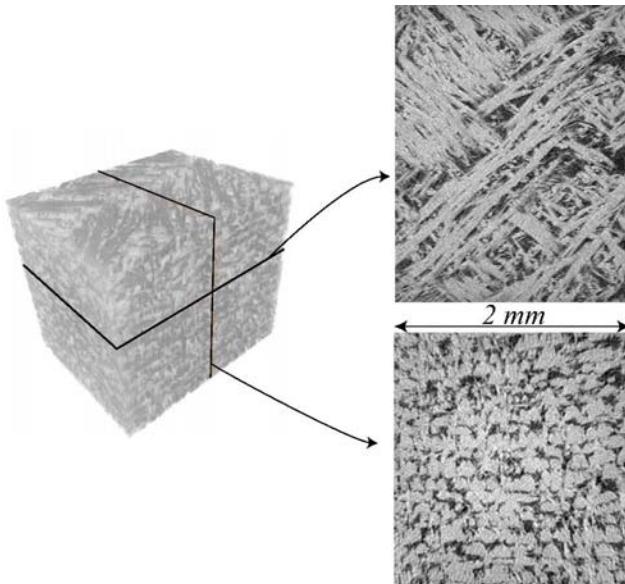


FIG. 7.8 – Tomographie du matériau A.

7.2.2 Comportement ablatif

On souhaite comparer le comportement en ablation de nos deux architectures. Pour cela nous réalisons la simulation numérique d'un essai d'oxydation dans un four. Dans ce cas l'écoulement est laminaire. Pour que l'écoulement reste laminaire, il faut que le nombre de Reynolds à l'échelle du four soit modéré. L'échelle du four est le décimètre. Le nombre de Reynolds à l'échelle mésoscopique est donc cent fois plus petit. Ce nombre est alors suffisamment petit pour que les effets convectifs influent sur la réactivité du matériau. On suppose que notre four fictif n'est pas limité en température. On réalise donc nos simulations à trois températures, $T = 1850, 2300, 3000 K$. La pression totale est fixée à $p = 1 atm$. A ces températures le coefficient de diffusion D est alors respectivement $D = 3.5 \cdot 10^{-4}, 5.0$ et $7.8 \text{ } m^2.s^{-1}$. Dans les deux cas le but est de comparer les architectures. Les propriétés des fils et de la matrice qui les entourent seront identiques entre A et B. Pour les matériaux tissés, l'approche que nous avons développée au chapitre précédent ne peut être utilisée car le matériau est inhomogène à cette échelle. Les fils du matériau tissé

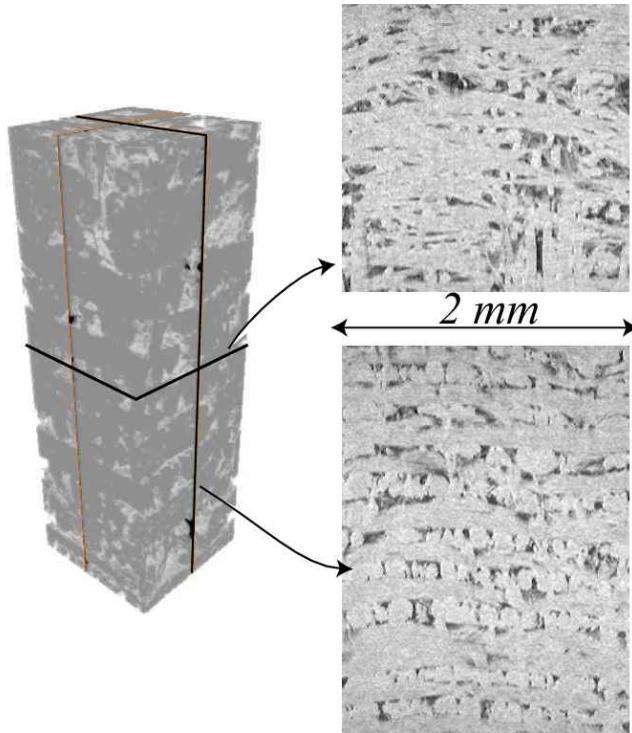


FIG. 7.9 – Tomographie du matériau B

sont cependant connus pour être significativement plus réactifs que les baguettes. On estime une réactivité des fils à $k_F = 5. m.s^{-1}$ à $3000 K$. D'après les observations figure 1.17 , on sait que la matrice est plus réactive que les fils. On suppose ici que, dans les deux matériaux, la matrice est deux fois plus réactive que les fils. D'après l'énergie d'activation identifiées à $E_a = 40 \text{ kcal.mol}^{-1}.K^{-1}$, on a : $k_F(T) = \{0.052, 0.54, 5\} m.s^{-1}$. L'échelle du matériau est le millimètre. Le Damköhler définit par rapport au fil est alors : $Da = 0.15, 1.1, 7$. On couvre donc plusieurs types de régimes dans cette gamme de température. On attend ainsi des écarts importants dans le comportement des composites entre les températures. La simulation porte sur la consommation complète de $2 mm$ de matériau.

Les figures 7.10 et 7.11 comparent les morphologies obtenues pour les matériaux A et B lorsque le matériau a reculé de $0.5 mm$. On observe que pour $T = 3000 K$ les composites restent quasiment lisses alors que pour $T = 1850 K$, les composites présentent une rugosité importante. Ceci est dû au fait que, à basse température, l'oxydant pénètre plus profondément dans le matériau. On définit le front d'ablation comme étant la surface où $\frac{c}{C_0} = 10^{-3}$. Les fronts correspondant aux images présentées par la figure 7.11 sont donnés figure 7.12.

On mesure que les fronts relatifs à la température $T = 3000 K$ ont une épaisseur maximale de $0.4 mm$ pour A et B alors que pour $T = 1850 K$, ils ont une épaisseur maximale de $1.1 mm$ pour A et $0.7 mm$ pour B. Si ce ratio est conservé tout au long de l'ablation, la récession à $T = 1850 K$ de A sera plus rapide que celle de B. Les vitesses de récession moyennes V_a/p_{ox} sont données tableau 7.1.

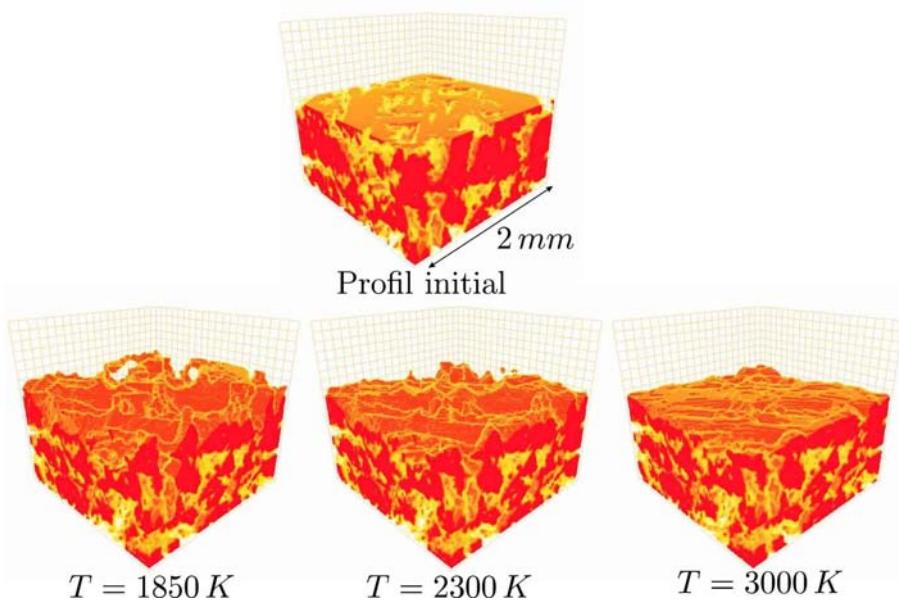


FIG. 7.10 – Morphologie initiale du matériau A et morphologie après 0.5 mm de recul moyen.

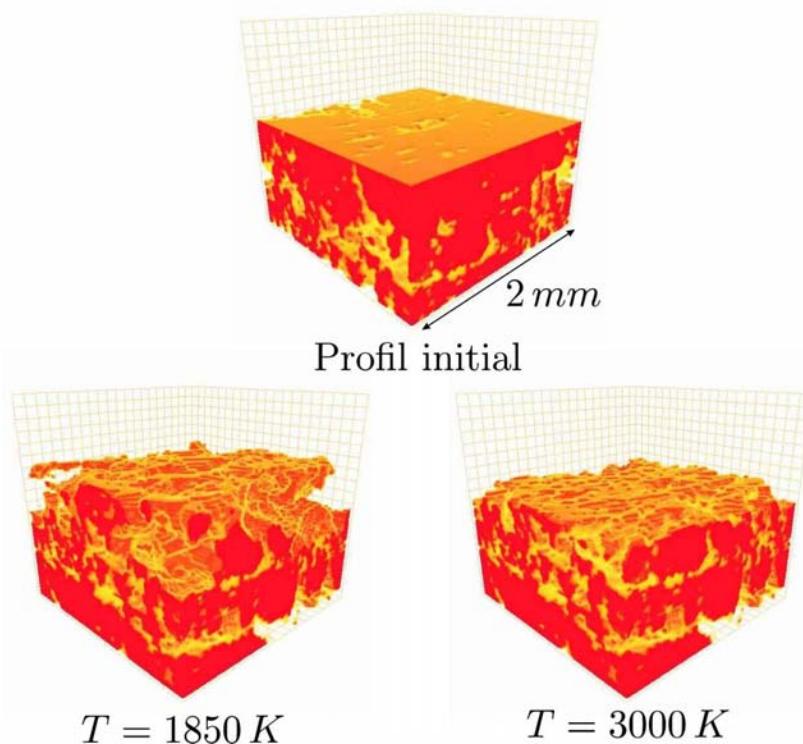


FIG. 7.11 – Morphologie initiale du matériau B et morphologie après 0.5 mm de recul moyen.

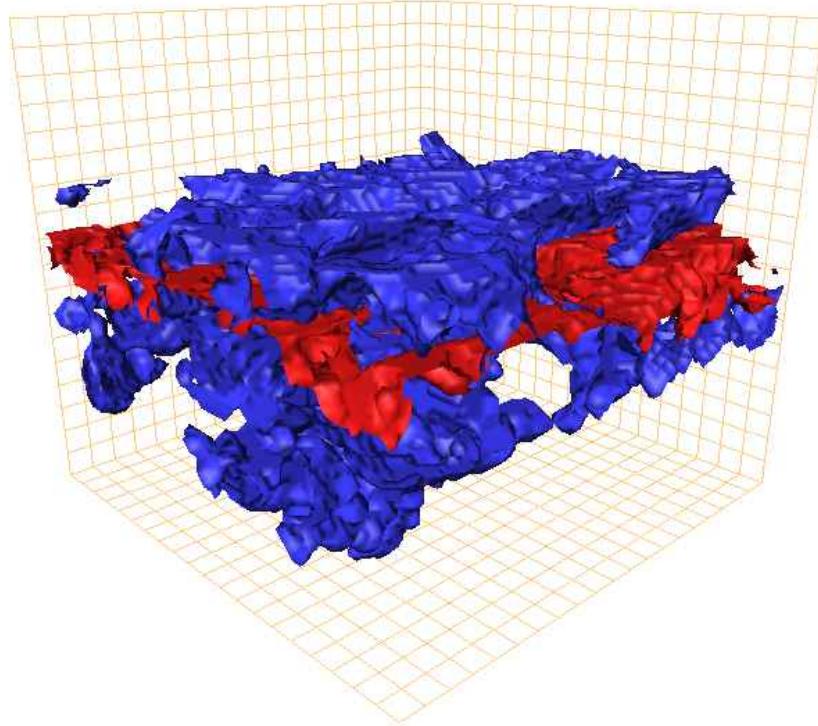


FIG. 7.12 – Isosurface $\frac{c}{C_0} = 10^{-3}$ pour le matériau B après 0.5 mm de recul pour $T = 1850\text{ K}$ (bleu) et $T = 3000\text{ K}$ (rouge).

$T\text{ (K)}$	Vitesse moyenne $V_a/p_{ox}\text{ (mm/s/atm)}$		
	Matériau A	Matériau B	Rapport des vitesses A/B
1850	0.41	0.336	1.24
2300	0.94	— — —	
3000	1.5	1.5	1.02

TAB. 7.1 – Vitesse de récession moyenne pour un recul moyen de 2 mm .

On observe que contrairement à ce que les réactivités associées permettaient d'attendre, la variation de température influe peu sur la vitesse de récession. En effet, entre $T = 1850\text{ K}$ et $T = 3000\text{ K}$, à concentration C_0 fixée, les flux consommés augmentent avec la température. Mais à pression fixée, la concentration décroît en $\frac{1}{T}$. Combiné avec la réduction de l'épaisseur du front, il y a donc peu d'impact sur la réactivité. On note que pour toutes les températures le composite A recule plus vite que le B mais que cette différence décroît avec la température. Ceci est dû au fait que plus la température est haute et moins la structure de l'espace poral influence la vitesse de récession. Les pores ont une longueur caractéristique égale à $50\mu\text{m}$. Ils sont donc en limitation diffusive pour $T = 3000\text{ K}$. Ainsi la réaction se cantonne à

un front très fin. À haute température, pour un matériau homogène mais poreux, seule importe la fraction de la surface occupée par les pores, c'est à dire la porosité moyenne et non la structure des pores. Il est donc normal de trouver un écart de l'ordre de $\frac{\epsilon_A}{\epsilon_B}$ pour $T = 3000 K$.

Si on se réfère au données de la figure 1.3, la vitesse de récession à $3000 K$ est dans la norme. Ce sont donc bien les vitesses à plus basses températures qui sont très importantes à cause de la porosité du composite. Ainsi, on observe que des composites tissés sont protégés par leur pores à haute température puisqu'ils constituent des îlots de réactivité nulle. À plus basse température, les pores représentent au contraire des puits de matière importants. De plus, ils amènent à une dégradation en profondeur du matériau ce qui réduit sensiblement ces qualités mécaniques. Les calculs que nous avons effectués montrent que le front ablatif est limité à une zone proche de la surface. Le milieu poreux se comporte simplement comme une surface rugueuse particulière. Dans le cas contraire, c'est à dire si le champ de concentration pénètre profondément dans le milieu poreux, on se rapproche de la situation étudiée par Valdes-Parada et al. (2006). Dans ces travaux, on considère la condition à la limite entre une couche fluide et un milieu poreux dans le cas de transport réactif, *hors mécanisme d'ablation*. Deux aspects doivent être traités : le comportement effectif du milieu poreux, et la condition de raccordement entre les équations de transport côté fluide et côté poreux. Le traitement en ablation d'un tel cas dépasse les objectifs de la thèse. Il est probable que ce cas ne soit d'ailleurs pas pertinent dans le contexte des couches de protection ablatives, pour lesquelles il n'y a pas d'intérêt à voir le champ de concentration pénétrer profondément dans le milieu.

7.3 Conclusion

Dans ce chapitre, l'ablation à l'échelle mésoscopique a été abordée. Dans un premier temps nous avons pu observer qualitativement l'impact que peut avoir une mauvaise infiltration sur le comportement global du composite. Cette étude montre bien que le comportement d'un composite est tout d'abord influencé par le caractère uniforme de ses constituants plus que par leur résistance intrinsèque. Nous avons ensuite pu illustrer l'impact de la présence de pores sur la récession d'un matériau tissé en fonction de la température. Nous avons pu observer dans un cas de diffusion ordinaire que, à haute température la tortuosité du matériau influe peu puisque l'ablation reste surfacique. Par contre lorsque la température diminue, l'ablation se déroule sur un front plus grand causant une dégradation en profondeur du matériau. Ces études permettent d'apporter des réponses à un certain nombre de problèmes industriels. Il faut cependant reconnaître que dans l'application tuyère, nos travaux sont limités par la complexité apportée par la turbulence à cette échelle.

Conclusion Générale

Cette étude visait à apporter, par la modélisation et la simulation, une meilleure compréhension du rôle des hétérogénéités dans le comportement ablatif des composites C/C. La complexité intervenant dans l'ablation ne nous a pas permis de réaliser un modèle global intégrant tous les phénomènes et couplages. Une part importante de ce travail a été donc consacrée à la mise en place de plusieurs modèles d'ablation qui permettent chacun d'apporter une part de réponse au problème global.

Le premier modèle d'ablation que nous avons étudié est celui d'une surface non uniforme non récessive surmontée par un écoulement laminaire. Dans un premier temps, le cas d'une surface lisse a été résolu par l'utilisation des méthodes de prise de moyenne volumique. Le résultat obtenu par Wood et al. (2000) en diffusion pure a été étendu à un problème de diffusion-convection avec un contraste de réactivité fini entre les phases. Nous avons alors obtenu une hiérarchie des effets des couplages sur la réactivité effective. Ainsi, lorsque le nombre de Damköhler est grand ou petit devant l'unité, les nombres de Péclet et Reynolds n'ont pas d'influence sur la réactivité effective. Pour que l'écoulement influe sur la réactivité, il faut une double condition : $Da = O(10)$ et $Pe > 100$. Si une de ces conditions n'est pas satisfaite, la surface lisse se comporte comme en diffusion pure. Dans un second temps, l'étude s'est portée sur l'homogénéisation de surfaces rugueuses non-récessives. Une méthode pour le calcul du milieu effectif vis-à-vis de la vitesse a été mise au point. On a pu montrer qu'une procédure simple permet de remplacer une paroi rugueuse par une paroi lisse tout en assurant la conservation des propriétés moyennes de l'écoulement. Le problème d'homogénéisation du champ de concentration a été traité par simulation numérique directe. Ces calculs ont permis de confirmer le faible impact du nombre de Péclet sur la réactivité effective lorsque l'écoulement est laminaire.

Un second modèle a été développé ensuite pour étudier l'impact de la récession sur le comportement effectif de la paroi. Sur ce modèle plusieurs sous-modèles de complexité croissante ont été bâtis. Un premier sous-modèle d'ablation en régime réactif a permis de démontrer que dans ce régime, la réactivité effective de la paroi est celle du composant le plus réactif. Un second sous-modèle d'ablation sous flux 1D a permis de retrouver le résultat précédent et de démontrer qu'en régime diffusif la réactivité effective de la paroi est donnée par la moyenne harmonique des réactivités. Enfin, l'implantation informatique du modèle récessif a fait l'objet d'un développement important. L'outil ainsi mis au point a été validé par rapport aux observations précédentes.

L'application du modèle de surface récessive au cas des composites C/C pour

les cols de tuyères a permis l'évaluation des réactivités des composants élémentaires des baguettes d'un des matériaux de référence. A l'échelle millimétrique, nos travaux sont limités par l'impact de la diffusion turbulente sur le transfert de masse. En effet le calcul couplé de l'évolution du solide et de l'écoulement turbulent est un travail qui dépasse le cadre de ce travail. Nous avons cependant pu montrer, en utilisant un modèle simplifié de transport, l'impact des défauts de petite échelle sur le comportement mésoscopique du matériau. Dans le cas laminaire, on a aussi fait la démonstration du comportement récessif non-trivial des matériaux tissés. Ce calcul a permis de comparer deux composites d'architecture différente. Ce calcul comparatif montre que DiAbl3D constitue un outil original au service de la conception de composite. Il offre en effet la possibilité de comparer le comportement ablatif d'architectures réelle ou fictives.

On retiendra de cette étude que :

- Une surface non-récessive est toujours moins réactive que la moyenne de sa réactivité $\langle k \rangle$.
- Une surface récessive est toujours plus réactive que la surface non-récessive équivalente.
- En régime contrôlé par la réaction, les réactivités effectives $k_{\text{eff}} = \langle k \rangle$ pour les surfaces non-récessives indépendamment du Pe et $k_{\text{eff}} = \max(k)$ pour les surfaces récessives stationnaires.
- En régime contrôlé par la diffusion, les surfaces de densité uniforme initialement lisses, restent lisses et leur réactivité effective est alors égale à la moyenne harmonique quel que soit le Pe .

Du point de vue des applications industrielles, cette étude représente plusieurs avancées notables. Tout d'abord, d'un point de vue calcul, la méthode que nous avons développé pour les parois rugueuses non-récessives est une méthode facile à mettre en place. Elle permet de calculer beaucoup plus simplement et rapidement que par approche directe des écoulements laminaires au-dessus de surfaces rugueuses réactives. De même, dans le cas des surfaces récessives, les outils développés fournissent simplement les réactivités effectives de matériaux d'architecture complexe. Ensuite, d'un point de vue conception, l'étude des surfaces récessives a montré l'importance des phases les plus réactives dans le comportement global du composite. Cet aspect était jusque là sous-estimé. Ce nouvel éclairage doit pousser les concepteurs à étudier plus précisément des phases peu présentes mais très réactives qui étaient jusque là négligées.

Les perspectives liées à cette étude sont nombreuses. Tout d'abord, nous pouvons donner celles qui ne nécessitent pas le développement de nouveaux modèles. Ainsi, une grande partie des géométries types du milieu hétérogène n'ont pas été explorées. Comme nous l'avons illustré au chapitre 5, nous n'avons étudié en détail qu'une géométrie simple pour le composite. De plus, notre application porte sur des matériaux de densité proche et composés du même élément. L'impact des gradients de densité n'a donc pas fait l'objet d'une attention particulière. Du côté applications, la méthode d'identification des réactivités devrait être étendue à d'autres matériaux en vue d'une validation et de la mise au point d'une procédure normalisée.

7.3 Conclusion

D'un point de vue de la modélisation, un grand nombre de progrès restent à accomplir. Le premier point de développement serait l'implantation d'un écoulement laminaire dans DiAbl3D . Ceci permettrait d'étudier le couplage entre l'écoulement et la récession. Un second développement serait le couplage fort du calcul de récession avec un calcul de l'écoulement turbulent par simulation numérique directe. Ce couplage permettrait de mettre en place un calcul mixte en échelles avec un calcul à l'échelle de la tuyère où en un certain nombre de points un calcul à l'échelle de l'architecture du composite serait effectué.

Annexes et Bibliographie

Annexe A

Simulation de l'ablation sous flux 1D

Au chapitre 4.2 p.98, nous avons étudié analytiquement le recul d'une paroi homogène sous un flux 1D. On se propose ici, dans un premier temps, de décrire le lien entre le déplacement eulérien et lagrangien de l'interface. Dans un second temps, un algorithme est bâti pour permettre la simulation de l'évolution de telles surfaces.

A.1 Description transitoire

Nous avons obtenu une équation d'évolution pour \mathcal{S} (équation 4.28) L'évolution de la surface peut alors être calculée par intégration directe de celle-ci. Cependant, cette équation a été obtenue pour une surface régulière. L'expérience montre que les surfaces ablatées ne satisfont pas toujours ce critère.

A.1.1 Évolution de chaque point de la surface

La vitesse normale \underline{v} de l'interface s'écrit :

$$\underline{v} = -(\Upsilon k c(h)) \underline{n} = -q \underline{n} \quad (\text{A.1})$$

avec

$$c(h) = \frac{C_0}{1 + \frac{h}{\mathcal{L}} \sqrt{1 + (\partial_r h)^2}}$$

Pour alléger les notations, nous notons $v_0 = \Upsilon k C_0$ et ϑ l'angle entre \underline{n} et $\underline{e_z}$.

On a alors :

$$q = \frac{v_0}{1 + \frac{h}{\mathcal{L} \cos \vartheta}}$$

Comme nous l'avons dit, \underline{v} est la vitesse normale de la surface, mais comme nous allons le voir avec deux approches différentes et néanmoins équivalentes, pour un point M de la surface, nous avons :

$$\partial_t \underline{OM} \neq \underline{v} \quad (\text{A.2})$$

Transformation en système de Hamilton-Jacobi

Nous avons :

$$\partial_t S + \underline{v} \cdot \nabla S = 0 \quad (\text{A.3})$$

ce qui peut être réécrit :

$$\partial_t S + q \underline{n} \cdot |\nabla S| \underline{n} = \partial_t S + q |\nabla S| = 0 \quad (\text{A.4})$$

Nous avons alors une équation d'Hamilton-Jacobi. Si on suppose que \underline{v} est différentiable, avec $\mathcal{H} = q |\nabla S|$, nous obtenons le système de caractéristiques associé :

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_{x_i} S)} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{d(\partial_{x_i} S)}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \quad (\text{A.6})$$

avec $x_i = x, y, z$.

Nous pouvons faire quelques manipulations pour obtenir une forme vectorielle de l'équation A.5. En introduisant $\mathcal{W} = (\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt})$, nous obtenons alors :

$$\mathcal{W} = (\underline{n} \cdot \underline{n}) \nabla_n q - (\nabla_n q \cdot \underline{n}) \underline{n} + \underline{v} \quad (\text{A.7})$$

$$= (\underline{n} \wedge \nabla_n q) \wedge \underline{n} + \underline{v} \quad (\text{A.8})$$

avec $\nabla_n|_i = \frac{d}{d \nabla_n|_i}$.

La vitesse \mathcal{W} est la vitesse eulérienne en un point de l'interface. La vitesse \underline{v} qui est la vitesse lagrangienne serait la vitesse d'un élément catalytique déposé à la surface. Dans le cas général ces deux vitesses sont différentes. On retrouve $\mathcal{W} = \underline{v}$ si q est isotrope. Ce qui est le cas pour l'application classique à la propagation d'ondes électromagnétiques dans le vide.

Pour illustrer le calcul, on se place dans le cas 2D. Dans notre application, avec $\underline{n} = (\sin(\vartheta), \cos(\vartheta))$, on obtient :

$$\begin{cases} \mathcal{W}_x = q \sin(\vartheta) + \partial_\vartheta q \cdot \cos(\vartheta) \\ \mathcal{W}_z = q \cos(\vartheta) - \partial_\vartheta q \cdot \sin(\vartheta) \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

ce qui donne en utilisant la définition de q :

$$\begin{cases} \mathcal{W}_x = -v_0 \frac{\cos(\vartheta)^2 \sin(\vartheta)}{\left(\cos(\vartheta) + \frac{h}{L}\right)^2} \\ \mathcal{W}_z = -v_0 \frac{\cos(\vartheta)^3 + \frac{h}{L}}{\left(\cos(\vartheta) + \frac{h}{L}\right)^2} \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Approche géométrique

Nous prenons un point O de la surface comme origine. Si O est régulier, \mathcal{S} peut être localement assimilée à sa tangente. Avec ϑ comme paramètre normal, la tangente à l'équation suivante :

$$x \sin(\vartheta) + y \cos(\vartheta) = 0 \quad (\text{A.11})$$

après un temps δt , la nouvelle surface sera :

$$x \sin(\vartheta) + y \cos(\vartheta) = q(\vartheta) \delta t \quad (\text{A.12})$$

Si nous considérons maintenant la surface comme une perturbation locale du plan tangent. Après un temps δt , la nouvelle surface obéira à :

$$\begin{cases} a(\vartheta)x + b(\vartheta)y + c(\vartheta) = 0 \\ a(\vartheta\partial\vartheta)x + b(\vartheta\partial\vartheta)y + c(\vartheta + \partial\vartheta) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

avec $a = \sin$, $b = \cos$, $c = -q\delta t$. En développant la perturbation au premier ordre, nous obtenons :

$$\begin{cases} a(\vartheta)x + b(\vartheta)y + c(\vartheta) = 0 \\ a'(\vartheta)x + b'(\vartheta)y + c'(\vartheta) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

Ce système est celui définissant l'enveloppe d'une famille de droites définies par l'équation A.12. Le déterminant du système est :

$$\Delta = a(\vartheta)b'(\vartheta) - b(\vartheta)a'(\vartheta) = -\sin(\vartheta)^2 - \cos(\vartheta)^2 = -1 \quad (\text{A.15})$$

Nous avons donc pour toute valeur de ϑ , une unique solution donnée par :

$$\begin{cases} \mathcal{W}_x = \frac{1}{\delta t} \cdot \frac{b(\vartheta)c'(\vartheta) - c(\vartheta)b'(\vartheta)}{\Delta} = q \sin(\vartheta) + \frac{\partial q}{\partial \vartheta} \cos(\vartheta) \\ \mathcal{W}_z = \frac{1}{\delta t} \cdot \frac{c(\vartheta)a'(\vartheta) - a(\vartheta)c'(\vartheta)}{\Delta} = q \cos(\vartheta) - \frac{\partial q}{\partial \vartheta} \sin(\vartheta) \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

Nous retrouvons ici l'expression donnée en A.9.

On note que $\Gamma_{\mathcal{W}}$, le graphe de \mathcal{W} présente trois singularités. Une en bas pour $\vartheta = \pm \frac{\pi}{2}$, les autres sont les ϑ_0 solutions de :

$$\cos^3 \vartheta_0 - 2 \frac{h}{\mathcal{L}} + 3 \frac{h}{\mathcal{L}} \cos^2 \vartheta_0 = 0 \quad (\text{A.17})$$

Le graphe $\vartheta_0 = f(\frac{h}{\mathcal{L}})$ est donné par la figure A.2. On voit que ϑ_0 appartient à l'intervalle $[\vartheta_{lim}; \pi/2]$ avec $\vartheta_{lim} = \arccos(\sqrt{2}/3) \approx 35^\circ 44'$.

A.1.2 Application du principe de Huygens à l'évolution de singularités

Pour obtenir les équations pour la vitesse \mathcal{W} , nous avons supposé que S était différentiable. Pour dépasser cette restriction a modèle a été développé (Katardjiev, 1989a), basé sur le principe de Huygens de propagation des fronts d'onde.

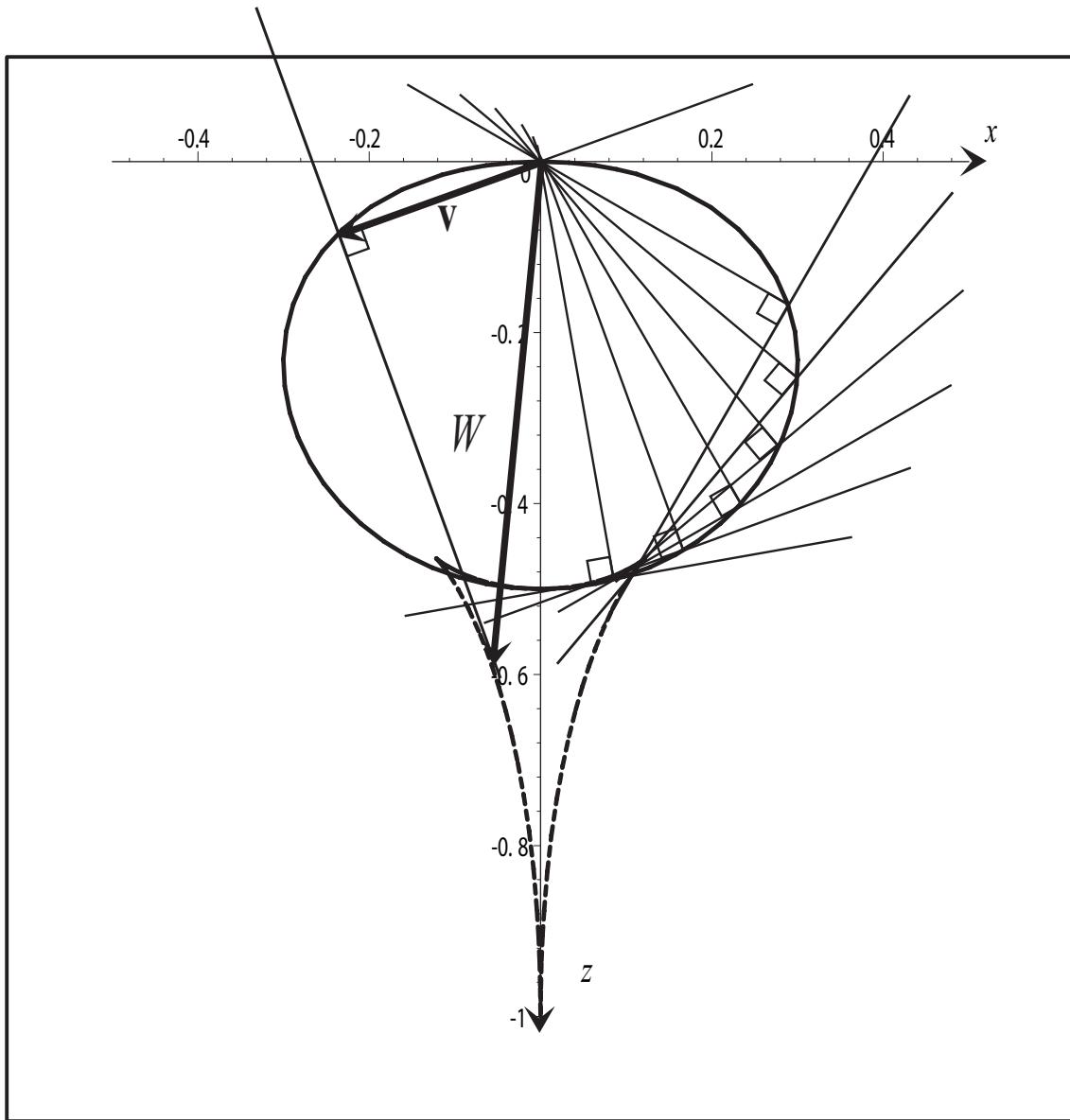


FIG. A.1 – Représentation paramétrique de v et \mathcal{W} avec $h/\mathcal{L} = 2$.

Description

Le principe de cette approche a été décrit en détails dans Katardjiev (1989a) et Katardjiev (1989b). Par analogie avec la propagation d'ondes électromagnétiques, la surface est assimilée à un front d'onde. Nous postulons que chaque point du front d'onde est la source d'une onde secondaire appelée ondelette de Huygens. L'évolution du front est alors obtenu par la recherche de l'enveloppe commune aux ondelettes. Dans notre cas les ondelettes n'ont pas de fréquence (ou une infinie). Il n'y a donc pas de phénomène d'interférences comme dans l'application aux ondes électromagnétiques. Maintenant, nous définissons notre ondelette de Huygens. En poursuivant

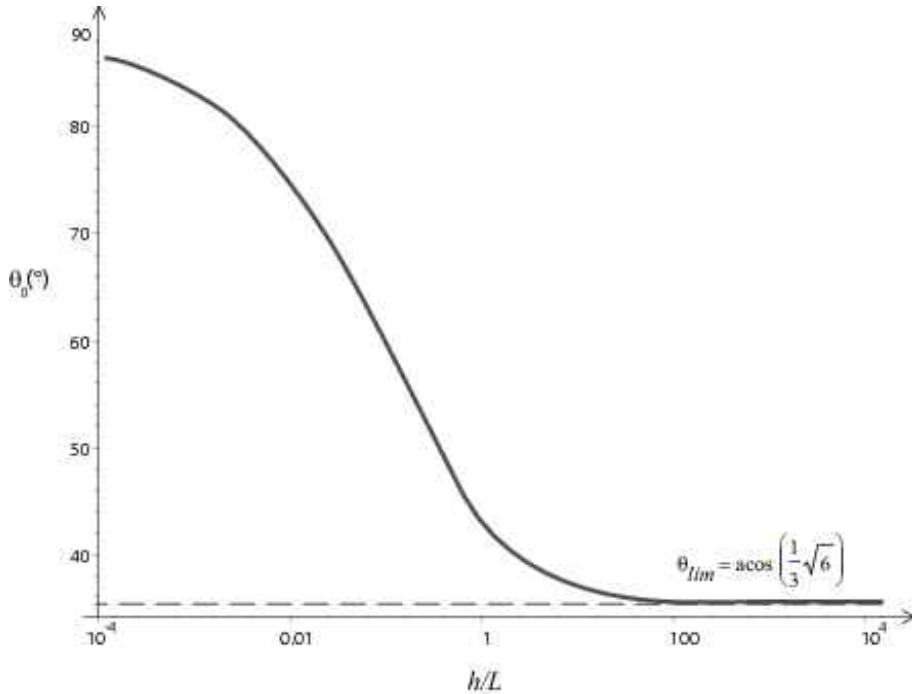


FIG. A.2 – Angle ϑ_0 en fonction de $\frac{h}{L}$.

l'analogie, on définit l'ondelette comme étant un front d'onde élémentaire formé par tous les points pouvant être atteint par la source après un incrément de temps δt . Cette définition est équivalente à celle que nous avons utilisée dans la partie A.1.1. L'ondelette de Huygens est alors le lieu des points définis par l'équation vectorielle A.8.

La nouvelle surface est l'enveloppe des ondelettes produites par chacun des points. Un exemple de construction est donné sur la figure A.3. Bien que la construction figurée en A.3 soit facilement compréhensible, il est difficile de trouver une expression analytique du nouveau front. Nous utiliserons donc une surface discrétisée et nous rechercherons la nouvelle position de chaque point pour reconstruire le front d'onde.

Évolution des singularités

Une surface discrétisée est formée par un ensemble de points singuliers. Les points réguliers sont vus ici comme le cas particulier où l'angle avec la normale à gauche et à droite (respectivement ϑ_- et ϑ_+ sont égaux).

Il est possible de classer les points singuliers en fonction de leur morphologie et donc de leur évolution. Une classification est présentée sur la table A.1.2 et le comportement associé est donné par la figure A.4.

Dans cette partie le terme de stabilité appliqué à une singularité signifie qu'après évolution on retrouve le même type de singularité.

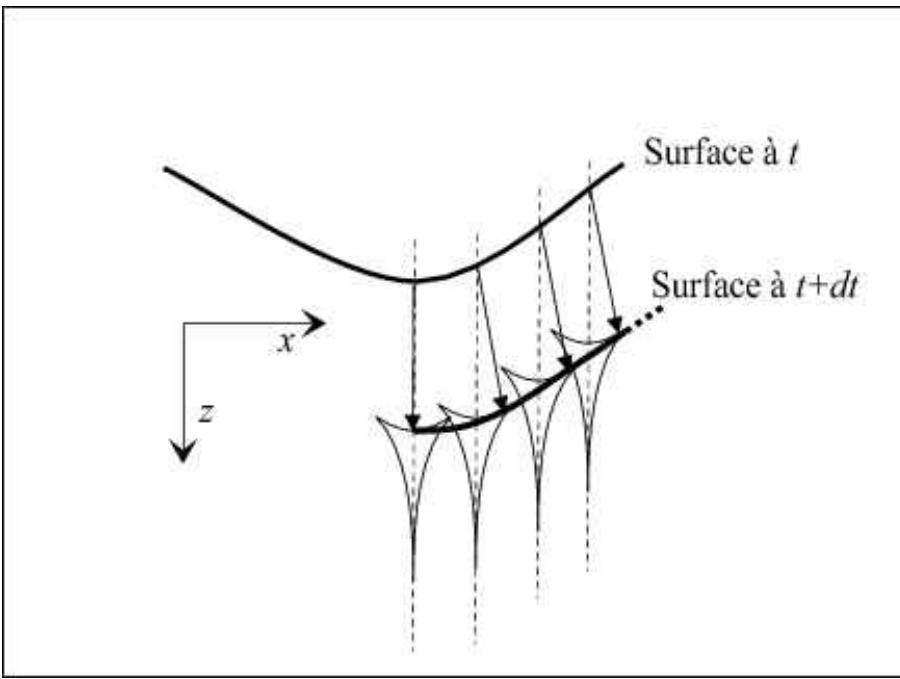


FIG. A.3 – Exemple de reconstruction d'une surface évoluée par la méthode de Huygens.

A ce critère, il faut ajouter le critère de symétrie vu plus haut.

Type	Courbure	Description	Evolution
Type I	Concave	$\vartheta > \vartheta_0$ de chaque côté	Instable
Type II	Concave	$\vartheta < \vartheta_0$ de chaque côté	Instable : relaxation
Type III	Concave	$\vartheta > \vartheta_0$ d'un seul côté	Stable
Type IV	Convexe	Toutes les valeurs de ϑ	Stable

TAB. A.1 – Classification des singularités et Comportement évolutif.

Il faut maintenant se rappeler que notre expression des ondelettes a été obtenue dans l'approximation verticale du flux. Sous cette hypothèse, une surface de forte courbure n'a pas de sens.

A.2 Simulations Numériques

L'algorithme de construction de la surface est construit comme suit :

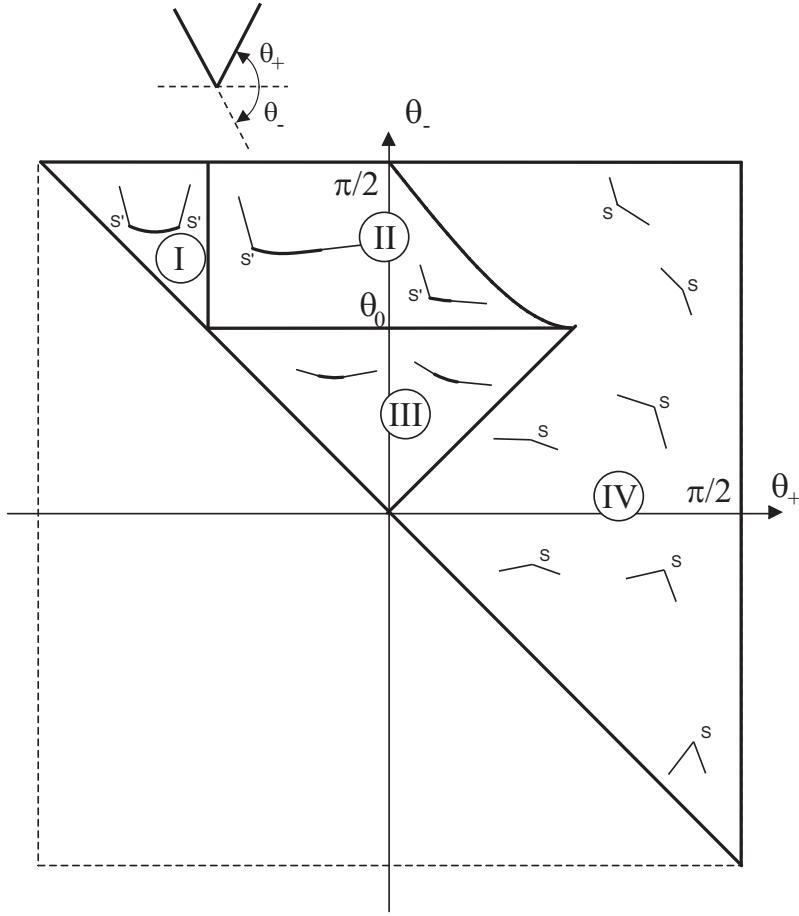


FIG. A.4 – Évolution des différentes singularités.

Étape 1 : Discrétisation

La première étape de la simulation est la discrétisation de la surface initiale. Nous choisissons un incrément d'espace régulier δx . Soit (i, j) les variables discrètes correspondant à (x, t) . Nous obtenons par discrétisation une famille de points $O_i^j = (x_i^j, z_i^j)$. On associe à chaque segment $[O_{i-1}^j, O_i^j]$, ϑ_i^j , l'angle entre la normale et l'axe vertical.

Étape 2 : Évolution des segments adjacents

Au pas de temps j , le point $O(i, j)$ est entouré de deux segments. Nous les notons $\Sigma_{i,j}$ et $\Sigma_{i+1,j}$. Comme nous l'avons déjà vu, leur image évoluée obéira aux équations suivantes :

$$(\Sigma_{i,j}) : \sin(\vartheta_i)x + \cos(\vartheta_i)z - c_1 = \mathcal{W}_n(\vartheta_i).\delta t \quad (\text{A.18})$$

$$(\Sigma_{i+1,j}) : \sin(\vartheta_{i+1})x + \cos(\vartheta_{i+1})z - c_2 = \mathcal{W}_n(\vartheta_{i+1}).\delta t \quad (\text{A.19})$$

où $\mathcal{W}_n = \underline{\mathcal{W}}.n$, $c_1 = \sin(\vartheta_i)x_i^j + \cos(\vartheta_i)z_i^j$, $c_2 = \sin(\vartheta_{i+1})x_i^j + \cos(\vartheta_{i+1})z_i^j$.

L'évolution d'un coin convexe est donné par la simple intersection des segments évolués.

Pour un coin concave, l'évolution est donné par l'intersection des segments évolués et le lieu des points définis par $\underline{\mathcal{W}}$.

Étape 3 :Reconstruction Une fois que nous avons fait évolué la surface, il faut choisir un nouveau point $O(i, j + 1)$ pour la représenter. Pour conserver la distance entre les points, nous prenons $x_i^j = x_i$.

Avec un tel choix, nous obtenons :

- Pour un coin convexe :
- – Si $\vartheta_i^j < \vartheta_{i+1}^j$, z_i^{j+1} est donné par l'équation A.18 avec $x = x_i$;
- – Si $\vartheta_i^j > \vartheta_{i+1}^j$, z_i^{j+1} est donné par l'équation A.19 avec $x = x_i$;
- pour un coin concave : $z_i^{j+1} = \mathcal{W}_z(\vartheta = 0)$;

Résultats et analyse

Une première simulation nous a permis de vérifier le caractère stationnaire d'une surface formée par des arcs de cercle de rayon \mathcal{L} . Le résultat est présenté sur la figure A.5.

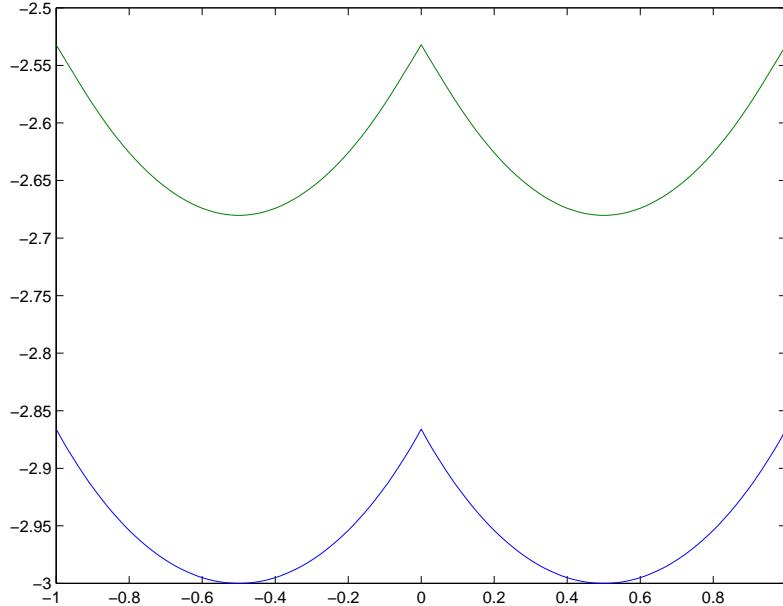


FIG. A.5 – Évolution d'un profil en arc de cercle avec $\mathcal{L} = h$.

Nous réalisons ensuite une simulation où une telle surface formée d'arcs est obtenue après évolution morphologique d'une surface initialement convexe. Le résultat est présenté sur la figure A.6. On voit que la concavité du profil s'inverse et que

des singularités apparaissent spontanément . On voit que le passage vers l'état stationnaire est rapide en temps adimensionné ($\bar{t} = \frac{\langle h \rangle^2}{D\Upsilon_s C_0} t = 20$) et qu'il apparaît un surface instationnaire de rugosité maximale ($\bar{t} = 1.7$).

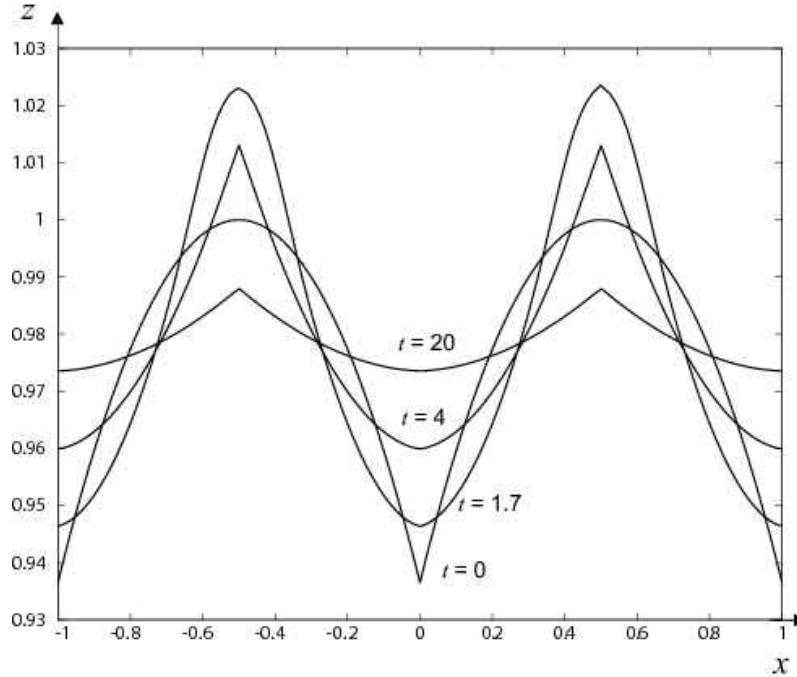


FIG. A.6 – Évolution de la hauteur moyenne d'une surface initialement convexe avec $\mathcal{L} = h$.

Une troisième simulation pertinente correspond à la simulation d'un créneau avec $\mathcal{L} = 2 h$. La figure A.7 présente :

- L'évolution de la surface au cours du temps ;
- La comparaison entre les profils initiaux et finaux ;
- La courbure du profil final.

Nous obtenons une nouvelle fois une surface composée d'arcs de cercle et de portions planes. La troisième sous-figure de A.7 nous permet de vérifier que la courbure obtenue et bien celle attendue : $\kappa = 1/\mathcal{L} = \frac{1}{2}$. L'extension de cette méthode de calcul aux surface hétérogènes pose des problèmes au niveaux de la gestion des points de discontinuité de la réactivité. Nous avons préféré nous consacrer à l'élaboration d'un code de simulation 3D dont le principe et les applications sont données au chapitre 5.

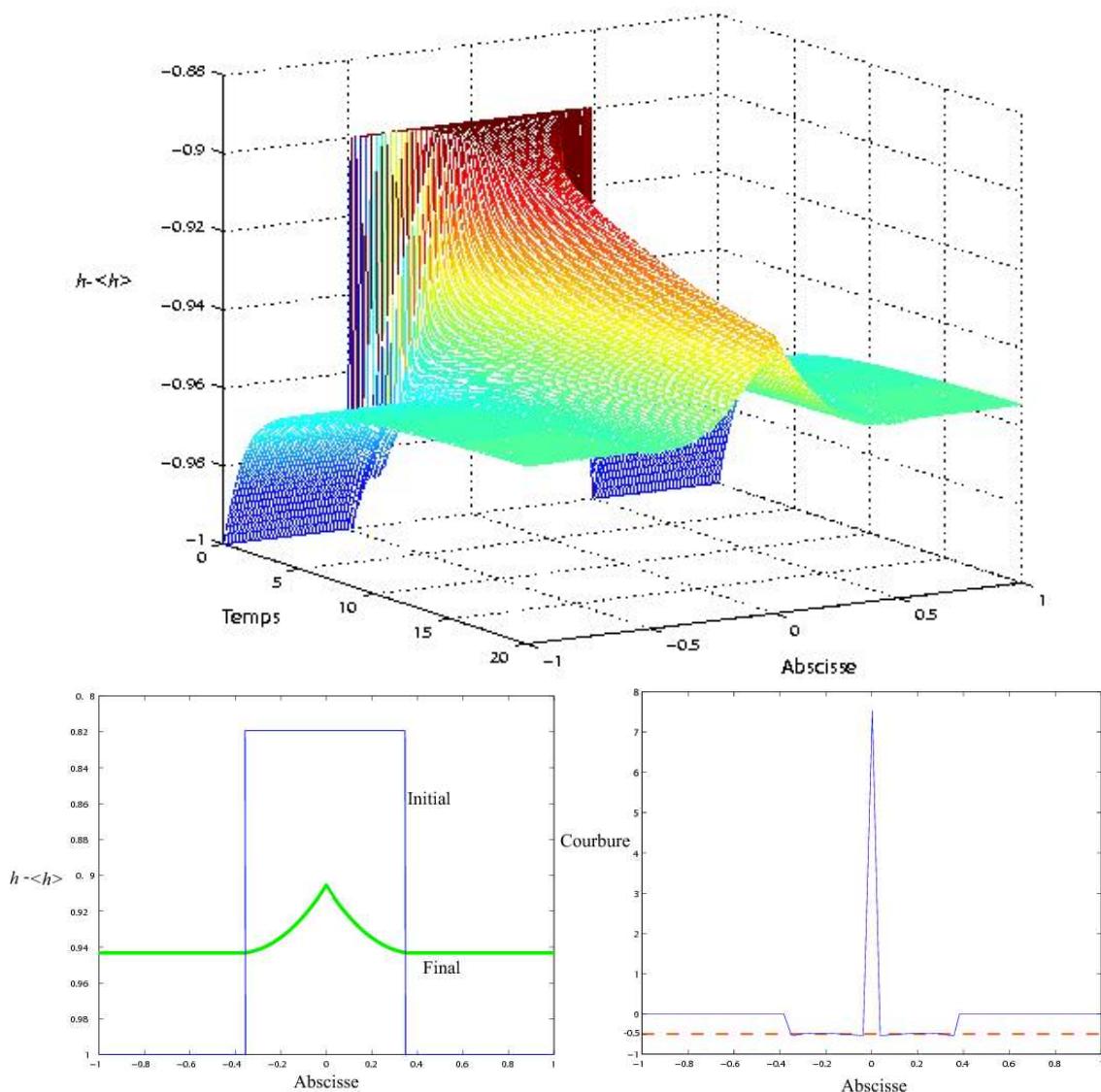


FIG. A.7 – Simulation de l'évolution d'un créneau avec $\mathcal{L} = 2$.

Nomenclature

Symboles grecs

δ_x	Côté d'un voxel Ω_e , m , page 114.
δ	Différence de hauteur entre la paroi détaillée et effective, m , page 75.
ϵ	Rapport des échelles l_μ/L , page 75.
ϵ_A	Porosité moyenne du matériau A , page 164.
ϵ_B	Porosité moyenne du matériau B , page 164.
η_A	Tortuosité du matériau A , page 164.
η_B	Tortuosité du matériau B , page 164.
ε_κ	Taux local de solide, page 113.
γ_g	Coefficient isentropique du mélange, page 5.
$\bar{\chi}$	limite de χ_y pour $y \gg l_\mu$, page 77.
\underline{x}	Vecteur de fermeture relatif à \tilde{u} , m , page 76.
μ	Viscosité cinématique du mélange fluide, $Pa.s$, page 8.
ν_i	Coefficient stoechiométriques associé à la réaction de la paroi avec l'espèce i , page 29.
Ω	Domaine contenant le fluide, le solide et Σ , page 28.
Ω_e	Voxel de DiAbl3D , page 113.
Ω_i	Domaine Ω restreint à un motif de la paroi, page 63.
$\phi_{baguette}$	Fraction volumique de baguette dans l'architecture $4D$, page 158.
ϕ_f	Fraction volumique de fibre, page 67.
ϕ_M	Fraction de matrice qui entoure les fils, page 164.
π	Variable de fermeture relative à \hat{p} , $Pa.s$, page 76.
ϖ	Rapport de condensation entre le fluide et le solide, page 33.
ρ_g	Masse volumique du mélange fluide, $kg.m^{-3}$, page 5.
ρ_s	Masse volumique macroscopique du composite, $kg.m^{-3}$, page 12.

Σ	Paroi réactive du matériau, page 28.
Σ_{eff}	Surface réactive effective, page 78.
Σ_ι	Face de Ω_e dans la direction $\iota = \text{Ouest, Est, Sud, Nord, Bas, Haut}$, m^2 , page 114.
Σ_c	Surface d'interface fluide/solide strictement inclue dans Ω_e , m^2 , page 117.
Σ_p	Surface projetée de Σ dans le plan horizontal, m^2 , page 95.
$\Sigma_{\beta,\iota}$	Surface occupée par la phase β sur Σ_ι , m^2 , page 115.
τ_K	Temps de stationnarisation de la morphologie en régime réactif, s , page 95.
τ_M	Limite de τ_k pour $\tilde{K} \rightarrow \infty$, s , page 96.
τ_p	Taux de cisaillement à la paroi, Pa , page 10.
θ_c	Angle entre la base de la fibre et la verticale Oz , page 93.
ϑ	Angle entre \underline{n} et $\underline{e_z}$, page 175.
ϑ_+	Valeur de ϑ à droite du point, page 179.
ϑ_-	Valeur de ϑ à gauche du point, page 179.
ϑ_0	Valeur de ϑ telle que \underline{W} est non-dérivable, page 177.
$\tilde{\Upsilon}$	Rapport des volumes molaires matrice/fibre, page 34.
Υ_F	Volume molaire des fils, $m^3.mol^{-1}$, page 34.
Υ_f	Volume molaire de la fibre, $m^3.mol^{-1}$, page 34.
Υ_M	Volume molaire de la matrice qui entoure les fils, $m^3.mol^{-1}$, page 34.
Υ_m	Volume molaire de la matrice qui entoure les fibres, $m^3.mol^{-1}$, page 34.
Υ_s	Volume macroscopique molaire du solide, $m^3.mol^{-1}$, page 13.

Symboles latins

\mathcal{A}	Nombre caractéristique du contraste entre les phases, $\mathcal{A} = \frac{\Upsilon_m k_m}{\Upsilon_f k_f}$, page 103.
$\mathbb{A}_{\gamma\kappa}$	Surface d'interface γ/κ dans V , m^2 , page 62.
A	Frontière de V , m^2 , page 60.
$A_{\gamma\kappa}$	Surface d'interface γ/κ dans V , m^2 , page 60.
A	Coefficient préexponentiel dans l'expression de la vitesse V_a , $kg.m^{-2}.s^{-1}.atm^{-a}$, page 12.
a	Ordre de la réaction d'oxydation, page 12.
q_A	Flux thermique consommé par l'ablation, $kW.m^{-2}$, page 16.
\underline{b}	Variable de fermeture relative à \tilde{c} d'ordre 1, m , page 64.

\bar{c}	Concentration en $z = \bar{h}_m$, $mol.m^{-3}$, page 105.
\tilde{c}	Déviation du champ de concentration, $mol.m^{-3}$, page 64.
\mathcal{C}	Moyenne de c sur \mathbb{V} , $mol.m^{-3}$, page 61.
c	Concentration totale en oxydant, $mol.m^{-3}$, page 47.
c_i	Concentration de l'espèce i , $mol.m^{-3}$, page 13.
C_p	Capacité calorifique isobare du mélange gazeux, $J.kg^{-1}.K^{-1}$, page 6.
c_p	Concentration totale en oxydant à la paroi, $mol.m^{-3}$, page 150.
c_t	Concentration totale, $mol.m^{-3}$, page 28.
$\mathcal{D}_{m,g}$	Débit massique des gaz de combustion, $kg.s^{-1}$, page 14.
$\mathcal{D}_{m,i}$	Débit massique de carbone injectée depuis la paroi vers la veine, $kg.s^{-1}$, page 14.
D	Coefficient de diffusion caractéristique, $m^2.s^{-1}$, page 36.
D_{eff}	Diffusivité effective, $m^2.s^{-1}$, page 164.
D_{ij}	Coefficient de diffusion binaire pour le couple ij , $m^2.s^{-1}$, page 28.
Da	Nombre de Damköhler , page 33.
Da_m	Nombre de Damköhler défini par rapport à la matrice, page 105.
E_a	Énergie d'activation de la réaction d'oxydation, $kcal.mol^{-1}$, page 12.
\bar{h}	Valeur de h au-dessu des portions horizontales de la paroi, m , page 100.
\bar{h}_f	Hauteur des portions horizontales de la fibre, m , page 103.
\bar{h}_m	Hauteur des portions horizontales de matrice, m , page 102.
h	Hauteur du domaine fluide contenu dans Ω_i , m , page 63.
h_c	Hauteur du cône stationnaire obtenu en régime réactif, m , page 93.
h_f	Hauteur h au-dessus de la fibre, m , page 102.
h'_f	hauteur de la fibre par rapport à la matrice normée par la longueur l , page 105.
h_m	Hauteur h au-dessus de la matrice, m , page 102.
$\langle J \rangle$	Flux moyen consommé à la surface, $mol.m^{-2}.s^{-1}$, page 95.
J_D	Flux molaire diffusif en régime limité par la diffusion, $mol.m^{-2}.s^{-1}$, page 79.
J_i	Flux diffusif de l'espèce i , $mol.m^{-2}.s^{-1}$, page 28.
$j_{m,C}$	flux massique de carbone injecté dans la tuyère depuis la paroi, $kg.m^{-2}.s^{-1}$, page 14.
$\langle k \rangle$	Moyenne surfacique arithmétique des réactivités, $\langle k \rangle = \frac{1}{\mathbb{A}} \int_{\mathbb{A}} k dS$, page 58.

\tilde{K}	Rapport des réactivités matrice/fibre, page 34.
\tilde{k}	Déviation de la réactivité, $m.s^{-1}$, page 64.
k_{eff}	Réactivité effective, $m.s^{-1}$, page 63.
k^*	Moyenne surfacique harmonique des réactivités, $k^* = \left(\frac{1}{A} \int_A 1/k \, dS \right)^{-1}$, page 71.
k	Réactivité locale intrinsèque, $m.s^{-1}$, page 12.
k_F	Réactivité des fils, $m.s^{-1}$, page 34.
k_f	Réactivité des fibres, $m.s^{-1}$, page 34.
k_i	Réactivité de l'interphase fibre/matrice, $m.s^{-1}$, page 147.
k_M	Réactivité de la matrice qui entoure les fils, $m.s^{-1}$, page 34.
k_m	Réactivité de la matrice qui entoure les fibres, $m.s^{-1}$, page 34.
K_s	Coefficient préexponentiel dans l'expression de k , $m.s^{-1}.K^{-1}$, page 13.
\mathcal{L}	Longueur caractéristique des motifs d'une surface rugueuse homogène, m , page 100.
\mathcal{L}_f	Longueur caractéristique des motifs de la fibre, m , page 102.
\mathcal{L}_m	Longueur caractéristique des motifs de la matrice, m , page 102.
L	Longueur caractéristique de l'écoulement, m , page 4.
l	Période de variation es hétérogénéités, m , page 59.
l_μ	Longueur caractéristique de l'échelle microscopique, m , page 31.
l_m	Longueur caractéristique de l'échelle mésoscopique, m , page 31.
\underline{m}	Vecteur normal à Σ_e dans Ω_e , m , page 117.
M_c	Masse molaire du solide, $g.mol^{-1}$, page 13.
Ma	Nombre de Mach, page 5.
\underline{N}_i	Flux molaire de l'espèce i , $mol.m^{-2}.s^{-1}$, page 28.
\underline{N}_s	Saut du flux \underline{N} à l'interface κ/γ , $mol.m^{-2}.s^{-1}$, page 60.
$\underline{n}_{\gamma\kappa}$	Normale à l'interface γ/κ dirigée du fluide vers le solide, m , page 29.
\underline{n}	Normale à l'interface γ/κ dirigée du solide vers le fluide, m , page 29.
\mathcal{P}	Pression moyenne, Pa , page 75.
p	Pression totale dans le fluide, Pa , page 4.
p_{ox}	pression partielle en oxydant, Pa , page 12.
Pe	Nombre de Péclet de masse, page 33.

\mathcal{R}	Constante des gaz parfaits, $1.987 \text{ cal.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$, page 12.
$\langle R \rangle_s$	Moyenne du saut de R , $\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, page 62.
$\langle R \rangle_s$	Saut de la moyenne de R , $\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, page 62.
μ	Rayon r tel que $n_z(r = \bar{r}) = -1$, m , page 100.
R	Taux de production volumique molaire, $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$, page 59.
r	Distance radiale à l'axe de la fibre, m , page 102.
R_b	Rayon d'une baguette, m , page 96.
R_f	Rayon d'une fibre, m , page 93.
R_s	Saut du taux de réaction R à l'interface κ/γ , $\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, page 60.
Re	Nombre de Reynolds global, page 4.
Re_μ	Nombre de Reynolds micro, page 79.
Re_x	Nombre de Reynolds local, page 66.
\mathcal{S}	Fonction de l'espace dont Σ est l'isosurface nulle, page 98.
s	Variable de fermeture relative à \tilde{c} d'ordre 0, page 64.
S_f	Surface exposée de la fibre, m^2 , page 94.
S_m	Surface exposée de la matrice, m^2 , page 94.
S_v	Section de la veine, m^2 , page 5.
$S_{f,p}$	Surface de fibre dans une section horizontale vierge, m^2 , page 94.
$S_{m,p}$	Surface de matrice dans une section horizontale vierge, m^2 , page 94.
Sc	Nombre de Schmidt, page 34.
T_s	Température du solide, K , page 12.
\mathcal{U}	Vitesse moyenne, m.s^{-1} , page 75.
$\tilde{\mathcal{U}}$	Déviation de la vitesse, m.s^{-1} , page 75.
$\underline{\mathcal{U}}$	Vitesse du fluide dans le référentiel lié à la paroi, m.s^{-1} , page 57.
U	Vitesse caractéristique de l'écoulement à l'échelle macro, m.s^{-1} , page 32.
v_0	Norme de $\underline{\mathcal{V}}$ pour $c(\underline{x}) = C_0$, m.s^{-1} , page 175.
\mathcal{V}	Volume permettant de définir la condition de saut à l'échelle du point, m^3 , page 59.
\mathbb{V}	Volume permettant de définir la réactivité effective, m^3 , page 61.
$\underline{\mathcal{V}}$	Vitesse normale de la paroi dans le repère lié à l'axe de la tuyère, m.s^{-1} , page 29.

\underline{v}_i	Vitesse de l'espèce i , $m.s^{-1}$, page 28.
\underline{v}	Vitesse de l'écoulement dans le référentiel lié à la tuyère, $m.s^{-1}$, page 5.
V_a	Vitesse de recul macroscopique de la paroi, $m.s^{-1}$, page 12.
v_s	Célérité du son, $m.s^{-1}$, page 5.
\underline{w}	Vitesse relative au déplacement des points de la paroi, $m.s^{-1}$, page 176.
\underline{w}	Vitesse molaire moyenne, $m.s^{-1}$, page 28.
\underline{x}	Vecteur position, m , page 62.
x_i	Fraction molaire de l'espèce i , page 28.
y	Distance radiale à la paroi, m , page 8.
z	Distance radiale de la paroi au haut du domaine $z = h - y$, m , page 40.

Exposants, Indices et Opérateurs

$*^{(t)}$	Propriété relative au régime turbulent, page 9.
$*_0$	Propriété dans le cœur de la veine, page 47.
$*_{col}$	Propriété au col de la Tuyère, page 7.
$*_\gamma$	Grandeur restreinte à la phase fluide γ , page 60.
$*_G$	Propriétés génératrices de l'écoulement, page 5.
$*_\kappa$	Grandeur restreinte à la phase solide κ , page 60.
$\langle *\rangle^\gamma$	Opérateur de prise de moyenne relatif au volume \mathbb{V}_γ , page 61.
$\langle *\rangle$	Opérateur de prise de moyenne relatif au volume \mathbb{V} , page 61.
$\langle *\rangle^\kappa$	Opérateur de prise de moyenne relatif au volume \mathbb{V}_κ , page 61.

Bibliographie

- Achdou, Y., Le Tallec, P., Valentin, F., and Pironneau, O. (1998a). Constructing wall laws with domain decomposition or asymptotic expansion techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151(1-2) :215–232.
- Achdou, Y., Pironneau, O., and Valentin, F. (1998b). Effective boundary conditions for laminar flows over periodic rough boundaries. *Journal of Computational Physics*, 147(1) :187–218.
- Adalsteinsson, D. and Sethian, J. (2003). Transport and diffusion of material quantities on propagating interfaces via level set methods. *Journal of Computational Physics*, 185 :271–288.
- Aspa, Y., Lachaud, J., Vignoles, G., and Quintard, M. (2006a). Simulation of c/c composites ablation using a vof method with moving reactive interface. In *12th European Conference on Composite Materials*, Biarritz, FRANCE. ECS/AMAC.
- Aspa, Y., Lachaud, J., Vignoles, G. L., and Quintard, M. (2006b). Identification of ablative properties of c/c composites using inverse simulation. In *9th Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, San Francisco, CA, USA. AIAA/ASME.
- Aubard, X., Cluzel, C., Guitard, L., and Ladeveze, P. (2000). Damage modeling at two scales for 4d carbon/carbon composites. *Computers & Structures*, 78(1-3) :83–91.
- Aubrun, P. (2003). Présentation de la chaîne de calcul ablation. Note technique, Snecma Propulsion Solide.
- Aupoix, B. (1999). Couches limites bi-dimensionnelles compréssibles. descriptif et mode d'emploi du code CLIC2. Rapport final RF1/5620.02-1/5620.05, ONERA, DMAE.
- Bensoussan, J., Lions, L., and Papanicolao, G. (1978). *Asymptotic Analysis for Periodic Structure*. North-Holland, Amsterdam.
- Bird, R. B., Stewart, W., and Lightfoot, E. (1960). *Transport Phenomena*. J. Wiley & Sons.
- Bonnetain, L. and Hoynant, G. (1965). *Oxydation des graphites aux températures moyennes*, volume 1 of *Les Carbones*. Masson, Paris.

- Borie, V., Brulard, J., and Lengellé, G. (1988). An aerothermochemical analysis of carbon-carbon nozzle regression in solid-propellant rocket motors. In *24th Joint Propulsion conference*, Boston, MA. AIAA/ASME/SAE/ASEE.
- Borie, V., Maisonneuve, Y., Lambert, D., and Lengellé, G. (1990). Ablation des matériaux de tuyères de propulseurs à propergol solide. Technical Report 13, ONERA.
- Cairo, C. A. A., Florian, M., Graca, M. L. A., and Bressiani, J. C. (2003). Kinetic study by TGA of the effect of oxidation inhibitors for carbon-carbon composite. *Materials Science and Engineering A*, 358(1-2) :298–303.
- Chase, M. W. J. (1998). NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th edition. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 9.
- Chassaing, P. (2000). *Mécanique Des Fluides*. Cépaduès.
- Chelliah, H. K., Makino, A., Kato, I., Araki, N., and Law, C. K. (1996). Modeling of graphite oxidation in a stagnation-point flow field using detailed homogeneous and semiglobal heterogeneous mechanisms with comparisons to experiments. *Combustion and Flame*, 104(4) :469–480.
- Chen, W.-Y., Kulkarni, A., and Milum, J. L. (1999). Stochastic modeling of carbon oxidation. *AICHE*, 45 :2557–2570.
- Coindreau, O., Vignoles, G., and Cloetens, P. (2003). Direct 3d microscale imaging of carbon-carbon composites with computed holotomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 200 :308–314.
- Dagan, G. (1989). *Flow and Transport in Porous Formations*. Springer-Verlag, Heidelberg Berlin New York.
- Duffa, G., Vignoles, G. L., Goyhénèche, J.-M., and Aspa, Y. (2005). Ablation of carbon-based materials : Investigation of roughness set-up from heterogeneous reactions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(16) :3387–3401.
- Duvivier, E. (1997). *Cinétique d'oxydation d'un composite carbone/carbone et influence sur le comportement mécanique*. Thèse, Université de Bordeaux I.
- Gao, P., Wang, H., and Jin, Z. (2004). Study of oxidation properties and decomposition kinetics of three-dimensional (3-D) braided carbon fiber. *Thermochimica Acta*, 414 :59–63.
- Glime, W. H. and Cawley, J. D. (1995). Oxidation of carbon fibers and films in ceramic matrix composites : a weak link process. *Carbon*, 33(8) :1053–1060.

- Golfier, F., Zarcone, C., Bazin, B., Lenromand, R., Lasseux, D., and Quintard, M. (2002). On the ability of a darcy-scale model to capture wormhole formation during the dissolution of a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 457 :213–254.
- Golovina, E. S. (1980). The gasification of carbon by carbon dioxide at high temperatures and pressures. *Carbon*, 18 :197–201.
- Greaves, D. (2004). A quadtree adaptive method for simulating fluid flows with moving interfaces. *Journal of Computational Physics*, 194 :35–56.
- Gueyffier, D., Li, J., Nadim, A., Scardovelli, R., and Zaleski, S. (1999). Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, 152 :423–456.
- Han, J. C., He, X. D., and Du, S. Y. (1995). Oxidation and ablation of 3d carbon-carbon composite at up to 3000°C. *Carbon*, 33 :473–478.
- Jacobson, N. S., Leonhardt, T. A., Curry, D. M., and Rapp, R. A. (1999). Oxidative attack of carbon/carbon substrates through coating pinholes. *Carbon*, 37 :411–419.
- Jiqiao, L., Baiyun, H., Gang, S., Tengfei, C., and Xiang, X. (2002). Influence of porosity and total surface area on the oxidation resistance of C/C composites. *Carbon*, 40 :2483–2488.
- Juhasz, N. M. and Deen, W. D. (1991). Effect of local peclet number on mass transfer to a heterogeneous surface. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 3 :556,562.
- Katardjiev, I. V. (1989a). The application of the huygens principle to surface evolution in inhomogeneous, anisotropic and time-dependent systems. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 22 :1813–1824.
- Katardjiev, I. V. (1989b). A kinematic model of surface evolutiongrowth and erosion : Numerical analysis. *Journal of Vacuum Science and Technology*, A 7 :3222–3232.
- Kuo, K. and Keswani, S. (1986). A comprehensive theoretical model for carbon-carbon composite nozzle recession. *Combustion Science and Technology*, 42 :177–192.
- Labruquère, S., Bourrat, X., Pailler, R., and Naslain, R. (2001). Structure and oxidation of C/C composites : role of the interface. *Carbon*, 39 :971–984.
- Lachaud, J., Aspa, Y., Vignoles, G., and Goyhénèche, J. M. (2006). Modélisation 3d de l'ablation thermochimique des composites c/c. In *Congrès Français de Thermique*. SFT.

- Lacoste, M., Lacombe, A., Joyez, P., Ellis, R. A., Lee, J. C., and Payne, F. M. (2002). Carbon/carbon extendible nozzles. *Acta Astronautica*, 50(6) :357–367.
- Libby, P. A. and Blake, T. R. (1981). Burning carbon particles in the presence of water vapor. *Combustion and Flame*, 41 :123–147.
- Luo, R., Cheng, J., and Wang, T. (2002). Oxidation behavior and protection of carbon/carbon composites prepared using rapid directional diffused cvi techniques. *Carbon*, 40(11) :1965–1972.
- Manocha, L. M. and Fitzer, E. (1998). *Carbon reinforcement and C/C composites*. Springer.
- Marle, C. (1967). Ecoulements monophasiques en milieu poreux. *Rev. Inst. Francais du Pétrole*, pages 1471–1509.
- Milos, F. S. and Chen, Y. K. (1997). Comprehensive model for multicomponent ablation thermochemistry. In *35th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, Reno, NV. AIAA.
- Nagle, J. and Strickland-Constable, R. F. (1962). Oxidation of carbon between 1000 – 2000°C. *Fifth Biennial Carbon Conference*, 1 :154–164.
- Quintard, M., Bletzacker, L., Chenu, D., and Whitaker, S. (2006). Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61(8) :2643–2669.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1993). Transport in ordered and disordered porous media : Volume averaged equations, closure problems, and comparison with experiment. *Chemical Engineering Science*, 48 :2537–2564.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1999). Dissolution of an immobile phase during flow in porous media. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 38 :833–844.
- Quli, F. A., Thrower, P. A., and Radovic, L. R. (1998). Effects of the substrate on deposit structure and reactivity in the chemical vapor deposition of carbon. *Carbon*, 36(11) :1623–1632.
- Rodriguez-Mirasol, J., Thrower, P. A., and Radovic, L. R. (1995). On the oxidation resistance of carbon-carbon composites : Importance of fiber structure for composite reactivity. *Carbon*, 33(4) :545–554.
- Sanchez-Palencia, E. (1974). Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques heterogenes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4) :331–351.
- Sauder, C. (2001). *Relation microstructure/propriétés à haute température dans les fibres et matrices de carbone*. Thèse, Université Bordeaux 1.

- Scardovelli, R. and Zaleski, S. (2000). Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics*, 164 :228–237.
- Sethian, J. A. (2001). Evolution, implementation, and application of level set and fast marching methods for advancing fronts. *Journal of Computational Physics*, 169 :503–555.
- Talandier, J. (1994). *Couplage Entre une Couche Limite Hypersonique et Une Paroi Degrable Par Oxidation*. Thèse, Paris VI.
- Taylor, R. and Krishna, R. (1993). *Multicomponent mass transfer*. J. Wiley & Sons, New York.
- Tomadakis, M. and Sortichos, S. (1991). Effect of fiber orientation and overlapping on Knudsen, transition and ordinary regime diffusion in fibrous substrates. In *Chemical Vapor Deposition of refractory metals and ceramics*, volume 250 of *Materials Research Society symposium proceedings*. MRS.
- Valdes-Parada, F. J., Goyeau, B., and Alberto Ochoa-Tapia, J. (2006). Diffusive mass transfer between a microporous medium and an homogeneous fluid : Jump boundary conditions. *Chemical Engineering Science*, 61(5) :1692–1704.
- Vignoles, G. L. (1995). Modelling binary, Knudsen, and transition regime diffusion inside complex porous media. *Journal de Physique IV*, C5 :159–166.
- Vix-Guterl, C., Bekri, G., Dentzer, J., Manocha, S., Manocha, L., and Ehrburger, P. (2003). Reactivity in wet air of carbon/carbon composites with treated pitches. *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 67 :341–357.
- Véran, S. (2006). Modélisation du transport réactif sur une surface hétérogène. Rapport m2r, ENSEEIHT.
- Welch, S. W. J. and Wilson, J. (2000). A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, 160 :662–682.
- Whitaker, S. (1967). Diffusion and dispersion in porous media. *AICHE J.*, 13 :420–427.
- Whitaker, S. (1999). *The method of volume averaging*. Kluwer Academic Publishers.
- Wood, B., Quintard, M., and Whitaker, S. (2000). Jump conditions at non-uniform boundaries : The catalytic surface. *Chemical Engineering Science*, 55 :5231–5245.

MODELISATION DE L'ABLATION DES COMPOSITES C/C DANS LES COLS DE TUYERE

Résumé

Les cols composites des tuyères de propulseurs sont soumis à des conditions extrêmes qui entraînent une récession de la paroi ou ablation. Le but de l'étude est de calculer la réactivité effective du composite C/C et ainsi de mieux évaluer les épaisseurs consommées. Les cas des surfaces récessives et non-récessives ont été envisagés. Dans le second cas, le problème est résolu par prise de moyenne : la réactivité effective est alors inférieure à la moyenne arithmétique des réactivités. Dans le cas récessif, l'évolution de la rugosité est calculée par un outil original basé sur une méthode VOF. La réactivité effective est alors supérieure au cas non-récessif et égale au maximum des réactivités en régime contrôlé par la réaction. L'application aux matériaux C/C a permis d'identifier les réactivités élémentaires des composites par analyse inverse et de comparer le comportement de matériaux fortement non uniformes.

Mots-clés: Ablation, Composites C/C, Surfaces effectives, Approche Multi-échelle, Prise de moyenne volumique.

MODELING OF C/C COMPOSITES ABLATION IN NOZZLE THROAT

Abstract

Composite rocket throat parts suffer extreme conditions leading to a wall recession named ablation. The aim of the study is to compute the effective reactivity of the C/C composite in order to have a better evaluation of consumed thickness. The cases of recessive and non-recessive surfaces had been considered. In the second case, the problem is solved by volume averaging : the effective reactivity is then inferior to the arithmetic average of the reactivities. In the recessive case, the evolution of the surface is computed using an original VOF based code. The effective reactivity is then superior to the non-recessive case and equal to the maximum of the reactivities in a reaction-limited regime. The application to C/C allowed to identify of elementary reactivities by inverse analysis and to compare the ablative behavior of highly non-uniform materials.

Keywords: Ablation, C/C Composites, Effective surfaces, Multi-scale approach, Volume averaging.