



**HAL**  
open science

## Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials: part II

Virginie Drean, Mario Ricchiuto, Gerard L. Vignoles

► **To cite this version:**

Virginie Drean, Mario Ricchiuto, Gerard L. Vignoles. Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials: part II. [Rapport de recherche] RR-7418, INRIA. 2010. inria-00526121

**HAL Id: inria-00526121**

**<https://inria.hal.science/inria-00526121>**

Submitted on 13 Oct 2010

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET EN AUTOMATIQUE

*Two-dimensional oxydation modelling of MAC  
composite materials: part II*

Virginie Drean — Mario Ricchiuto — Gérard Vignolles

N° 7418

October 2010

Thème NUM

*R*apport  
de recherche



## Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials: part II

Virginie Drean , Mario Ricchiuto , Gérard Vignolles <sup>\*†</sup>

Thème NUM — Systèmes numériques  
Équipes-Projets BACCHUS

Rapport de recherche n° 7418 — October 2010 — 78 pages

**Abstract:** Dans ce papier, le second volet de la modélisation du comportement de matériaux composites à matrice céramique auto-cicatrisante est présenté. La modélisation physico-chimique de l'oxydation de ce matériau est faite à travers la consommation d'une couche matricielle et de carbone à l'interface fibre/matrice. Le mécanisme d'auto-cicatrisation est modélisé par la création d'un bouchon d'oxyde dans une fissure unique ouverte et une simulation de la diffusion d'oxygène à travers sa géométrie évolutive. Cette étude participe à l'amélioration de la durée de vie de matériaux modèles (composites, multicouches).

Nous nous intéressons ici dans un premier temps à l'obtention de maillage pour la modélisation du problème d'oxydation. Ces maillages sont obtenus à partir de matériaux composites réels et pourront être simplifiés. Dans un deuxième temps, nous réalisons des cas-tests simples pour valider le schéma numérique choisi, et décrit dans un premier rapport. Puis les résultats obtenus pour la diffusion de l'oxygène dans différentes configurations de fissures sont présentés. Nous montrerons également l'évolution des grandeurs du modèle, i.e. la hauteur de liquide formé ou d'oxygène disponible.

**Key-words:** MATRICE CERAMIQUE, OXYDATION, AUTO-CICATRISATION, 2D

\* INRIA - Bordeaux Sud-Ouest

† LCTS

## Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials: part II

**Résumé :** Dans ce papier, le second volet de la modélisation du comportement de matériaux composites à matrice céramique auto-cicatrisante est présenté. La modélisation physico-chimique de l'oxydation de ce matériau est faite à travers la consommation d'une couche matricielle et de carbone à l'interface fibre/matrice. Le mécanisme d'auto-cicatrisation est modélisé par la création d'un bouchon d'oxyde dans une fissure unique ouverte et une simulation de la diffusion d'oxygène à travers sa géométrie évolutive. Cette étude participe à l'amélioration de la durée de vie de matériaux modèles (composites, multicouches).

Nous nous intéressons ici dans un premier temps à l'obtention de maillage pour la modélisation du problème d'oxydation. Ces maillages sont obtenus à partir de matériaux composites réels et pourront être simplifiés. Dans un deuxième temps, nous réalisons des cas-tests simples pour valider le schéma numérique choisi, et décrit dans un premier rapport. Puis les résultats obtenus pour la diffusion de l'oxygène dans différentes configurations de fissures sont présentés. Nous montrerons également l'évolution des grandeurs du modèle, i.e. la hauteur de liquide formé ou d'oxygène disponible.

**Mots-clés :** MATRICE CERAMIQUE, OXYDATION, AUTO-CICATRISATION, 2D

## Contents

<b>1</b>	<b>Introduction: Contexte et motivations de ce travail</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Obtention du maillage</b>	<b>4</b>
2.1	Matériaux réels . . . . .	4
2.2	Segmentation de l'image . . . . .	5
2.3	Maillage simplifié . . . . .	7
2.3.1	Maillage réduit pour cas-tests . . . . .	7
2.3.2	Maillage simplifié réaliste . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Cas-tests pour l'oxydation sur maillage réduit</b>	<b>12</b>
3.1	Maillage simplifié réduit . . . . .	13
3.2	Premier cas-test: l'équation de diffusion 2D . . . . .	13
3.2.1	Initialisation de la C sur le bord droit . . . . .	14
3.2.2	Initialisation de la C au milieu du maillage . . . . .	15
3.2.3	Initialisation de la C dans la fissure . . . . .	17
3.2.4	Conclusion . . . . .	18
3.3	Deuxième cas-test: l'équation de diffusion 1D . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Premiers résultats pour l'oxydation sur maillage simplifié</b>	<b>24</b>
4.1	Diffusion: équation de bilan de masse simplifiée . . . . .	25
4.2	Avancée des hauteurs: la concentration est figée . . . . .	29
4.3	Modèle général: concentration et hauteurs variables . . . . .	31
4.3.1	Épaisseur forte de la fissure: $e_f = 18 \mu m$ . . . . .	36
4.3.2	Épaisseur faible de la fissure: $e_f = 3 \mu m$ . . . . .	39
4.3.3	Prise en compte des conditions aux limites . . . . .	41
4.3.4	Modification du coefficient de diffusion . . . . .	42
4.3.5	Discrétisation temporelle suivant la méthode de Gear . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Oxydation des composites MAC: nouveaux cas-tests</b>	<b>49</b>
5.1	Evolution temporelle des variables du modèle . . . . .	51
5.1.1	Épaisseur de fissure de $3 \mu m$ . . . . .	51
5.1.2	Épaisseur de fissure de $1 \mu m$ . . . . .	58
5.1.3	Épaisseur de fissure de $0.5 \mu m$ . . . . .	63
5.1.4	Épaisseur de fissure de $0.1 \mu m$ . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>76</b>

## 1 Introduction: Contexte et motivations de ce travail

Les composites à matrice céramique (CMC) présentent des propriétés remarquables de bonne tenue mécanique, en conservant une densité faible [1]. Cet ensemble de propriétés permet d'envisager leur emploi en tant qu'éléments de structure pour des applications aéronautiques et spatiales. De par la diversité de leurs composants (fibres, matrice) et la possibilité de concevoir des matériaux "sur-mesure", les matériaux composites apparaissent comme une bonne alternative aux solutions de structures métalliques. Toutefois, l'utilisation de ces

matériaux reste encore limitée par la relative complexité de leur comportement.

L'alliance de deux composants fragiles (matrice et fibre) est rendue utilisable grâce à l'introduction d'une interface enrobant la fibre (pyrocarbone  $pyC$ ). Celle-ci permet de dévier les fissures parallèlement aux fibres. Cependant, en milieu oxydant, cette interface est altérée, et la durée de vie du matériau chute fortement [2]. Le réseau de fissures présent au sein de ce matériau est alors un passage privilégié pour l'oxygène  $O_2$  ambiant.

Afin de ralentir la progression de l'oxygène dans le matériau, des composites à matrice céramique multicouche auto-cicatrisante sont utilisées, et permettent d'atteindre des durées de vie très importantes grâce à l'ajout de bore ( $B$ ) dans certaines couches de la matrice. En effet, sous atmosphère oxydante, ces couches se liquéfient et forment alors un verre qui va peu à peu remplir les fissures et jouer le rôle de bouchon, ralentissant ainsi la diffusion de l'oxygène. L'oxydation de l'interface et des fibres est limitée ce qui augmente très nettement la durée de vie de ces matériaux [3].

Dans ce travail, une macromodélisation physico-chimique des mécanismes d'oxydation est considérée. L'hypothèse principale est que les mécanismes d'oxydation et de cicatrisation prépondérants sont liés à la diffusion d'oxygène à travers les fissures perpendiculaires aux fibres.

Le modèle physico-chimique retenu pour l'oxydation des composites MAC se scinde en deux parties:

- dans la première phase du modèle, nous considérons la modélisation des mécanismes d'oxydation. Cette première étape concerne donc la phase de formation du bouchon d'oxyde dans la fissure;
- dans la deuxième phase du modèle, nous considérons l'avancée du liquide dans la fissure. Cette étape concerne alors la phase de cicatrisation de la fissure.

Nous verrons dans un premier temps comment nous avons obtenu des maillages réalistes et simplifiés à partir d'images de matériaux réels.

Le schéma numérique retenu pour la modélisation de l'oxydation est validé en étudiant les résultats obtenus pour des cas-tests assez simples.

Les premiers résultats sur un maillage réaliste sont finalement présentés.

## 2 Obtention du maillage

### 2.1 Matériaux réels

Nous considérons des images réelles obtenues par tomographie de matériaux composites.

Les trois images ci-après sont des images de matériaux composites réels. Nous distinguons bien les différentes couches de matrice autour des fibres. Les matériaux montrés sur ces images ne sont pas constitués du même nombre de couches.

Par exemple sur l'image (FIG.1, gauche), nous pouvons distinguer jusqu'à 9 couches superposées, alors que sur l'image (FIG.2), seulement 6 couches apparaissent.



Figure 1: Matériaux composites réels; observation des différentes couches de matrice superposées autour des fibres.

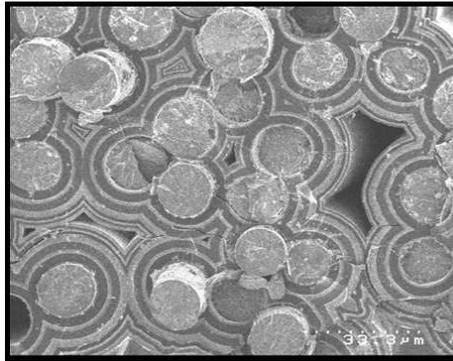


Figure 2: Matériaux composites réels; observation des différentes couches de matrice superposées autour des fibres.

## 2.2 Segmentation de l'image

La segmentation de ces images permet d'obtenir un maillage utilisé pour la modélisation de l'oxydation des composites MAC considérée ici.

Nous allons présenter dans cette section comment la segmentation d'une image à été réalisée et a permis d'obtenir un maillage réaliste.

La segmentation de l'image consiste à repérer dans un premier temps les différentes couches autour des fibres composites. Par traitement de l'image (GIMP, Photoshop, ...), nous attribuons à chacune de ces couches un niveau de couleur afin de les différencier.

Afin de respecter les hypothèses du modèle étudié ici, nous considérons deux matériaux différents seulement autour des fibres: le matériau constituant la matrice inerte  $SiC$  et celui constituant la matrice réactive  $B_4C$ . La couche de  $pyC$  autour des fibres est supposée trop fine pour être distinguée sur les images et ne sera définie que dans la modélisation.

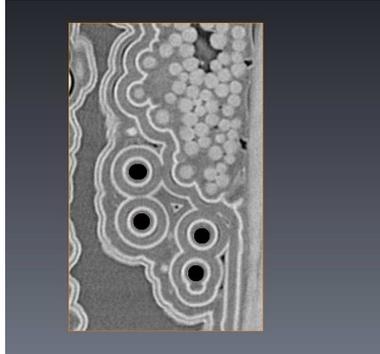


Figure 3: Première étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des fibres et attribution d'une couleur par traitement de l'image.

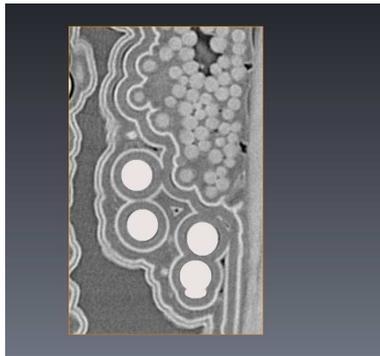


Figure 4: Deuxième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des premières couches de matrice inerte  $SiC$ ; attribution d'une couleur.

Finalement, grâce à la collaboration de Guillaume Couégnat (LCTS) [4], qui a développé un programme sous Matlab durant sa thèse, permettant de reconstruire un maillage à partir des niveaux de couleur attribués aux différentes couches de matériaux pendant l'étape de segmentation de l'image (FIG.12), nous accédons à un maillage du matériaux réel.

Ce maillage est non structuré, composé d'éléments triangulaires (FIG.13), et possède dans son fichier de données les différentes couches de matrice désignées lors de la segmentation.

D'autres maillages ont été obtenus à partir de matériaux composites réels avec la même méthode de segmentation de l'image (FIG.14).

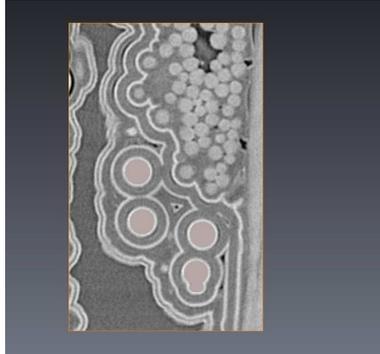


Figure 5: Deuxième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des premières couches de matrice réactive ( $B_4C$ ); attribution d'une couleur.

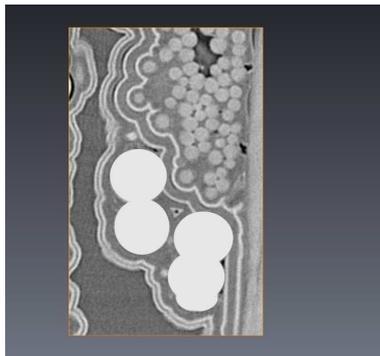


Figure 6: Troisième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des couches de matrice inerte  $SiC$ ; attribution d'une couleur.

## 2.3 Maillage simplifié

### 2.3.1 Maillage réduit pour cas-tests

Avant de commencer la modélisation du problème d'oxydation des composites MAC, il convient de choisir un maillage sur lequel les grandeurs du modèle vont évoluer.

Pour réaliser la modélisation de ce problème, et valider les méthodes numériques choisies, nous commençons par choisir un maillage réduit. En effet, le nombre de mailles assez faible permet de réaliser les calculs rapidement et de mieux se rendre compte des difficultés numériques. Sur la figure (FIG.17), le maillage réduit choisi dans un premier temps est présenté. Il s'agit d'un maillage rectangulaire composé de 80 éléments rectangulaires réguliers (54 sommets, 26 arêtes). Les couches de matrices sont alternées, et nous choisissons 2 couches de matrices inertes entourant une couche de matrice réactive. La partie gauche du rectangle est considérée comme étant la zone de la fibre, et la partie droite comme la zone

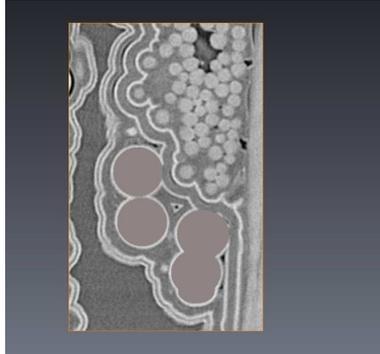


Figure 7: Troisième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des couches de matrice réactive  $B_4C$ ; attribution d'une couleur.

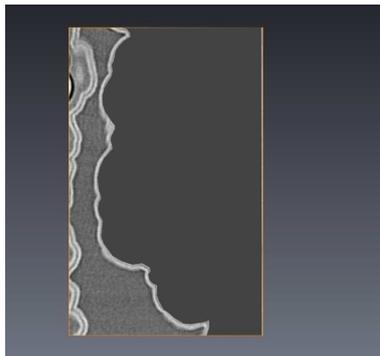


Figure 8: Quatrième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des couches de matrice inerte  $SiC$ ; attribution d'une couleur.

extérieure. La fissure est choisie horizontale, au centre du rectangle; elle débute du coté de la zone extérieure et finit à la zone fibre.

### 2.3.2 Maillage simplifié réaliste

L'utilisation du maillage réduit précédent est utile pour la validation des méthodes numériques choisies pour la modélisation du problème d'oxydation considéré ici, mais n'est pas suffisant pour son étude complète.

Comme nous l'avons vu, nous disposons à présent de plusieurs maillages obtenus à partir de matériaux réels, et qui reflètent donc leurs imperfections: couche de matrice très fine ou mal distinguée ou recouvrant une autre couche, non périodicité, couches de différentes épaisseurs ...

Nous choisissons alors un maillage simplifié, mais restant proche de celui d'un matériau réel: nous considérons des fibres de même taille, des couches de

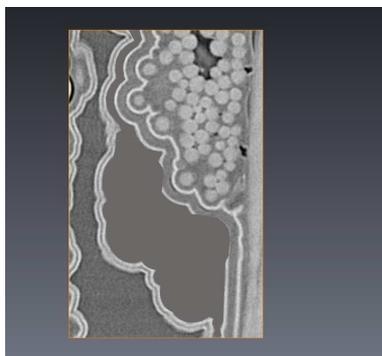


Figure 9: Quatrième étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des couches de matrice réactive  $B_4C$ ; attribution d'une couleur.

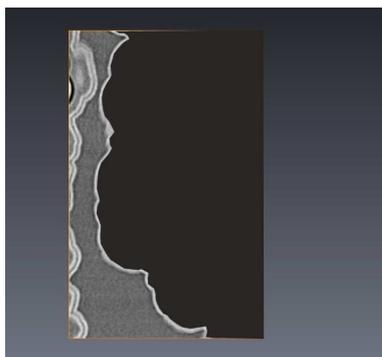


Figure 10: Dernière étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des dernières couches de matrice réactive  $B_4C$ ; attribution d'une couleur.

matrice inerte de même épaisseur, en alternance avec les couches de matrice réactive.

De plus, nous choisissons un nombre de fibres et un nombre de couches de matrice limité.

Pour finir, le maillage simplifié est construit de façon périodique.

En effet, en utilisant les travaux de [4], il est possible de générer de tels maillages. Nous allons brièvement décrire la méthode qu'il a utilisé durant ses travaux de thèse.

L'arrangement des fibres au sein d'un fil est très désordonné pour un matériau à matrice composite. Comme il est probable que les propriétés locales soient largement influencées par les distances locales interfibres, les modélisations basées sur un arrangement parfait des fibres ne sont pas capables de prendre en compte cette variabilité et restent donc très insuffisantes. Il est alors nécessaire de caractériser le "désordre" dans l'arrangement des fibres pour déterminer la taille

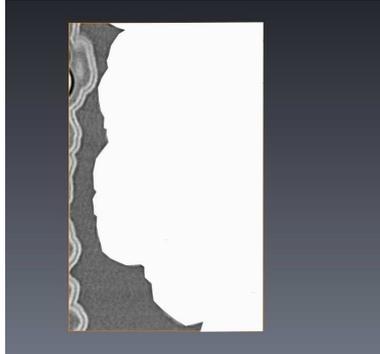


Figure 11: Dernière étape de la segmentation de l'image réelle d'un matériau composite : reconnaissance des dernières couches de matrice inerte  $SiC$ ; attribution d'une couleur.

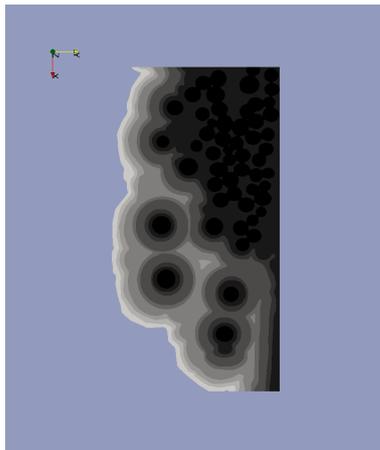


Figure 12: Image finale après attribution d'une couleur aux différentes couches de matrice.

minimale d'un volume élémentaire représentatif (VER).

L'agencement spatial d'une microstructure hétérogène, ses échelles et leur superposition éventuelles, peuvent être caractérisés par analyse d'image, et en particulier en introduisant la notion de covariance. La covariance  $Cov(x, x + h)$  se définit par la probabilité que deux points matériels  $x$  et  $x + h$  séparés par une distance  $h$  appartiennent à une même phase  $r$  :

$$Cov(x, x + h) = P(x \in r, x + h \in r)$$

Lorsqu'on dispose d'une image binarisée de la microstructure, obtenue par seuillage de la phase considérée (ici, nous nous intéressons à l'arrangement des fibres), la covariance peut être estimée à partir de la transformée de Fourier de l'image. L'étude de la covariance d'une microstructure permet donc de caractériser simultanément la fraction volumique moyenne de la phase considérée, son ar-

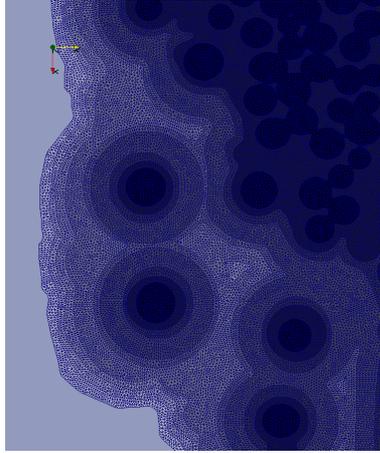


Figure 13: Maillage obtenu correspondant à l'image finale FIG.12; ici avec un zoom avant.

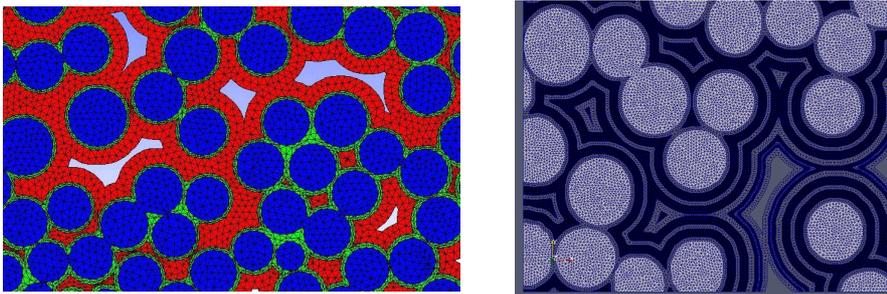


Figure 14: Autres exemples de maillages obtenus à partir de matériaux composites réels après segmentation de l'image.

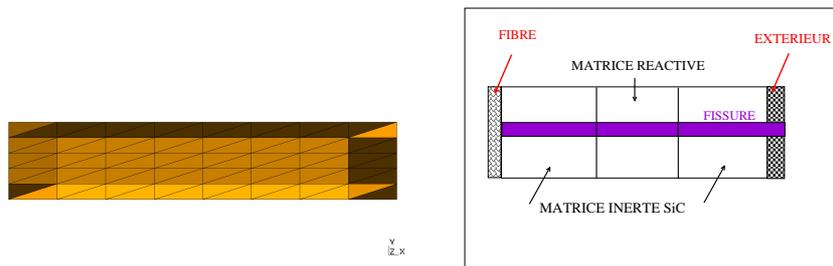


Figure 15: Maillage réduit d'un composite MAC.

rangement morphologique, les distances caractéristiques de la microstructure (distance moyenne entre les fibres, distance entre amas locaux de fibres). Elle permet également de définir une taille de VER géométrique à considérer pour être statistiquement représentatif.

Dans la pratique, cette taille peut se révéler encore trop importante pour pouvoir réaliser des études par éléments finis sur le VER complet. Une solution classique consiste alors à considérer soit des cellules extraites de micrographies de la microstructure réelle, soit des cellules générées aléatoirement en se recalant sur la fraction volumique moyenne de fibres.

L'approche utilisée ici est de générer des cellules représentatives en utilisant toute l'information de la covariance, et non pas seulement la fraction volumique moyenne. Le but est alors de construire des cellules élémentaires dont la covariance reste la plus proche possible de la covariance de la microstructure de référence.

Le problème se formule alors comme un problème d'optimisation consistant à trouver la position optimale de  $N$  fibres minimisant l'erreur  $F$  entre la covariance de la cellule élémentaire et celle de la microstructure de référence. La position initiale des  $N$  fibres est choisie de manière aléatoire dans une cellule, telle que la fraction volumique moyenne soit respectée. La covariance de la cellule est évaluée; la position optimale des fibres est ensuite déterminée itérativement

Dans un premier temps, une procédure MATLAB a été développée permettant de générer, à partir de la position optimale des fibres, une image représentative de la microstructure complète. L'interphase de  $PyC$  et la matrice  $SiC$  sont modélisés comme des dépôts concentriques à partir de la surface des fibres. Les épaisseurs des dépôts sont choisies à partir de mesures expérimentales, environ  $1 \mu m$  pour l'interphase et  $2.5 \mu m$  pour la matrice. A partir de l'image obtenue, les limites des différentes phases (fibres, interphase, matrice, porosité) sont extraites par analyse d'image. On obtient ainsi une description géométrique des frontières des différentes entités de la microstructure. Un maillage éléments finis est ensuite généré à partir de ce modèle géométrique à l'aide du mailleur bidimensionnel *BL2D - V1*.

Des précautions particulières sont prises afin d'assurer la périodicité du maillage.

L'approche par optimisation de la covariance permet donc de construire des cellules élémentaires périodiques, représentatives de la microstructure de référence, en contrôlant le niveau d'information dont on souhaite rendre compte.

Sur la figure (FIG.16), le maillage simplifié utilisé pour la modélisation de l'oxydation des matériaux composites MAC est présenté. Nous avons choisi un nombre de fibres  $N = 5$  et 2 couches de matrice inerte  $SiC$  concentriques. La couche de matrice réactive  $B_4C$  est située entre les deux couches de  $SiC$ .

La dimension du maillage est de  $625 \mu m$  en abscisse et de  $625 \mu m$  également en ordonnée. Il est composé de 14516 éléments triangulaires (7478 sommets et 21993 arêtes) et est non-structuré.

La localisation et la taille de la fissure sont choisies directement sur le maillage.

### 3 Cas-tests pour l'oxydation sur maillage réduit

Nous allons à présent nous intéresser à quelques cas-tests simples pour valider le schéma numérique choisi.

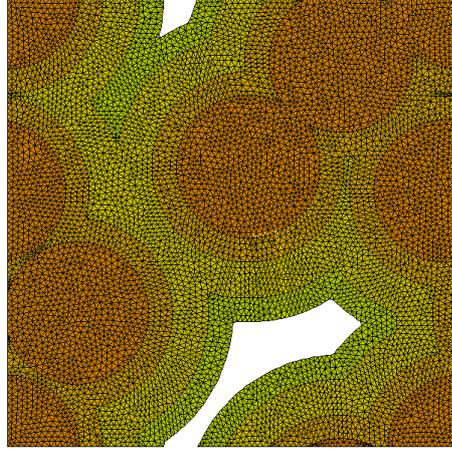


Figure 16: Maillage simplifié d'un composite MAC.

### 3.1 Maillage simplifié réduit

Le maillage utilisé ici est le rectangle présenté dans la section (2.3.1).

Il s'agissait d'un maillage rectangulaire composé de 80 éléments rectangulaires réguliers (54 sommets, 26 arêtes).

Les couches de matrices sont alternées, et nous choisissons 2 couches de matrices inertes entourant une couche de matrice réactive. La partie gauche du rectangle est considérée comme étant la zone de la fibre, et la partie droite comme la zone extérieure. La fissure est choisie horizontale, au centre du rectangle; elle débute du côté de la zone extérieure et finit à la zone fibre.

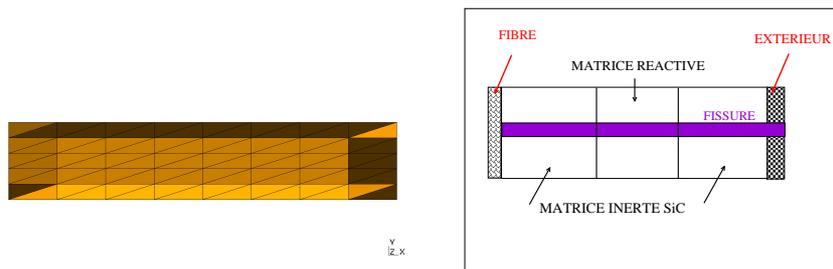


Figure 17: Maillage réduit d'un composite MAC.

### 3.2 Premier cas-test: l'équation de diffusion 2D

Nous considérons l'équation de diffusion suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} + D\vec{\Delta}U = 0, \quad (1)$$

avec  $D$  un coefficient de diffusion (on choisira le coefficient  $D_{O_2}^g$  du problème d'oxydation) et  $U(x, y, t)$ .

La solution exacte de cette équation est connue

$$U(x, y, t) = A \frac{e^{-\frac{(x^2+y^2)}{4Dt}}}{4\pi Dt}, \quad (2)$$

$A$  étant une constante déterminée par les conditions initiales.

Nous pourrons ainsi comparer la solution  $U$  calculée et la solution  $U$  exacte.

### 3.2.1 Initialisation de la C sur le bord droit

Pour ce premier cas-test, nous initialisons la variable  $U$  sur le bord droit du maillage. La valeur initiale de  $U$  est donc

$$U(x, y, 0) = U_0, \text{ si } (x, y) \in \text{bord droit} \quad (3)$$

$$U(x, y, 0) = 0, \text{ sinon.} \quad (4)$$

Sur les figures FIG.18 et 19, la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite au temps  $t = 1$  s (pas de temps choisi  $\Delta t = 0,2$  s) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.20 et 21).

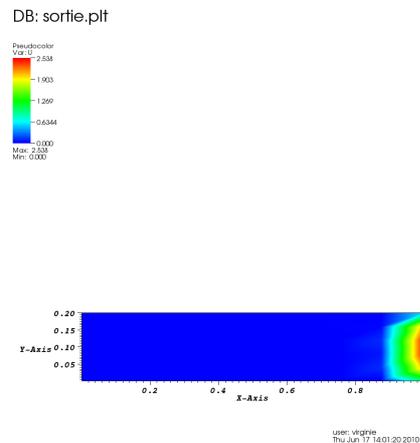


Figure 18: Calcul Euler au temps  $t = 1$  s.

Nous calculons alors la solution  $U$  avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite pour différents temps. Sur les figures (FIG.22 et 23) sont représentées les deux solutions obtenues. Nous observons le bon accord des résultats.

Sur les figure (FIG.24 et 25), la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite au temps  $t = 10$  s (pas de temps choisi  $\Delta t = 0,2$

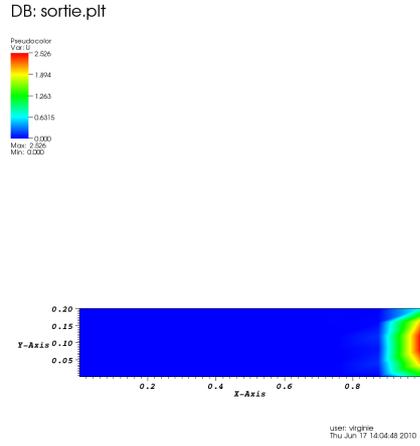


Figure 19: Calcul Gear au temps  $t = 1$  s.

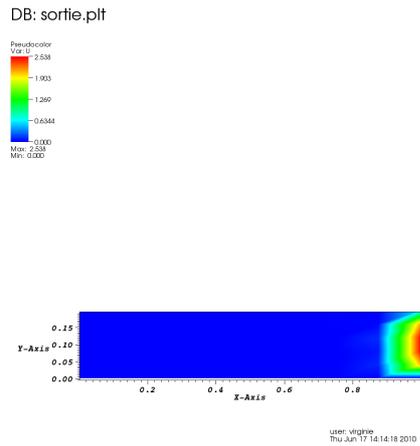


Figure 20: Solution exacte Euler au temps  $t = 1$  s.

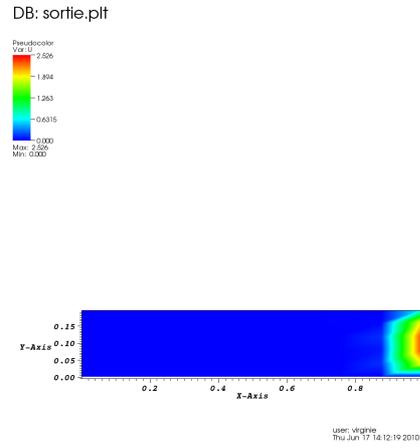
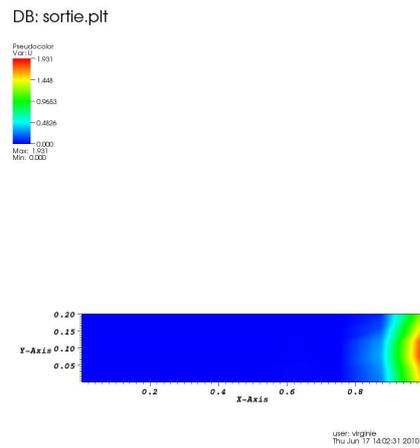
s) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est encore bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.26 et 27).

### 3.2.2 Initialisation de la C au milieu du maillage

Pour ce premier cas-test, nous initialisons la variable  $U$  sur une bande centrale du maillage. La valeur initiale de  $U$  est donc

$$U(x, y, 0) = U_0, \text{ si } (x, y) \in \text{bande centrale} \quad (5)$$

$$U(x, y, 0) = 0, \text{ sinon.} \quad (6)$$

Figure 21: Solution exacte Gear au temps  $t = 1$  s.Figure 22: Calcul Euler au temps  $t = 5$  s.

Sur les figures (FIG.28 et 29), la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite au temps  $t = 5$  s (pas de temps choisi  $\Delta t = 0,2$  s) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.30 et 31).

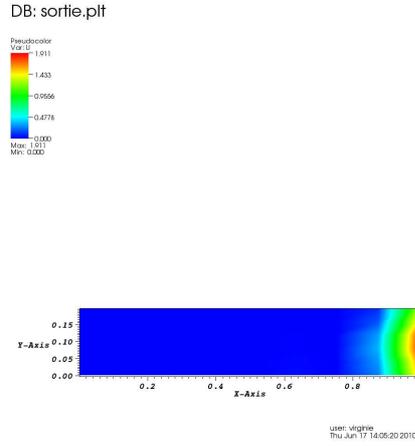


Figure 23: Calcul Gear au temps  $t = 5$  s.

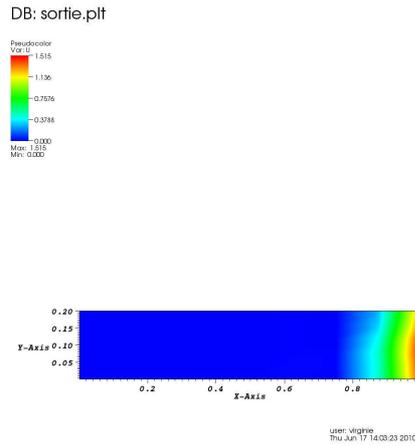


Figure 24: Calcul Euler au temps  $t = 10$  s.

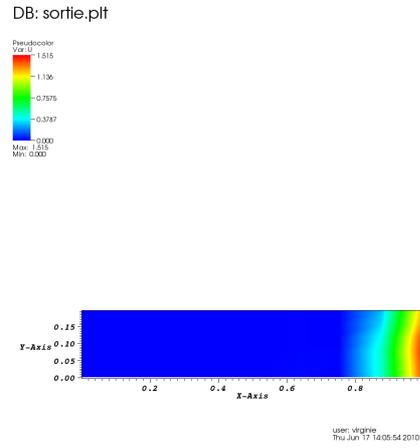
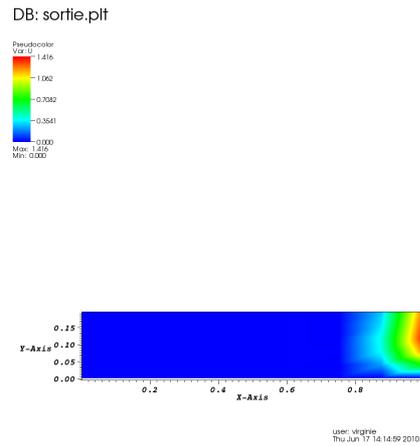
### 3.2.3 Initialisation de la C dans la fissure

Pour ce premier cas-test, nous initialisons la variable  $U$  sur une fissure horizontale que nous avons défini dans le maillage. La valeur initiale de  $U$  est donc

$$U(x, y, 0) = U_0, \text{ si } (x, y) \in \text{fissure} \quad (7)$$

$$U(x, y, 0) = 0, \text{ sinon.} \quad (8)$$

Sur les figures (FIG.32 et 33), la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite au temps  $t = 1$  s (pas de temps choisi  $\Delta t = 0,2$  s) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.34 et 35).

Figure 25: Calcul Gear au temps  $t = 10 s$ .Figure 26: Solution exacte Euler au temps  $t = 10 s$ .

Sur les figures (FIG.36 et 37), la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite et de Gear implicite au temps  $t = 5 s$  (pas de temps choisi  $\Delta t = 0, 2 s$ ) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.38 et 39).

### 3.2.4 Conclusion

La cohérence des résultats obtenus pour la solution de l'équation de diffusion pour les différents schémas en temps utilisés permet de valider le schéma numérique utilisé pour cette équation.

De plus, différents moyens de résolution numérique ont pu être testés pour la

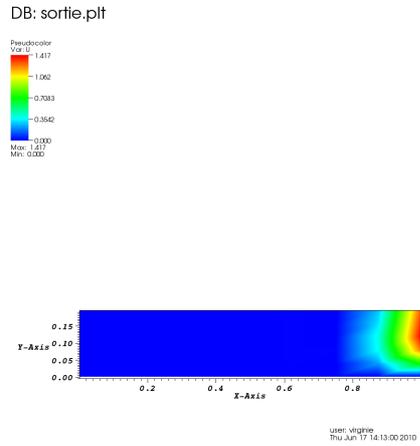


Figure 27: Solution exacte Gear au temps  $t = 10$  s.

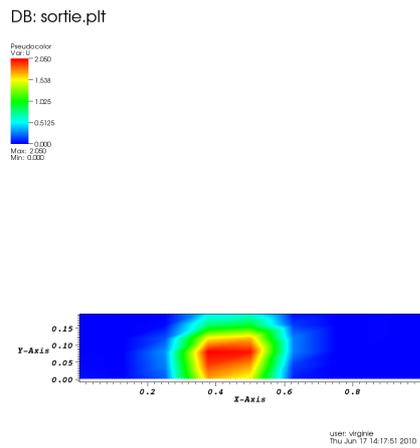
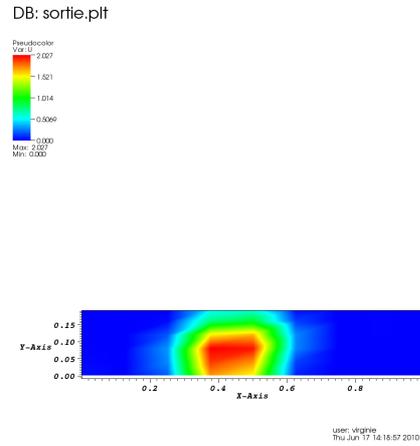
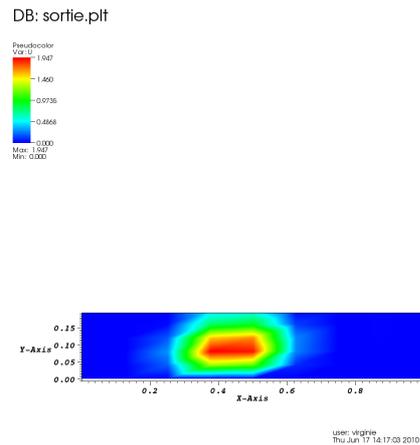


Figure 28: Calcul Euler au temps  $t = 5$  s.

résolution du système matriciel (inversion de la matrice, calcul de la solution): notamment, nous avons utilisé les ressources PASTIX, la fonction LU et la bibliothèque LAPACK. Les résultats obtenus pour  $U$  sont identiques.

Figure 29: Calcul Gear au temps  $t = 5$  s.Figure 30: Calcul Euler au temps  $t = 5$  s.

### 3.3 Deuxième cas-test: l'équation de diffusion 1D

Nous considérons l'équation de diffusion suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} U = 0, \quad (9)$$

avec  $D$  un coefficient de diffusion (on choisira le coefficient  $D_{O_2}^g$  du problème d'oxydation) et  $U(x, t)$ . Lorsque nous considérons la condition initiale  $C(x, 0) = cste$ , la solution exacte de cette équation est connue

$$U(x, t) = U_0(x, t) \left( 1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right), \quad (10)$$

$U_0(x, t)$  étant la solution déterminée par les conditions initiales.

Nous pourrions ainsi comparer la solution  $U$  calculée et la solution  $U$  exacte.

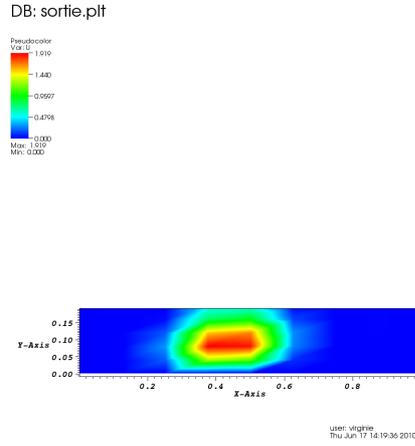


Figure 31: Calcul Gear au temps  $t = 5$  s.

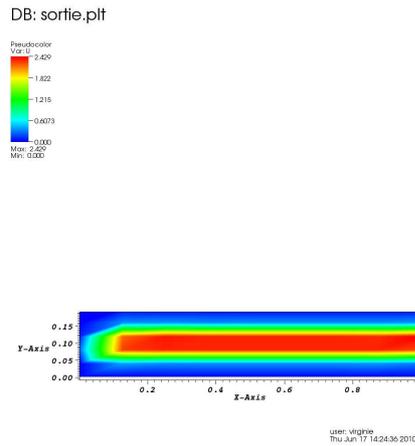


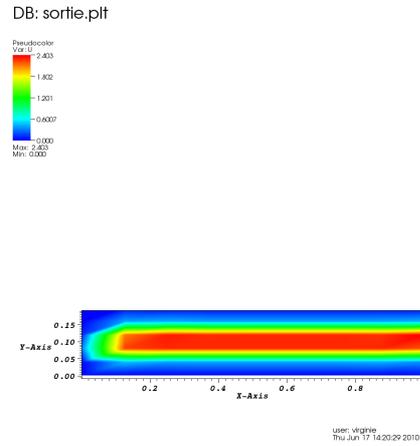
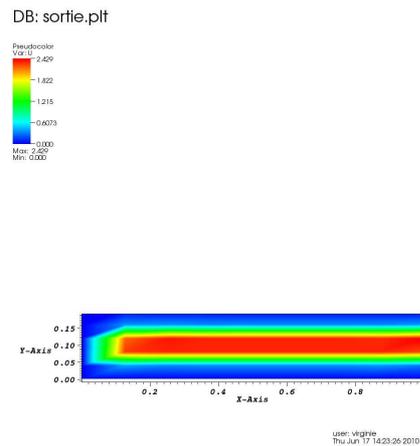
Figure 32: Calcul Euler au temps  $t = 1$  s.

Observons ainsi la diffusion de la solution  $U$  ( correspondant à la concentration  $C$ ) calculée aux temps  $t = 1$  et  $50$  s. La concentration est initialisée sur le bord gauche d'un segment  $x = [0, 1]$  cm (FIG.40).

Le résultat obtenu est cohérent avec le phénomène de diffusion attendu et avec la solution exacte.

Observons à présent la diffusion de la solution  $U$  ( correspondant à la concentration  $C$ ) calculée pour différents temps entre  $t = 1$  et  $10$  s. La concentration est initialisée en créneau au centre d'un segment  $x = [0, 1]$  cm (FIG.41).

Le résultat obtenu est cohérent avec la diffusion attendue dans le cas d'un créneau.

Figure 33: Calcul Gear au temps  $t = 1 s$ .Figure 34: Solution exacte Euler au temps  $t = 1 s$ .

Pour ce dernier cas-test, nous initialisons la variable  $U$  en triangle sur le maillage  $1D$ . La valeur initiale de  $U$  est donc

$$U(x, y, 0) = x, \text{ si } 0 \leq x \leq 0.5 \quad (11)$$

$$U(x, y, 0) = 1 - x, \text{ si } 0.5 \leq x \leq 1. \quad (12)$$

Sur la figure (FIG.32), la solution  $U$  calculée avec la méthode d'Euler implicite (gauche) et de Gear implicite (droite) au temps  $t = 1 s$  (pas de temps choisi  $\Delta t = 0, 2 s$ ) est présentée. La comparaison entre les deux méthodes est bonne, ainsi qu'avec la solution exacte calculée au même temps (FIG.42).

Le même cas-test est réalisé avec la méthode de Gear et donne des résultats identiques.

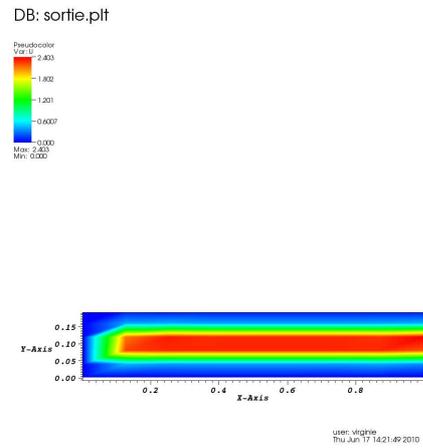


Figure 35: Solution exacte Gear au temps  $t = 1$  s.

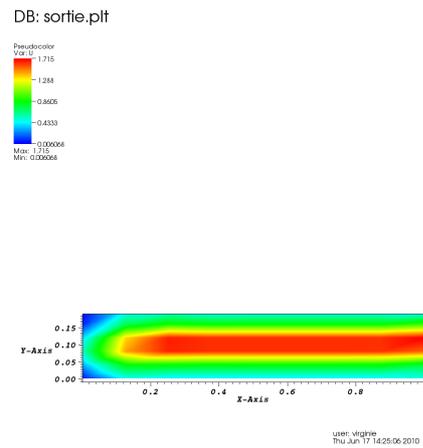


Figure 36: Calcul Euler au temps  $t = 5$  s.

La cohérence des résultats obtenus pour la solution de l'équation de diffusion 1D pour les différents schémas en temps utilisés permet de valider le schéma numérique utilisé pour cette équation.

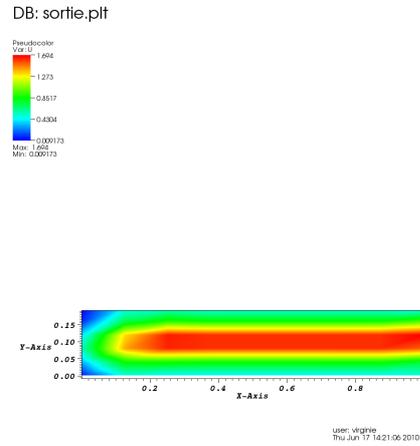


Figure 37: Calcul Gear au temps  $t = 5$  s.

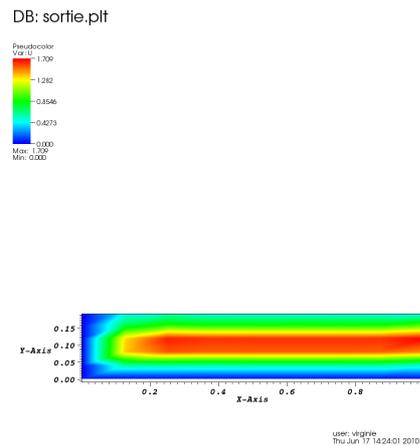
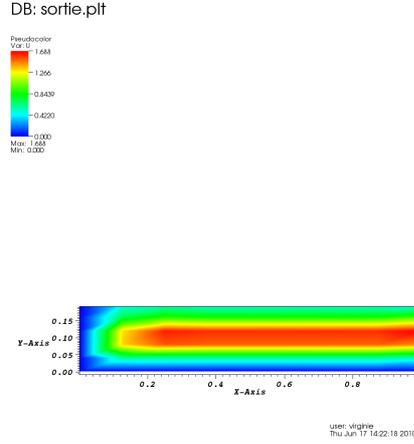
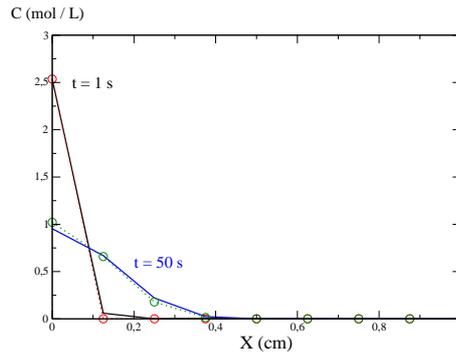


Figure 38: Solution exacte Euler au temps  $t = 5$  s.

## 4 Premiers résultats pour l'oxydation sur maillage simplifié

Le maillage choisi ici est le maillage réaliste mais simplifié (périodique, couches de matrices concentriques et d'épaisseur donnée) présenté dans la section 2.3.2. Le nombre de fibres choisi était  $N = 5$  et nous avons 2 couches de matrice inerte  $SiC$  concentriques, la couche de matrice réactive  $B_4C$  étant située entre les deux couches de  $SiC$ .

Pour rappel, la dimension du maillage est de  $625 \mu m$  en abscisse et de  $625 \mu m$  également en ordonnée. Il est composé de 14516 éléments triangulaires (7478 sommets et 21993 arêtes) et est non-structuré.


 Figure 39: Solution exacte Gear au temps  $t = 5$  s.

 Figure 40: Solution calculée (trait plein) et solution exacte (cercle) Euler aux temps  $t = 1$  et  $50$  s pour une concentration initialisée sur le bord gauche du segment.

#### 4.1 Diffusion: équation de bilan de masse simplifiée

Dans un premier temps, nous regardons le phénomène de diffusion en considérant l'équation de bilan de masse réécrite de la manière suivante:

$$\frac{\partial(h_{O_2}C_{O_2})}{\partial t} = D_{O_2}^g \vec{\nabla} \cdot (h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{O_2} \quad (13)$$

Nous faisons alors le choix de ne regarder que la diffusion de la concentration en oxygène dans la fissure dans un premier temps. Nous faisons ainsi l'hypothèse que la seule variable de l'équation est  $C_{O_2}$ , et donc que  $h_{O_2}$  et  $h_L$  sont deux constantes. Nous prendrons pour ce cas  $h_{O_2} = e_f$  et  $h_L = e_f/100$ ,  $e_f$  étant l'épaisseur de la fissure. Celle-ci est dans un premier temps choisie relativement large  $e_f = 18 \mu m$ , puis de manière plus réaliste  $e_f = 3 \mu m$  afin de voir l'influence de ce paramètre.

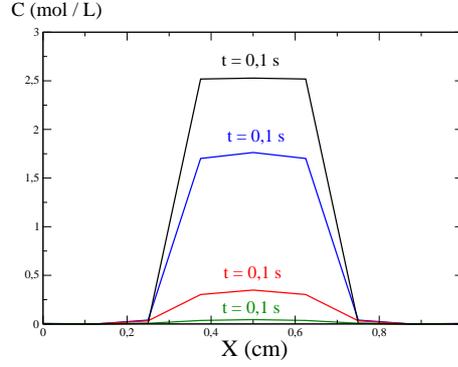


Figure 41: Solution calculée Euler aux temps  $t = 1$  et  $5$  s.

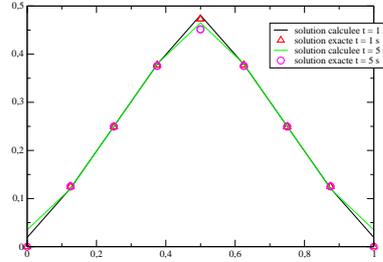


Figure 42: Solution calculée (trait plein) et solution exacte (symboles) Euler aux temps  $t = 1$  et  $5$  s.

L'équation (13) se réécrit alors comme

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = \frac{D_{O_2}^g h_{O_2}}{h_{O_2}} \Delta C_{O_2} - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6 h_{O_2} h_L} C_{O_2} = D_{O_2}^g \Delta C_{O_2} - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6 e_f^2 / 100} C_{O_2} \quad (14)$$

L'écriture de cette équation sous forme variationnelle donne

$$\begin{aligned} \sum_{j \in I} \left( \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} \right)_j &= - \sum_{j \in I} \left( \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i d\Omega \right) (D_{O_2}^g C_{O_2})_j \\ &\quad - \sum_{j \in I} \left( \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6 e_f^2 / 100} C_{O_2} \right)_j + \left( \frac{1}{e_f} CL \right)_j \end{aligned}$$

Ce système s'écrit sous la forme matricielle

$$M \left( \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} \right) + K (D_{O_2}^g C_{O_2}) = MF$$

où  $K$  est la matrice de raideur et  $M$  la matrice de masse élémentaire;  $F$  est le vecteur second-membre de composantes :

$$F_j = - \left( \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6 e_f^2 / 100} C_{O_2} \right)_j + \left( \frac{1}{e_f} CL \right)_j$$

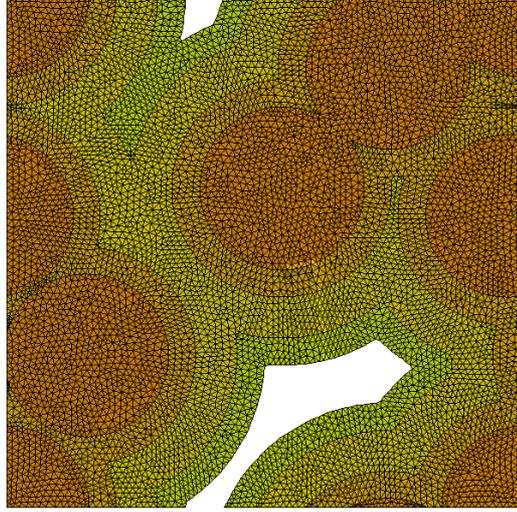


Figure 43: Maillage simplifié d'un composite MAC.

où l'on reconnaît un terme (CL), intégrale curviligne, provenant des conditions aux limites de Neumann.

Dans ce test, nous ne prendrons pas en compte de CL particulières. Ainsi, le second membre s'écrit simplement

$$F_j = -\left(\Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f^2/100} C_{o_2}\right)_j$$

En considérant une discrétisation temporelle suivant la méthode d'Euler implicite, nous obtenons

$$[M + \Delta t D_{O_2}^g K] C_{o_2}^{n+1} = M C_{o_2}^{n+1} + M F \Delta t$$

et suivant la méthode de Gear

$$\left[\frac{3}{2}M + \Delta t D_{O_2}^g K\right] C_{o_2}^{n+1} = 2M C_{o_2}^{n+1} - \frac{1}{2}M C_{o_2}^{n-1} + M F \Delta t$$

Etant donné la taille relativement importante du maillage, nous utilisons pour l'inversion de la matrice  $[M + \Delta t D_{O_2}^g K]$  la ressource PASTIX.

Sur les figures suivantes FIG. 44, 45 et FIG. 46, 47 sont représentées les solutions  $C_{O_2}$  obtenues pour deux temps différents ( $t = 1$  et  $10$  s) pour deux épaisseurs de fissure considérées:  $e_f = 18 \mu m$  (FIG. 44 et 45) et  $e_f = 3 \mu m$  (FIG. 46 et 47).

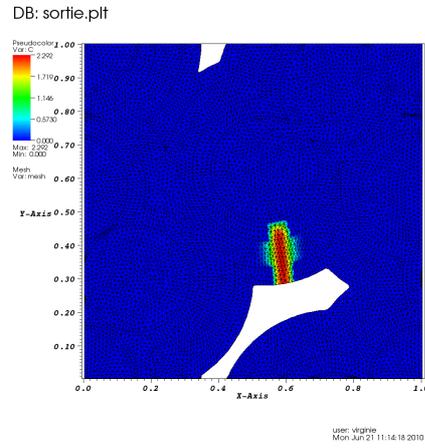


Figure 44: Phénomène de diffusion dans la fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

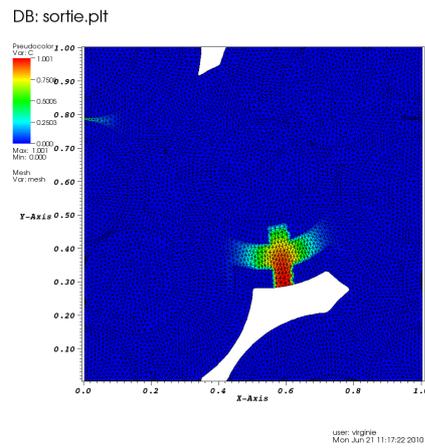


Figure 45: Phénomène de diffusion dans la fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

Nous observons bien que la concentration en oxygène dans la fissure décroît lorsque le temps augmente, et est d'autant plus faible que l'épaisseur de la fissure est petite. De plus, nous observons bien une propagation de l'oxygène dans le domaine réactif.

Nous rappelons que les CL ne sont pas ici prises en compte, et donc qu'il n'y a pas d'apport d'oxygène avec le domaine extérieur.

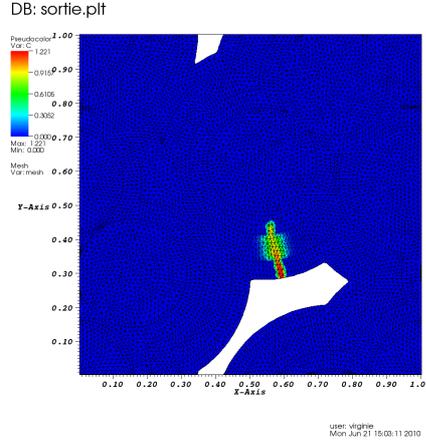


Figure 46: Phénomène de diffusion dans la fissure d'épaisseur  $3 \mu\text{m}$  au temps  $t = 1 \text{ s}$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 \text{ s}$ ).

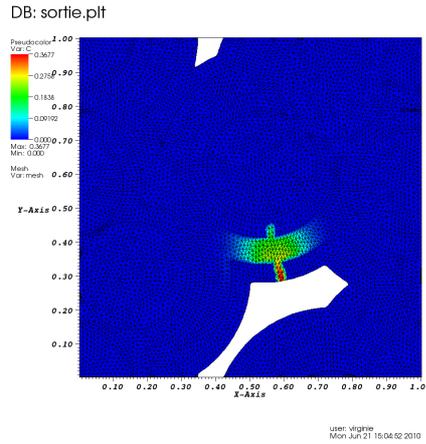


Figure 47: Phénomène de diffusion dans la fissure d'épaisseur  $3 \mu\text{m}$  au temps  $t = 10 \text{ s}$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 \text{ s}$ ).

## 4.2 Avancée des hauteurs: la concentration est figée

A présent, nous regardons l'évolution des hauteurs  $h_L$  et  $h_{O_2}$  en considérant les équations de bilan de hauteurs réécrite de la manière suivante:

$$\frac{\partial h_{O_2}}{\partial t} = \Phi_r \frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2} + \dot{h} \quad (15)$$

et

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2}, \quad (16)$$

Nous faisons alors le choix de ne regarder que l'évolution de la hauteur disponible d'oxygène  $h_{O_2}$  et de la hauteur de liquide formé  $h_L$ . Nous faisons ainsi l'hypothèse que ces hauteurs sont les seules variables du problème, et donc que  $C_{O_2}$  est constante et fixée ( $C_{O_2} = C_{O_2}^e$ ).

L'épaisseur de la fissure est dans un premier temps choisie relativement large  $e_f = 18 \mu m$ , puis de manière plus réaliste  $e_f = 3 \mu m$  afin de voir l'influence de ce paramètre.

Rappelons que nous avons réécrit ces équations avec le changement de variables

$$X = \frac{1}{h_L}$$

et

$$Y = \frac{1}{h_P}$$

afin de s'affranchir du comportement divergent des équations pour les faibles valeurs des variables (i.e. proches de 0). Ce changement de variable revenait donc à résoudre

$$\frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h}, \quad (17)$$

et

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{o_2}. \quad (18)$$

Les équations (17) et (18) se réécrivent sous forme variationnelle comme

$$\Sigma_{j \in I} \left( \int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} \right)_j = \Sigma_{j \in I} \left( \int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h} \right)_j$$

et

$$\Sigma_{j \in I} \left( \int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \frac{\partial X}{\partial t} \right)_j = -\Sigma_{j \in I} \left( \int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left( \Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{o_2} \right)_j$$

ce qui donne sous forme matricielle

$$M \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = M \left( \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h} \right) = M F_1$$

$$M \frac{\partial X}{\partial t} = -M \left( \Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{o_2} \right) = M F_2$$

$M$  étant la matrice de masse élémentaire,  $F_1$  le second-membre de l'équation (17) et  $F_2$  celui de l'équation (18).

En considérant une discrétisation temporelle suivant la méthode d'Euler implicite, nous obtenons

$$[M] h_{o_2}^{n+1} = M h_{o_2}^{n+1} + M F_1 \Delta t$$

$$[M] h_L^{n+1} = M h_L^{n+1} + M F_2 \Delta t$$

et suivant la méthode de Gear

$$\left[\frac{3}{2}M\right]h_{O_2}^{n+1} = 2Mh_{O_2}^{n+1} - \frac{1}{2}Mh_{O_2}^{n-1} + MF_1\Delta t$$

$$\left[\frac{3}{2}M\right]h_L^{n+1} = 2Mh_L^{n+1} - \frac{1}{2}Mh_L^{n-1} + MF_2\Delta t$$

Sur les figures suivantes (FIG. 48 à 55) sont représentées les solutions  $h_{O_2}$  et  $h_L$  obtenues pour deux temps différents ( $t = 1$  et  $10$  s) pour deux épaisseurs de fissure considérées:  $e_f = 18 \mu m$  (FIG. 48, 49 et FIG. 50, 51) et  $e_f = 3 \mu m$  (FIG. 58, 59 et FIG. 54, 55).

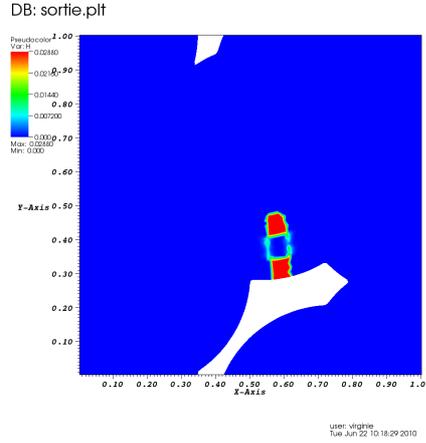


Figure 48: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1$  s (pas de temps  $\Delta t = 0, 2$  s).

Nous observons bien que la hauteur disponible en oxygène dans la fissure décroît lorsque le temps augmente, et que la hauteur de liquide formé croît simultanément dans le domaine fissure-zone réactive.

### 4.3 Modèle général: concentration et hauteurs variables

Finalement, nous regardons le modèle général: les hauteurs  $[h_L, h_{O_2}, h_P]$  et la concentration en oxygène  $C_{O_2}$  sont variables. On considère les équations de

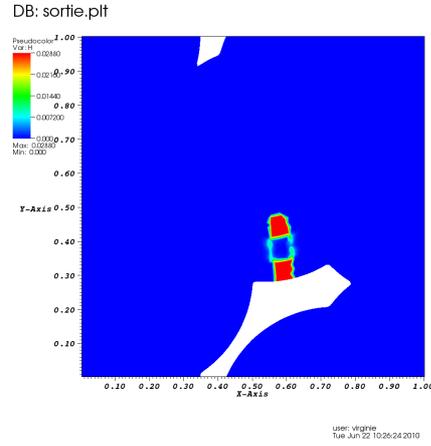


Figure 49: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu\text{m}$  au temps  $t = 10 \text{ s}$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 \text{ s}$ ).

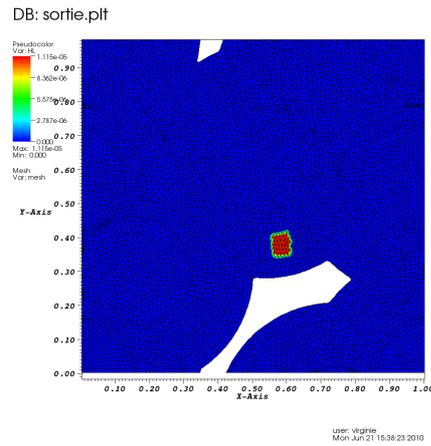


Figure 50: Evolution de la hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu\text{m}$  au temps  $t = 1 \text{ s}$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 \text{ s}$ ).

bilan de hauteurs et du bilan de masse:

$$\frac{\partial(h_{O_2}C_{O_2})}{\partial t} = D_{O_2}^g \vec{\nabla} \cdot (h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{O_2}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial h_{O_2}}{\partial t} = \Phi_r \frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2} + \dot{h}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{O_2}. \quad (22)$$

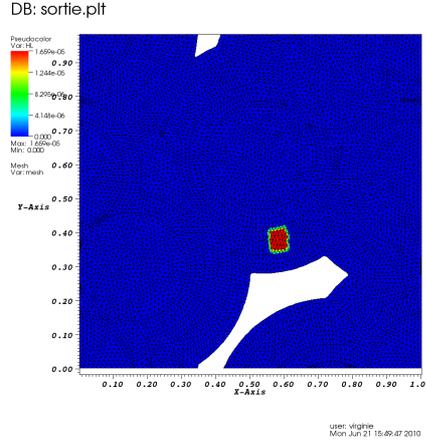


Figure 51: Evolution de la hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

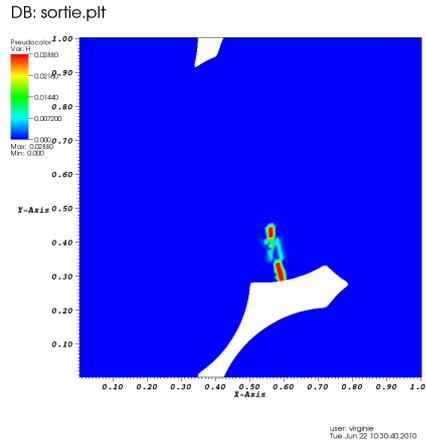


Figure 52: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

L'épaisseur de la fissure est dans un premier temps choisie relativement large  $e_f = 18 \mu m$ , puis de manière plus réaliste  $e_f = 3 \mu m$  afin de voir l'influence de ce paramètre.

Rappelons que nous avons réécrit les équations pour l'évolution des hauteurs avec le changement de variables

$$X = \frac{1}{h_L}$$

et

$$Y = \frac{1}{h_P}$$

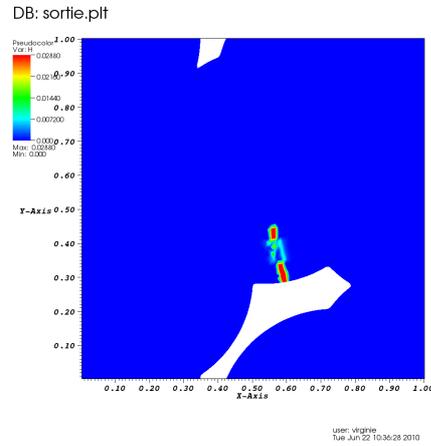


Figure 53: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

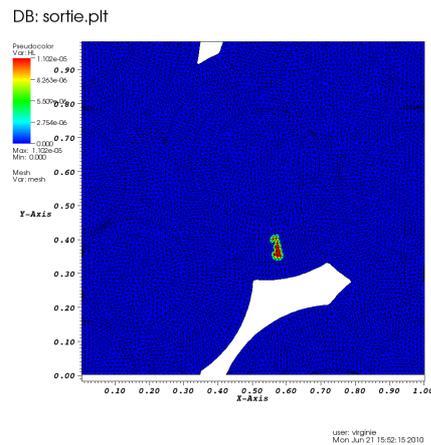


Figure 54: Evolution de la hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

afin de s'affranchir du comportement divergent des équations pour les faibles valeurs des variables (i.e. proches de 0). Ce changement de variable revenait donc à résoudre:

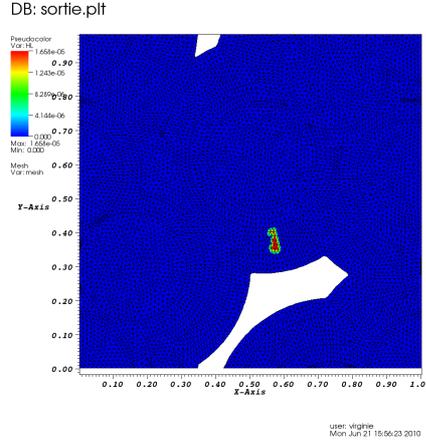


Figure 55: Evolution de la hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0, 2 s$ ).

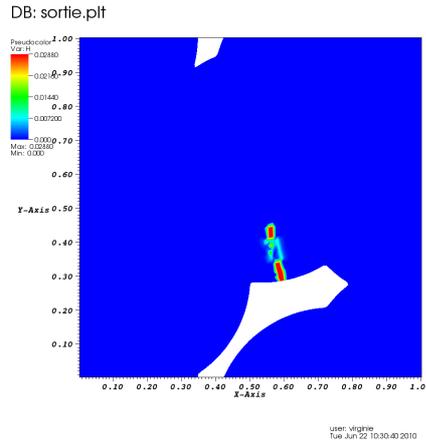


Figure 56: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0, 2 s$ ).

$$\frac{\partial(h_{O_2} C_{O_2})}{\partial t} = D_{O_2}^g \vec{\nabla} \cdot (h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6} X C_{O_2}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial h_{O_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{O_2} + \dot{h}, \quad (24)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{O_2}, \quad (25)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -V_P^m D_{O_2}^g Y^3 C_{O_2}. \quad (26)$$

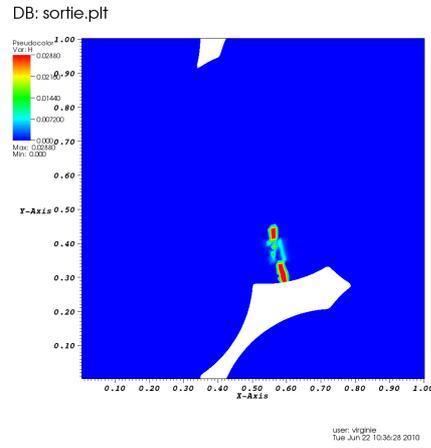


Figure 57: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

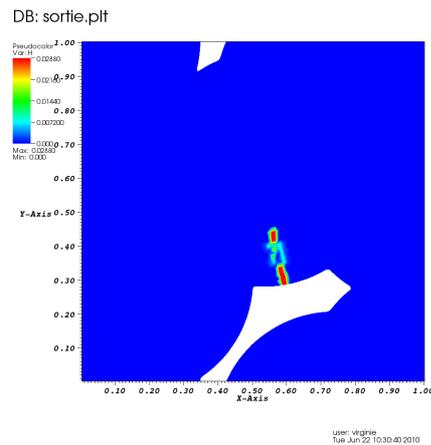


Figure 58: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

Ces équations sont alors réécrites sous forme variationnelle comme précédemment.

#### 4.3.1 Epaisseur forte de la fissure: $e_f = 18 \mu m$

Sur les figures suivantes FIG. 63 à FIG. ?? sont représentées les solutions  $C_{O_2}$ ,  $h_{O_2}$ ,  $h_L$  et  $h_P$  obtenues pour différents temps ( $t = 1, 5$  et  $10 s$ , pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ) pour l'épaisseur de fissure  $e_f = 18 \mu m$  considérée.

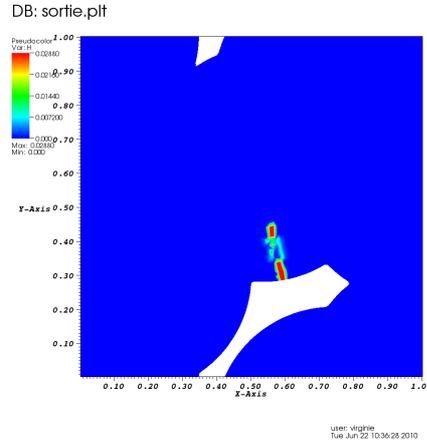


Figure 59: Evolution de la hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 10 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ).

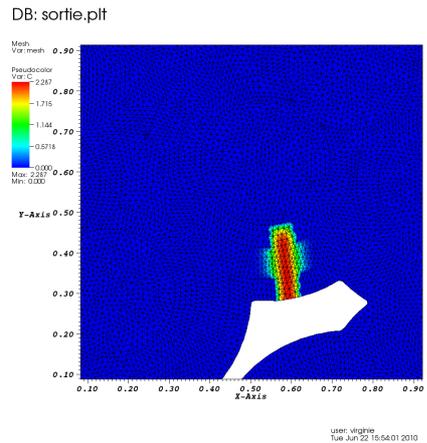


Figure 60: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

Nous observons bien la diffusion de l'oxygène dans la fissure et la zone réactive au cours du temps.

La concentration en oxygène  $C_{O_2}$  chute dans la fissure lorsque celle-ci n'est pas alimentée par l'extérieur (concentration initiale égale à la concentration extérieure dans la fissure fixée simplement).

La hauteur en oxygène disponible  $h_{O_2}$  diminue dans le domaine zone réactive - fissure, comme prédit par le modèle. En effet, la hauteur de liquide formé  $h_L$  croît quant à elle sur le même intervalle de temps et le liquide remplace alors peu à peu l'oxygène sous forme gazeuse. L'oxygène est alors dissous dans le

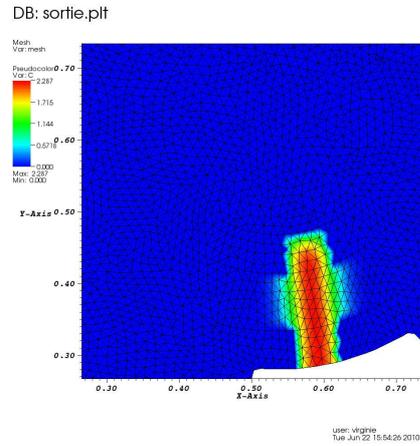


Figure 61: Concentration en oxygène vue grossie  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu\text{m}$  au temps  $t = 1 \text{ s}$

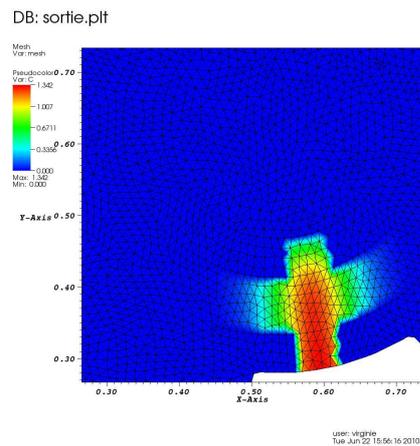


Figure 62: Concentration en oxygène en vue grossie  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu\text{m}$  au temps  $t = 5 \text{ s}$ .

liquide.

Dans le domaine zone inerte - fissure, la hauteur en oxygène disponible reste fixe et déterminée par l'épaisseur de la fissure. Nous observons qu'au bout du temps  $t = 10 \text{ s}$ , la hauteur d'oxygène disponible dans le domaine zone réactive - fissure est très faible; on peut alors supposer que le liquide remplit la zone de la fissure attenante au domaine réactif du fait de l'expansion volumique du liquide formé par la matrice réactive consommée.

Nous observons bien ce remplissage du domaine zone réactive - fissure sur la figure (FIG.71); au temps  $t = 1 \text{ s}$ , la hauteur de liquide formée est au maximum  $h_L = 0,4 \mu\text{m}$  à l'interface fissure/zone réactive, et atteint  $2 \mu\text{m}$  au temps  $t = 10 \text{ s}$ .

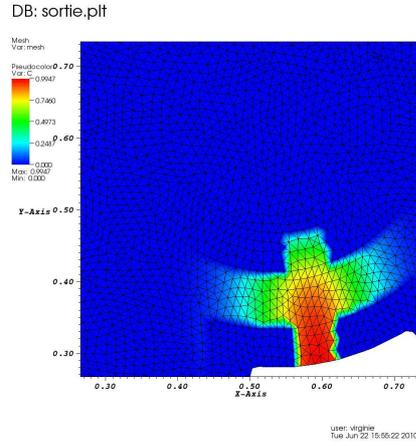


Figure 63: Concentration en oxygène en vue grossie  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  aux temps  $t = 10 s$ .

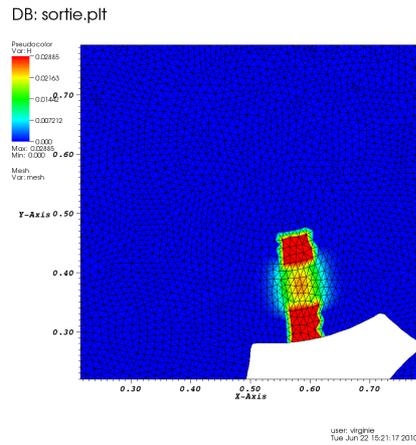


Figure 64: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

La hauteur de  $pyC$  consommée à l'interface fissure-fibre croît elle aussi avec le temps; au temps  $t = 1 s$ , elle est de  $h_P = 0,06 \mu m$ , et de  $0,08 \mu m$  au temps  $t = 10 s$ .

#### 4.3.2 Epaisseur faible de la fissure: $e_f = 3 \mu m$

Sur les figures suivantes FIG. 75 à FIG. 77 sont représentées les solutions  $C_{O_2}$ ,  $h_{O_2}$  et  $h_L$  obtenues au temps  $t = 1 s$  (pas de temps  $\Delta t = 0,2 s$ ) pour l'épaisseur de fissure  $e_f = 3 \mu m$ .

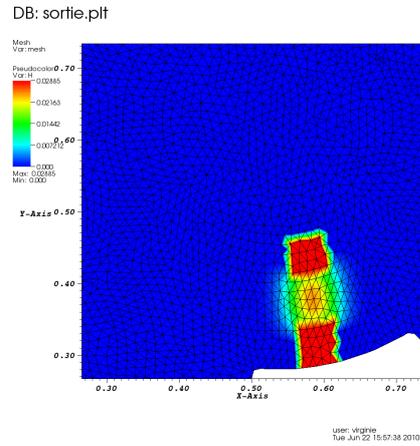


Figure 65: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

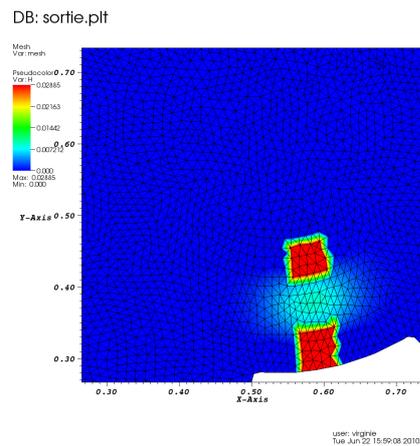


Figure 66: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 5 s$

Les mêmes conclusions peuvent être faites en ce qui concerne les phénomènes physiques observés pour cette petite épaisseur de fissure.

En effet, nous observons encore la diffusion de l'oxygène dans la fissure, et ainsi une diminution de la concentration et de la hauteur en oxygène disponible, mais une augmentation de la hauteur de liquide formé au niveau du domaine fissure - zone réactive. La hauteur de  $pyC$  consommée à l'interface fibre - fissure augmente aussi au cours du temps.

La diffusion de l'oxygène dans la fissure de faible épaisseur est plus rapide, et ainsi la concentration en oxygène chute plus vite. Il en est de même pour la hauteur d'oxygène disponible.

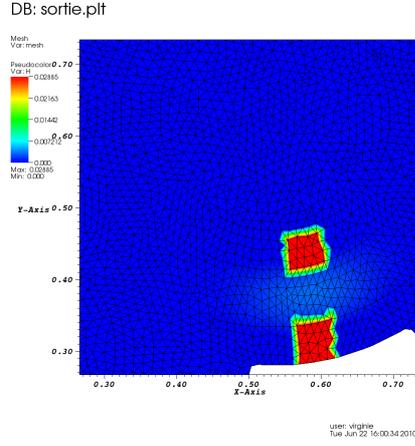


Figure 67: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 10 s$

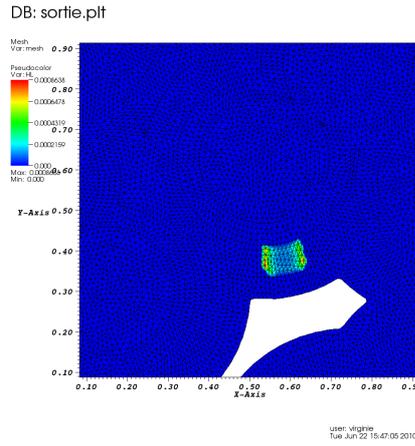


Figure 68: Hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

### 4.3.3 Prise en compte des conditions aux limites

Sur les figures suivantes (FIG.78 et 79) sont représentées les solutions  $C_{O_2}$  et  $h_L$  obtenues au temps  $t = 1 s$  pour l'épaisseur de fissure  $e_f = 3 \mu m$  en prenant en compte les CL sur les frontières fibre/fissure  $\delta\Omega_{fi}$  et extérieur/fissure  $\delta\Omega_e$

$$-D_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2} \cdot \vec{n}_{fe} = \frac{D_{O_2}^g}{\delta} (C_{O_2} - C_{O_2}^e) \quad (27)$$

$$D_{O_2}^g h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2} \cdot \vec{n} = -\frac{e_P}{h_P} D_{O_2}^g C_{O_2}. \quad (28)$$

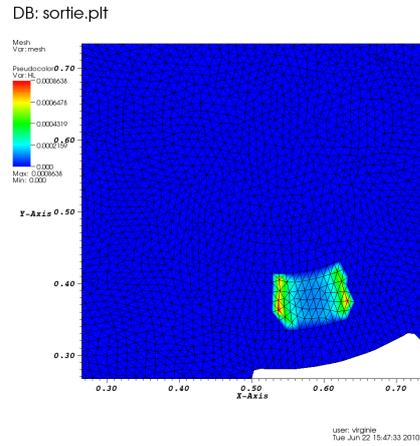


Figure 69: Hauteur de liquide formé  $h_L$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

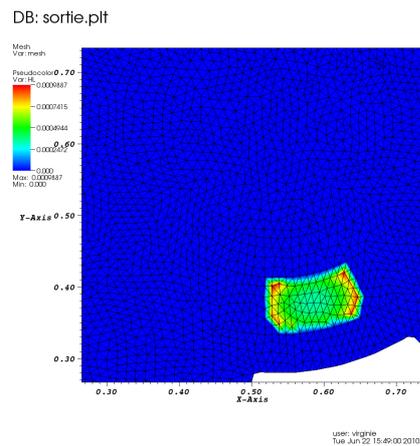


Figure 70: Hauteur de liquide formé  $h_L$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 5 s$

Nous observons que l'alimentation par l'extérieur en oxygène de la fissure due à la prise en compte de la CL sur la frontière fissure - extérieur fait que la concentration en oxygène chute moins vite que dans le cas précédent (sans brancher les CL dans la simulation). Ce résultat est cohérent avec la prédiction des équations.

#### 4.3.4 Modification du coefficient de diffusion

Sur les figures suivantes (FIG.82 à 82) sont représentées les solutions  $C_{O_2}$  et  $h_{O_2}$  obtenues au temps  $t = 1 s$  pour l'épaisseur de fissure  $e_f = 3 \mu m$  en prenant en compte un rapport entre les coefficients de diffusion  $D_{O_2}^g$  et  $D_{O_2}^L$  plus faible.

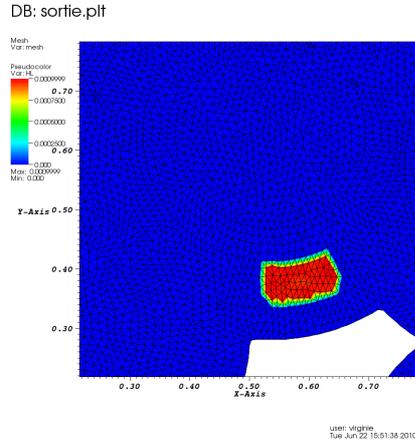


Figure 71: Hauteur de liquide formé  $h_L$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 10 s$

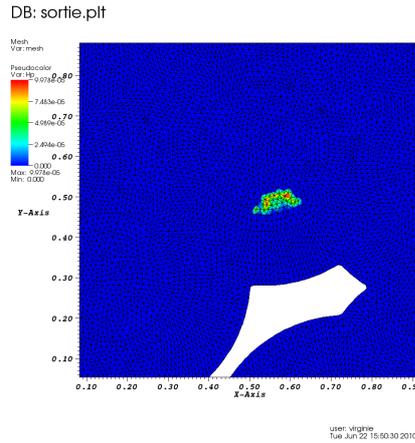


Figure 72: Hauteur de  $pyC$  consommée  $h_P$  pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$ .

En effet, nous avons jusqu'à présent choisi le ratio

$$\frac{D_{O_2}^g}{D_{O_2}^L} = 10^3$$

, qui apportait de la raideur au problème considéré. Nous prenons maintenant la valeur

$$\frac{D_{O_2}^g}{D_{O_2}^L} = 10$$

, soit un facteur 100 par rapport au cas précédent.

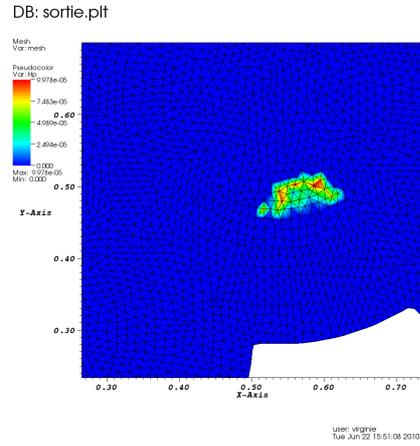


Figure 73: Hauteur de  $pyC$  consommée  $h_P$  en vue grossie pour une fissure d'épaisseur  $18 \mu m$  au temps  $t = 1 s$ .

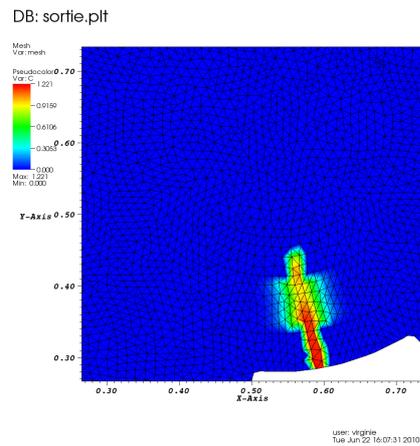


Figure 74: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$

Nous observons alors que la diffusion de l'oxygène dans la phase liquide est plus importante dans le cas  $D_{O_2}^g/D_{O_2}^L = 10$  que dans le cas précédent (i.e.  $D_{O_2}^g/D_{O_2}^L = 1000$ ). Ce résultat est donc tout à fait logique: l'oxygène est davantage diffusé dans la zone où le liquide est formé, et sa concentration chute donc plus vite dans la fissure.

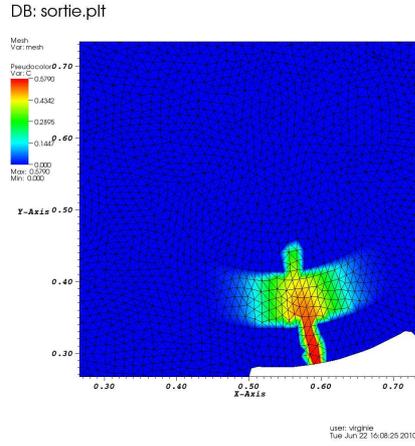


Figure 75: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 5 s$

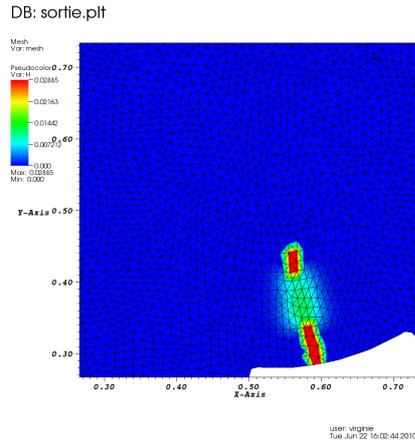


Figure 76: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$ .

#### 4.3.5 Discrétisation temporelle suivant la méthode de Gear

Comme décrit précédemment, la discrétisation temporelle suivant la méthode de Gear donne pour l'équation sur le bilan de masse

$$\left[\frac{3}{2}M + \Delta t D_{O_2}^g K\right] C_{O_2}^{n+1} = 2MC_{O_2}^{n+1} - \frac{1}{2}MC_{O_2}^{n-1} + MF\Delta t$$

et pour les équations sur les bilans de hauteur

$$\left[\frac{3}{2}M\right] H_{L,P,O_2}^{n+1} = 2MH_{L,P,O_2}^{n+1} - \frac{1}{2}MH_{L,P,O_2}^{n-1} + MF'\Delta t$$

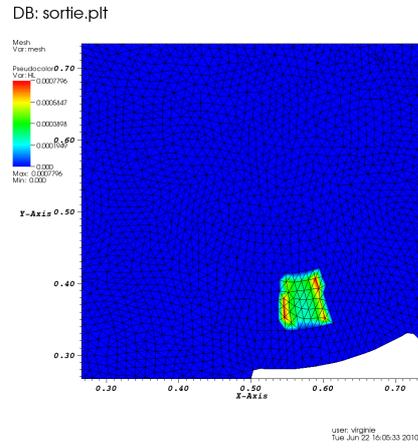


Figure 77: Hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$ .

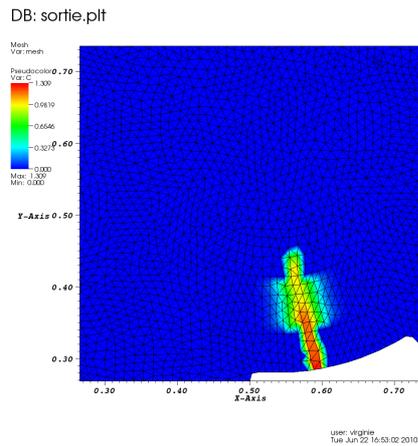


Figure 78: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  en prenant en compte les CL.

Rappelons que cette méthode est particulièrement adaptée aux problèmes raides.

Afin de la mettre en oeuvre dans le code, il convient de modifier le pas de temps pour la première itération. Nous avons donc pour cette itération initiale

$$T_1 = T_0 + \frac{2}{3}\Delta t$$

et les itérations "classiques" ensuite

$$T_{n+1} = T_n \times \Delta t$$

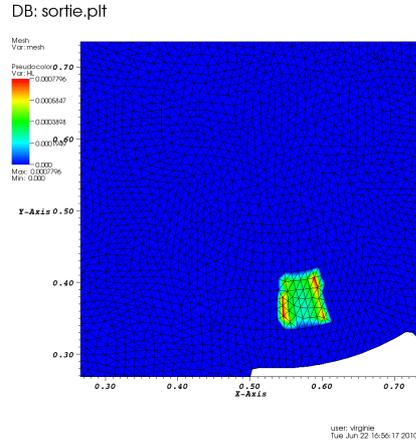


Figure 79: Hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  en prenant en compte les CL.

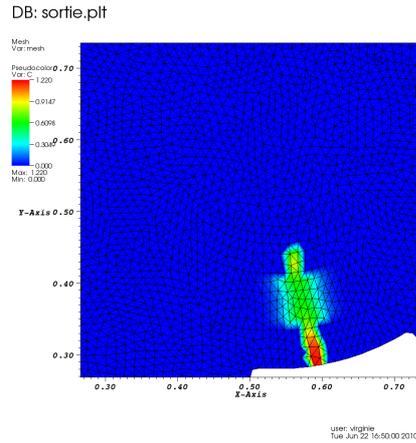


Figure 80: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  pour un rapport faible entre les coefficients de diffusion  $D_{O_2}^g$  et  $D_{O_2}^L$ .

Sur les figures suivantes (FIG. 83 à 85) sont représentées les solutions (en vue zoom avant)  $C_{O_2}$ ,  $h_{O_2}$  et  $h_L$  obtenues au temps  $t = 1 s$  pour l'épaisseur de fissure  $e_f = 3 \mu m$  en utilisant la discrétisation temporelle donnée par la méthode de Gear. Les CL sont prises en compte dans ce cas-test.

Nous observons des résultats très proches de ceux donnés par la méthode d'Euler implicite précédente.

En effet, la valeur maximale dans la fissure de la concentration  $C_{O_2}$  est de  $1,305 mol.L^{-1}$  alors qu'elle était de  $1,309 mol.L^{-1}$  avec la méthode d'Euler, soit une

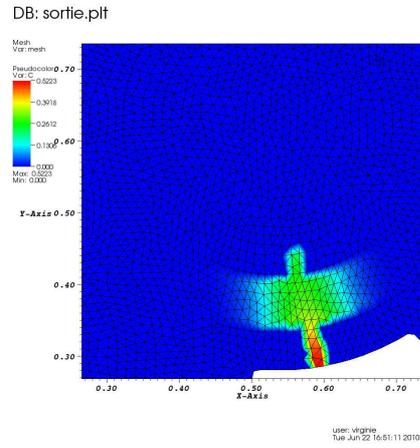


Figure 81: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 5 s$  pour un rapport faible entre les coefficients de diffusion  $D_{O_2}^g$  et  $D_{O_2}^L$ .

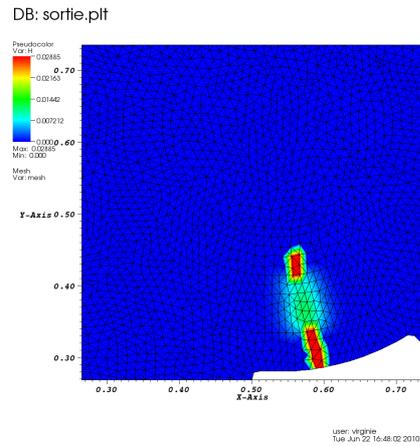


Figure 82: Hauteur d'oxygène disponible  $h_{O_2}$  (zoom) pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1 s$  pour un rapport faible entre les coefficients de diffusion  $D_{O_2}^g$  et  $D_{O_2}^L$ .

différence très faible.

Il en est de même par exemple pour la valeur maximale de liquide formé: nous obtenons  $h_L = 0,46 \mu m$  au lieu de  $0,49 \mu m$  avec la méthode d'Euler, soit encore une différence très faible.

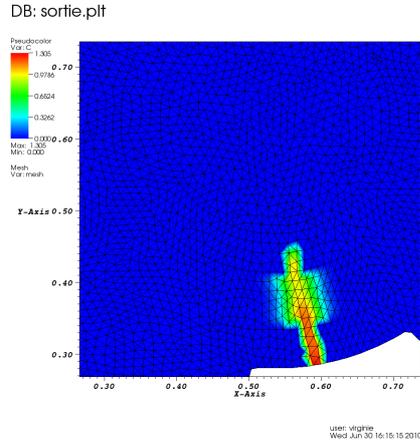


Figure 83: Concentration en oxygène  $C_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 5 s$  en utilisant la discrétisation temporelle donnée par la méthode de Gear.

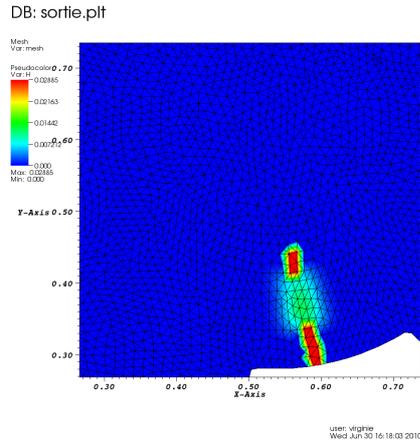


Figure 84: Hauteur disponible en oxygène  $h_{O_2}$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu m$  au temps  $t = 1$  en utilisant la discrétisation temporelle donnée par la méthode de Gear.

## 5 Oxydation des composites MAC: nouveaux cas-tests

Nous venons de présenter:

- comment nous avons obtenus les maillages des composites considérés,
- quelles étaient les hypothèses et les équations proposées pour la modélisation de l'oxydation de ces composites,

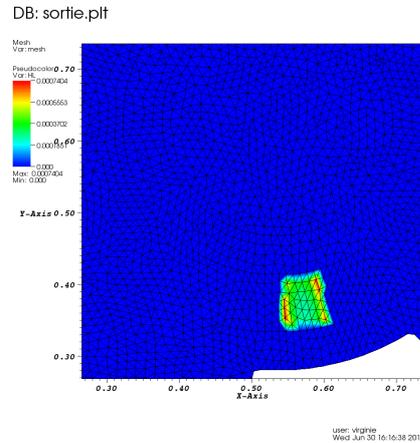


Figure 85: Hauteur de liquide formé  $h_L$  pour une fissure d'épaisseur  $3 \mu\text{m}$  au temps  $t = 1$  en utilisant la discrétisation temporelle donnée par la méthode de Gear.

- un adimensionnement des équations du modèle afin d'étudier la raideur du problème traité,
- quels cas-tests sur maillages simplifiés avaient été faits pour valider la méthode numérique choisie, en  $1D$  et en  $2D$ ,
- les premiers cas-tests sur maillage idéalisé mais réaliste pour le modèle d'oxydation en considérant une fissure (plus ou moins épaisse) qui dallait du domaine extérieur au domaine des fibres, et traversait les couches de matériau inertes et réactives.

Nous allons à présent regarder les résultats obtenus pour la diffusion de l'oxygène dans une fissure plane: tout le matériau est considéré dans le plan de la fissure.

Le coefficient de diffusion de l'oxygène dans le liquide est choisi comme:  $D_{O_2}^L = 10^{-5} D_{O_2}^g$ . La température locale est fixe et vaut, pour cette simulation:  $T = 700^\circ\text{C}$ .

Pour résoudre la partie temporelle du problème, la méthode d'Euler implicite est choisie; comme nous l'avions fait dans le rapport précédent, les équations du modèles ont également été résolues en utilisant la méthode de Gear pour mieux prendre en compte les problèmes de raideur du modèle. Mais comme précédemment, les résultats obtenus avec ces deux méthodes sont relativement proches, et il n'était pas - de mon avis - nécessaire de montrer les résultats des deux méthodes ici.

Les variables du problème sont initialisées de la manière suivante:

- pour la concentration en oxygène  $C_{O_2}$  nous prenons la valeur définie pour le domaine extérieur au matériau  $C_{O_2}^{ext}$ ;

- pour la hauteur d'oxygène disponible nous l'initialisons comme la hauteur de la fissure, donnée fixée que nous faisons varier artificiellement entre 0, 1 et 3  $\mu\text{m}$ ;
- pour la hauteur de liquide formé, nous l'initialisons par une valeur très faible devant 1 (de l'ordre de  $10^{-8}$ ), la valeur 0 posant des problèmes lors de la résolution numérique.

### 5.1 Evolution temporelle des variables du modèle

Nous observons l'évolution en temps des variables du problème: la concentration  $C_{O_2}$  d'oxygène, la hauteur d'oxygène (gaz) disponible  $h_{O_2}$  et la hauteur de liquide formé  $h_l$ .

La grandeur  $h_m$  définie comme  $h_m = h_l + h_{O_2}$  est moins "parlante" sur les graphes et ne sera donc pas montrée ici.

La hauteur de pyrocarbone consommé sur les fibres  $h_P$  étant relativement faible, il est difficile de voir nettement son évolution sur les graphes. Une visualisation logarithmique est en cours d'essai!

Pour se rendre compte de l'influence de la fissure considérée sur l'évolution temporelle des variables, nous allons également faire varier l'épaisseur de la fissure  $e_f$ , entre 3 et 0.1  $\mu\text{m}$ .

#### 5.1.1 Epaisseur de fissure de 3 $\mu\text{m}$

**Evolution de la concentration en oxygène dans la fissure** Sur les figures suivantes, la solution  $C_{O_2}$  représentée est calculée avec la méthode d'Euler implicite aux temps courts  $t = 5$  et 10 (FIG.86 et 87), sans le maillage, puis aux temps plus longs  $t = 100$  et 200 s (FIG.88 et 89), également sans le maillage. Le pas de temps choisi est  $\Delta t = 0,1$  s.

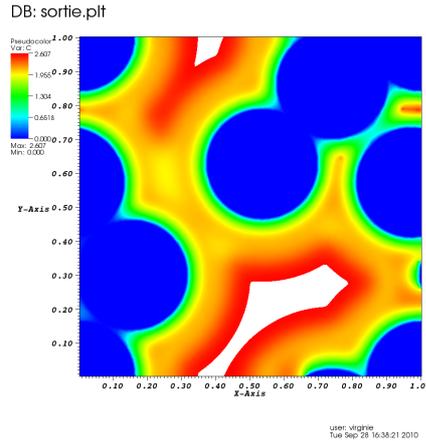
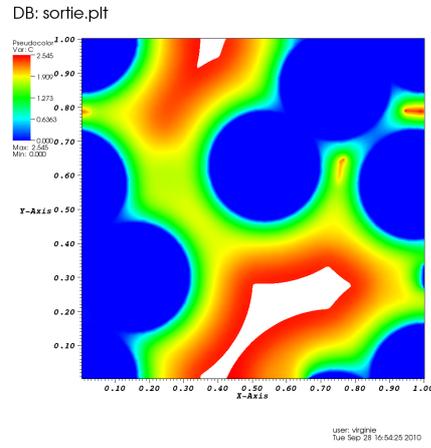
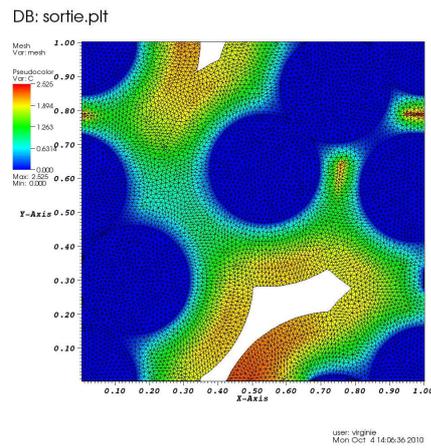


Figure 86: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 5$ , sans le maillage

Figure 87: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 10$  s, sans le maillageFigure 88: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 100$ s

Nous observons bien que la concentration en oxygène dans la fissure décroît lorsque le temps augmente, et est d'autant plus faible que la région est éloignée du bord extérieur. De plus, nous observons bien une propagation de l'oxygène dans le domaine réactif du matériau, jusqu'aux fibres (ronds bleus sur les graphes).

Les résultats obtenus pour cette variables sont en accord avec les phénomènes attendus: aux temps plus longs de la simulation, la concentration en oxygène près des fibres est très faible et ne conserve une valeur non négligeable que dans les régions du matériau proches ou en contact avec le domaine extérieur.

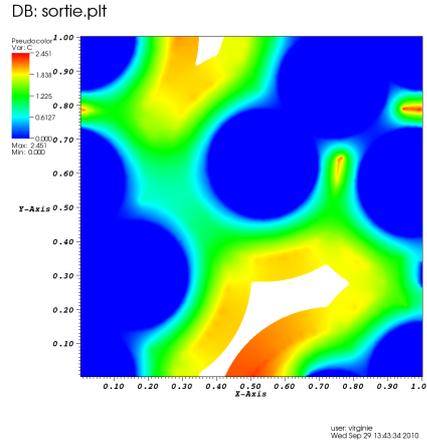


Figure 89: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 200$  s, sans le maillage

**Evolution de la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_{O_2}^g$  (notée  $h_{O_2}$ ) qui représente la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure (FIG.90 à 94). Rappelons que cette variable est fixe et prend la valeur de la hauteur de la fissure  $e_f$  dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation. Ici, la hauteur de fissure considérée est de  $3 \mu m$ ; ce paramètre est adimensionné dans la simulation par la taille du maillage considéré, i.e.  $624 \mu m$ : la hauteur maximale d'oxygène disponible est donc ici de  $4.808 \cdot 10^{-3}$ .

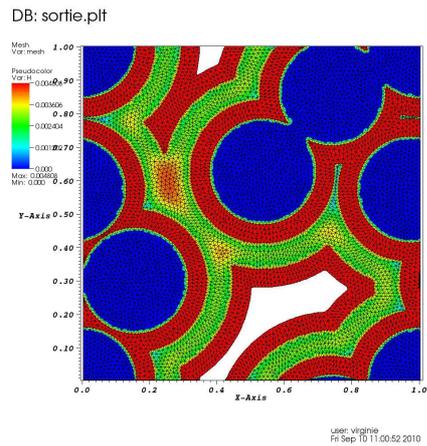
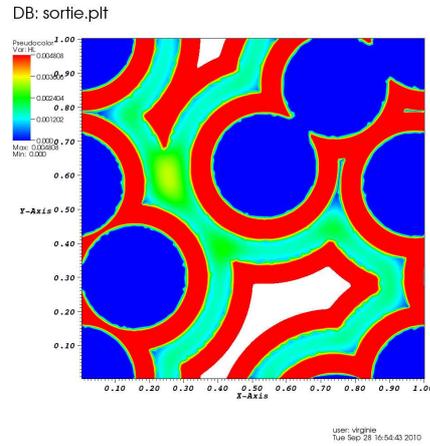
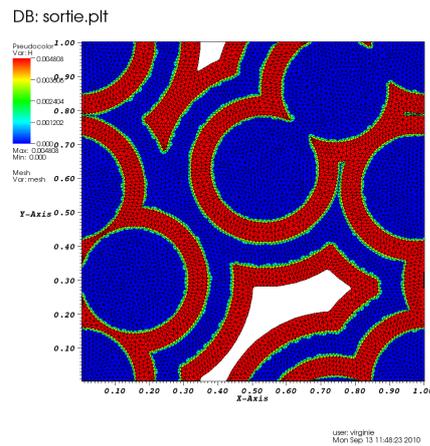


Figure 90: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 5$  s

Figure 91: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 10 s$ Figure 92: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 100 s$ 

Nous observons bien que la hauteur disponible en oxygène dans la zone réactive décroît lorsque le temps augmente, ce qui est en accord avec les résultats attendus. La hauteur  $h_{O_2}$  est fixe et maximale dans la zone inerte (autour des fibres et près du domaine extérieur), qui apparaît en rouge sur ces figures.

Dans le domaine réactif, des zones apparaissent dans lesquelles la hauteur disponible en oxygène est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus faible localement.

De plus, nous observons bien que la hauteur d'oxygène disponible est plus faible dans les "recoins" du domaine réactif (coins apparaissant en bleus, la couleur bleue représentant une valeur de  $h_{O_2}$  presque nulle).

La figure FIG.(92) présentée ici, correspondant au temps  $t = 100 s$ , est "trompeuse" car il semble qu'il n'y ait plus du tout d'oxygène disponible dans la zone réactive. Ceci est dû au fait que la valeur de  $h_{O_2}$  est très faible devant  $e_f$  et semble

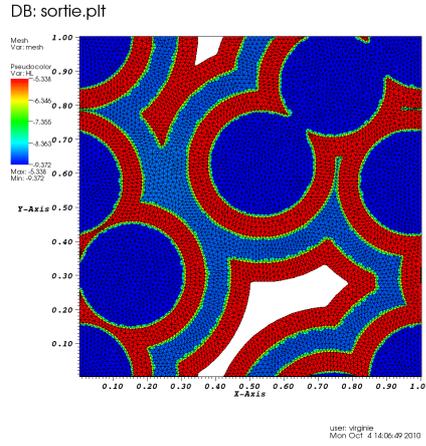


Figure 93: Solution  $\log(h_{O_2})$  au temps  $t = 100$  s

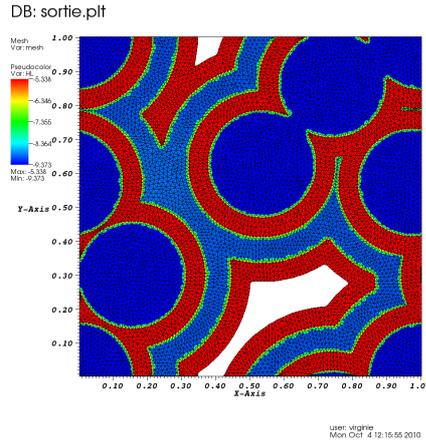


Figure 94: Solution  $\log(h_{O_2})$  au temps  $t = 200$  s

alors nulle. Mais une visualisation en log comme sur la FIG.(93) de droite ou l'étude locale des valeurs de  $h_{O_2}$  montrent qu'il reste encore une faible hauteur d'oxygène disponible. En effet, dans le domaine réactif, dans les zones où précédemment les valeurs de la concentration en oxygène étaient plus faibles (au centre du matériau), nous estimons  $h_{O_2} \sim 0.8 \mu m$ . Aux temps supérieurs (vers  $t \sim 200$  s), ces valeurs sont extrêmement faibles (nous estimons  $h_{O_2} \sim 0.08 \mu m$ ) et nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif (FIG.(94)).

**Evolution de la hauteur de liquide formé dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_l$  qui représente la hauteur de liquide formé dans la fissure. Rappelons que cette variable est nulle dans le domaine

inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation (on considère qu'il n'y a pas de propagation du liquide dans le domaine inerte).

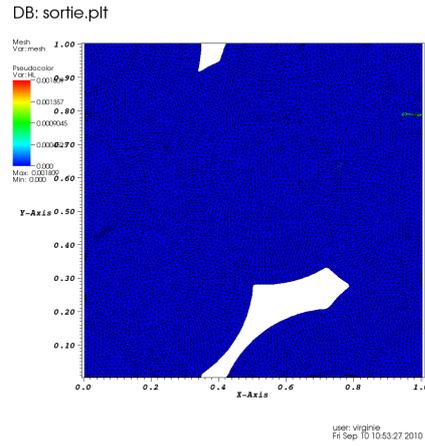


Figure 95: Solution  $h_l$  aux temps  $t = 5$  s

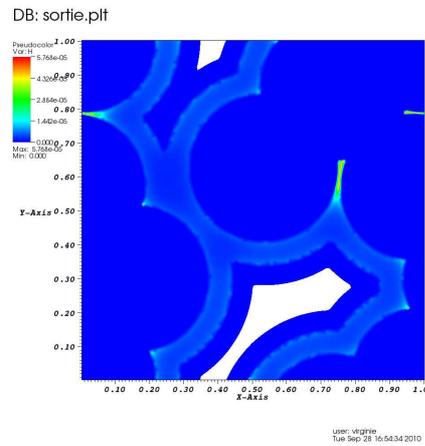


Figure 96: Solution  $h_l$  au temps  $t = 10$  s, sans le maillage)

Nous observons bien que la hauteur de liquide formé dans la zone réactive croît lorsque le temps augmente, ce qui est en accord avec les résultats attendus. La hauteur  $h_l$  est fixe et proche de 0 dans la zone inerte (et dans la zone des fibres), qui apparaît alors en bleu sur ces figures.

Dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur de liquide formé est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la

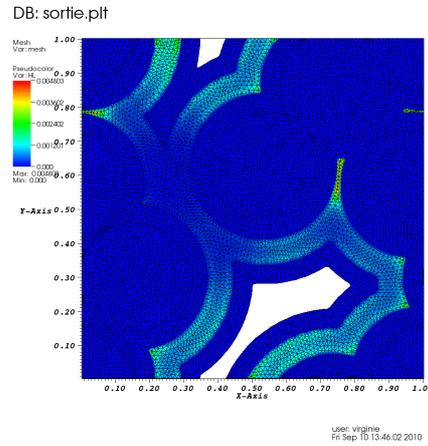


Figure 97: Solution  $h_l$  au temps  $t = 50$  s

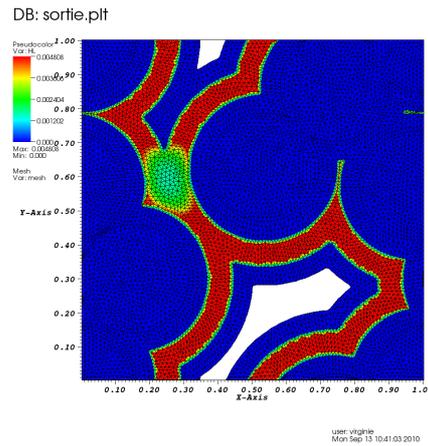


Figure 98: Solution  $h_l$  au temps  $t = 100$  s

concentration d'oxygène plus forte localement et à des endroits en “coin” (zone réactive “coincée” dans les fibres).

Dans les premiers instants, une très faible quantité de liquide est formée en zone réactive comme montré sur les figures (FIG.95 et 96). Nous observons du liquide que très localement, dans les endroits en “coin” mentionnés plus tôt.

Aux temps intermédiaires, représentés sur les figures (FIG.97 et 98), nous observons que du liquide est formé en zone réactive en premier lieu aux endroits où la concentration en oxygène est plus élevée, ce qui est en accord avec les résultats attendus; ainsi, pour le domaine réactif plus éloigné du bord extérieur, l'oxygène met plus de temps à diffuser et on observe que moins de liquide est formé localement. Ainsi, on assiste à la propagation en zone réactive de la

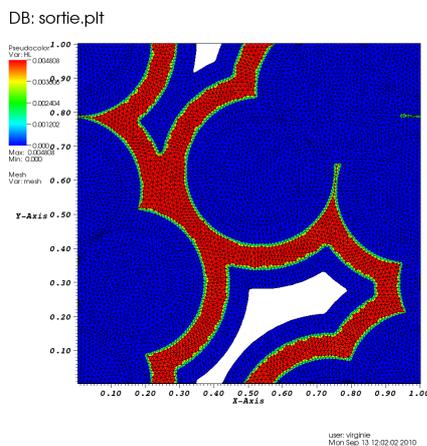


Figure 99: Solution  $h_l$  au temps  $t = 200 s$

formation de liquide. Sur la FIG.(98), le liquide se forme dans tout le domaine réactif, à l'exception d'une "poche" vers le centre du matériau.

En observant la dernière figure (FIG.(99)) présentée ici, correspondant au temps  $t = 200 s$ , nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif.

### 5.1.2 Epaisseur de fissure de $1 \mu m$

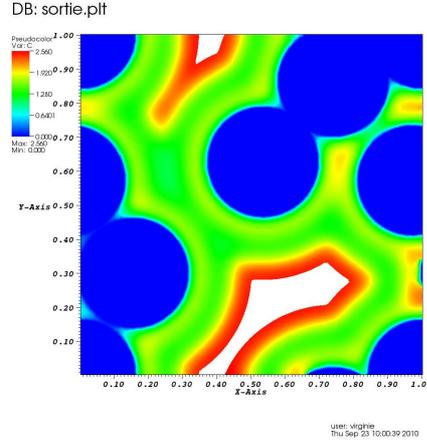
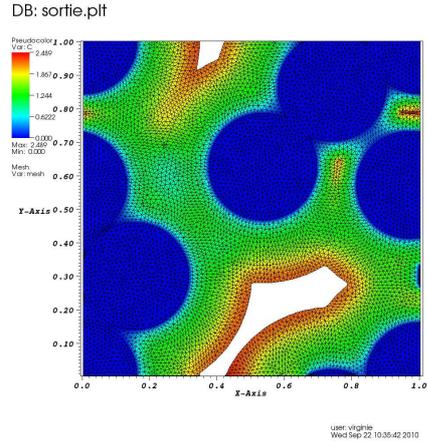
Nous considérons à présent une épaisseur de fissure plus faible. Regardons l'évolution des variables du modèle dans ce cas.

Nous nous attendons alors à une hauteur d'oxygène disponible plus faible, et à une diffusion de l'oxygène plus rapide dans la fissure. Ainsi, la formation du bouchon liquide devrait se faire plus vite: l'autocicatrisation du matériau devrait être plus efficace pour des hauteurs de fissure plus faibles.

**Evolution de la concentration en oxygène dans la fissure** Sur les figures suivantes, la solution  $C_{O_2}$  représentée est calculée avec la méthode d'Euler implicite aux temps  $t = 5, 10$  (FIG.100 et 101), 100 et 150 s (FIG.102 et 103). Le pas de temps choisi est  $\Delta t = 0,1 s$ .

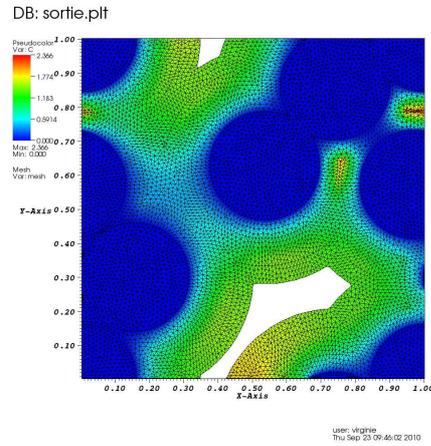
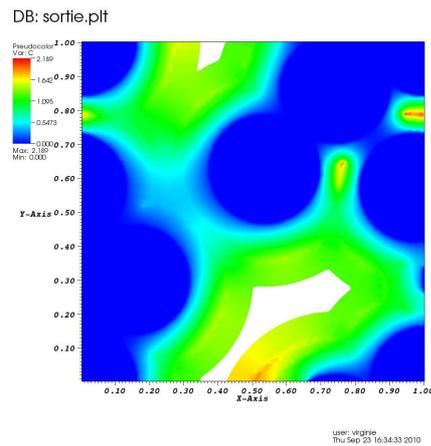
Nous observons bien que la concentration en oxygène dans la fissure décroît lorsque le temps augmente, et est d'autant plus faible que la région considérée est éloignée du bord extérieur. De plus, nous observons bien la propagation de l'oxygène dans le domaine réactif.

Par rapport au cas précédent pour lequel la hauteur de la fissure était de  $3 \mu m$ , la diffusion de l'oxygène dans la fissure se fait plus rapidement ici: par exemple au temps court  $t = 5 s$ , la valeur maximale de  $C_{O_2}$  est de  $2.56 g.cm^{-3}$  dans le cas où  $e_f = 1 \mu m$ , alors qu'elle est de  $2.60 g.cm^{-3}$  dans le cas où  $e_f =$


 Figure 100: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 5$  s, sans le maillage

 Figure 101: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 10$  s

$3 \mu m$ . Dans le cas d'un temps de simulation plus long, par exemple  $t = 100$  s, nous obtenons  $\max(C_{O_2}) = 1.51 \text{ g.cm}^{-3}$  pour  $e_f = 1 \mu m$ , et  $\max(C_{O_2}) = 1.89 \text{ g.cm}^{-3}$  pour  $e_f = 3 \mu m$  (les endroits "coincés" dans les fibres, apparaissant en rouge vif ne sont pas pris en compte).

**Evolution de la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_{O_2}^g$  (notée  $h_{O_2}$ ) qui représente la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure (FIG.104 à 108). Rappelons que cette variable est fixe et vaut la hauteur de la fissure  $e_f$  dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation. Ici, la hauteur de fissure considérée est de  $1 \mu m$ ; ce paramètre est adimensionné dans la simulation par la taille du maillage considéré, i.e.  $624 \mu m$ : la hauteur maximale d'oxygène disponible est donc ici de  $1.603 \cdot 10^{-3}$ .

Figure 102: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 100$  sFigure 103: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 200$  s

Nous observons bien que la hauteur disponible en oxygène dans la zone réactive décroît lorsque le temps augmente. La hauteur  $h_{O_2}$  est fixe et maximale (égale à  $1.603 \cdot 10^{-3}$ ) dans la zone inerte, qui apparaît en rouge sur ces figures.

Comme précédemment, dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur disponible en oxygène est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus faible localement. Comme la diffusion de l'oxygène est plus rapide avec une épaisseur de fissure plus faible ici que dans le cas précédent, la hauteur disponible en oxygène  $h_{O_2}$  est proche de 0 plus rapidement: le bouchon se forme plus vite, c'est pourquoi les simulations présentées ne dépassent pas le temps  $t = 100$  ou  $150$  s.

La figure FIG(107), correspondant au temps  $t = 50$  s, est présentée en visualisation log (on représente  $\log(h_{O_2})$ ) car il semble qu'il n'y ait plus du tout

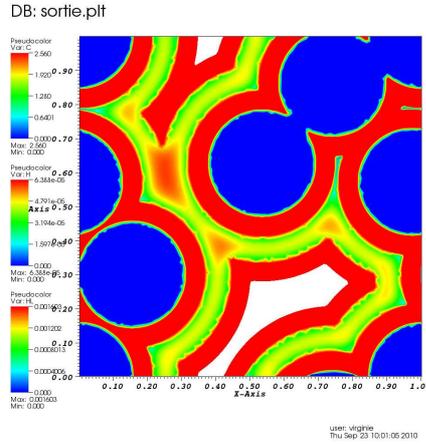


Figure 104: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 5$  s, sans le maillage

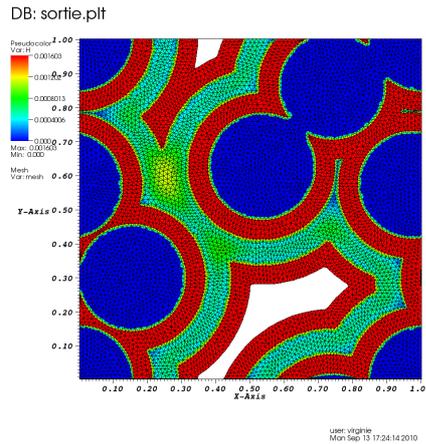


Figure 105: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 10$  s

d'oxygène disponible dans la zone réactive. Mais cette visualisation en log et l'étude locale des valeurs de  $h_{O_2}$  montrent qu'il reste encore une faible hauteur d'oxygène disponible (cf les valeurs dans le rectangle noir sont supérieures de celles aux alentours: de l'oxygène est encore disponible à cet endroit). Aux temps supérieurs (vers  $t \sim 100$  s FIG(108)), ces valeurs sont extrêmement faibles (nous estimons  $h_{O_2} \sim 0.0001 \mu m$ ) et nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif.

**Evolution de la hauteur de liquide formé dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_l$  qui représente la hauteur de liquide formé dans la fissure. Rappelons que cette variable est nulle dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation (on considère qu'il n'y a pas de propagation du liquide dans le domaine inerte).

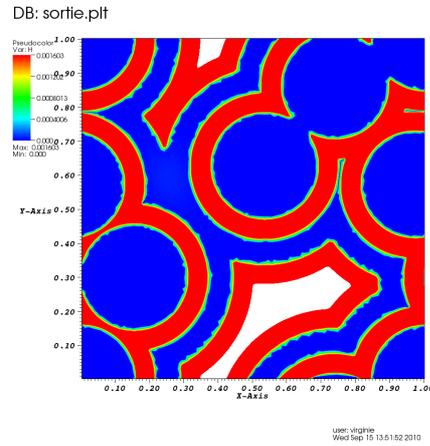


Figure 106: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 50$  s, sans le maillage

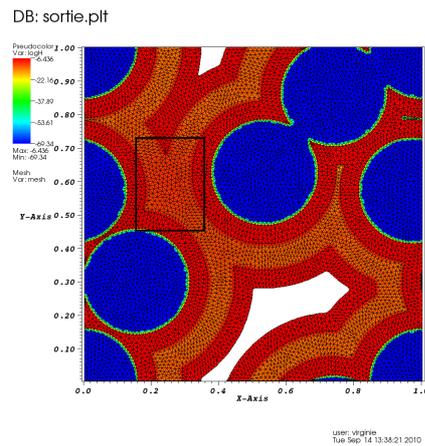


Figure 107: Solution  $\log(h_{O_2})$  au temps  $t = 50$  s

Nous observons bien que la hauteur de liquide formé dans la zone réactive croît lorsque le temps augmente. La hauteur  $h_l$  est fixe et proche de 0 dans la zone inerte (et dans la zone des fibres), qui apparaît en bleu sur ces figures. Dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur de liquide formé est plus élevée (FIG.109 et 110). Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus forte localement et à des endroits en "coin" (zone réactive "coincée dans les fibres). Pour les régions au "centre" du matériau considéré, apparaissant en bleu clair, du liquide est formé sur seulement 7 % de la hauteur de la fissure.

La figure (FIG.112) est présentée avec un zoom sur les zones où la hauteur de liquide  $h_l$  n'est pas encore maximale: du liquide peut encore être formé à ces endroits.

Pour la dernière figure (FIG.(113)) présentée ici, correspondant au temps  $t =$

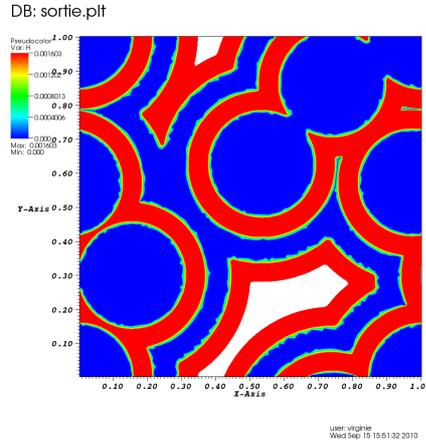


Figure 108: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 100$  s

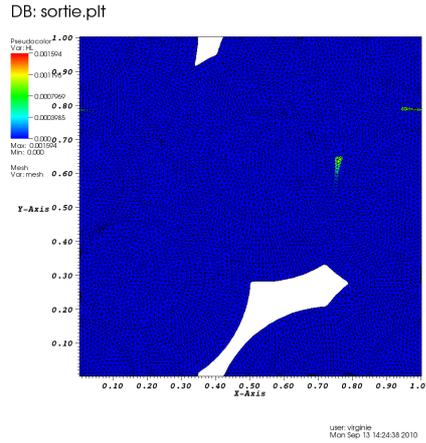


Figure 109: Solution  $h_l$  au temps  $t = 10$  s

150 s, nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif.

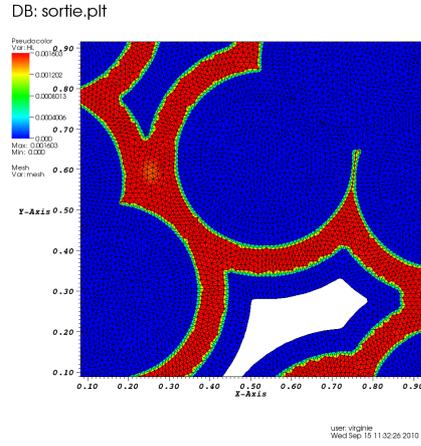
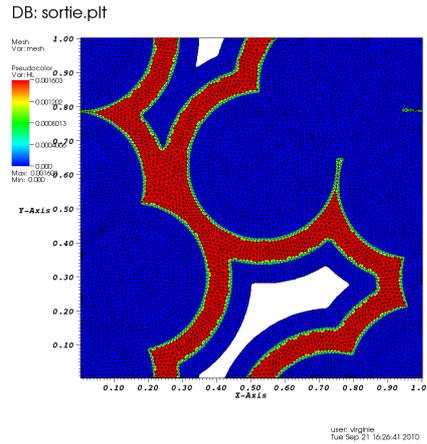
Dans ce cas où la hauteur de la fissure est plus faible, nous observons que le bouchon se forme plus tôt que dans le cas précédent.

### 5.1.3 Épaisseur de fissure de $0.5 \mu m$

Nous considérons à présent une épaisseur de fissure encore plus faible. Regardons l'évolution des variables du modèle dans ce cas.

Nous nous attendons comme précédemment à une diffusion de l'oxygène plus rapide dans la fissure et à la formation du bouchon liquide plus rapide: l'autocicatrisation du matériau devrait être encore plus efficace pour des hauteurs de fissure encore plus faibles.




 Figure 112: Solution  $h_l$  au temps  $t = 100$  s avec zoom

 Figure 113: Solution  $h_l$  au temps  $t = 150$  s

que dans les cas précédents (i.e.  $e_f = 1$  et  $3 \mu m$ ): par exemple au temps court  $t = 5$  s, la valeur maximale de  $C_{O_2}$  est de  $2.51 g.cm^{-3}$  dans le cas où  $e_f = 0.5 \mu m$ , alors qu'elle est de  $2.56 g.cm^{-3}$  et  $2.60 g.cm^{-3}$  dans les cas où  $e_f = 1$  et  $3 \mu m$  respectivement. Dans le cas d'un temps de simulation plus long, par exemple  $t = 100$  s, nous obtenons  $max(C_{O_2}) = 1.40 g.cm^{-3}$  pour  $e_f = 0.5 \mu m$  (les zones "coincées" dans entre les fibres apparaissant en rouge vif ne sont pas prises en compte), pour  $max(C_{O_2}) = 1.51 g.cm^{-3}$  et  $1.89 g.cm^{-3}$  dans les cas  $e_f = 1$  et  $3 \mu m$  précédents.

**Evolution de la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_{O_2}^g$  (notée  $h_{O_2}$ ) qui représente la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure (FIG.117 et 118). Rappelons que cette variable est fixe et vaut la hauteur de la fissure  $e_f$  dans le domaine inerte pour

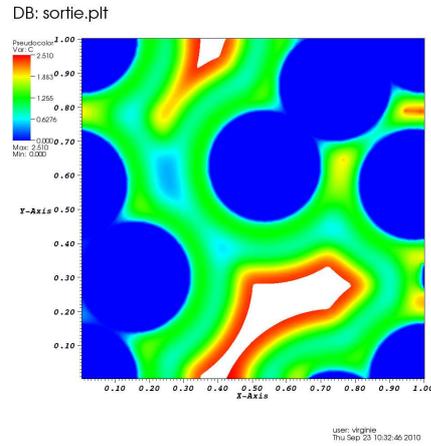


Figure 114: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 5$  s, sans le maillage

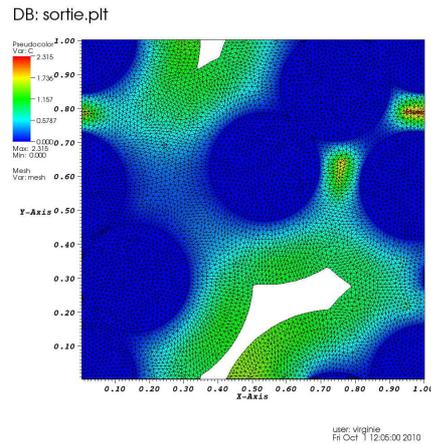


Figure 115: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 50$  s

cette première partie du modèle d'oxydation. Ici, la hauteur de fissure considérée est de  $0.5 \mu\text{m}$ ; ce paramètre est adimensionné dans la simulation par la taille du maillage considéré, i.e.  $624 \mu\text{m}$ : la hauteur maximale d'oxygène disponible est donc ici de  $8.013 \cdot 10^{-4}$ .

Nous observons bien que la hauteur disponible en oxygène dans la zone réactive décroît lorsque le temps augmente. La hauteur  $h_{O_2}$  est fixe et maximale (égale à  $8.013 \cdot 10^{-4}$ ) dans la zone inerte, qui apparaît en rouge sur ces figures.

Comme précédemment, dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur disponible en oxygène est plus élevée. Ces zones correspondent

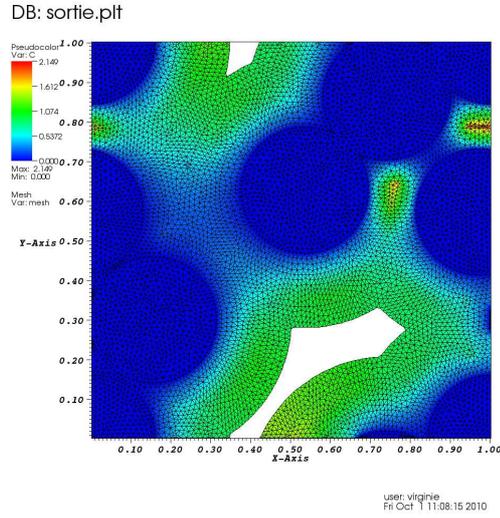


Figure 116: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 100 s$

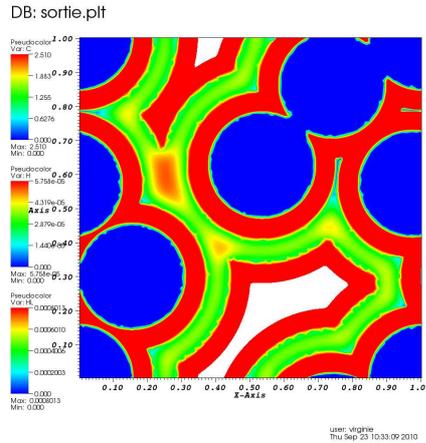
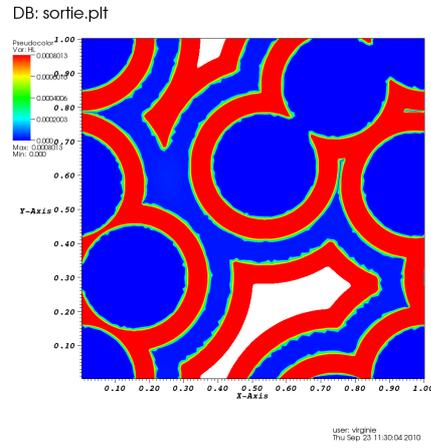
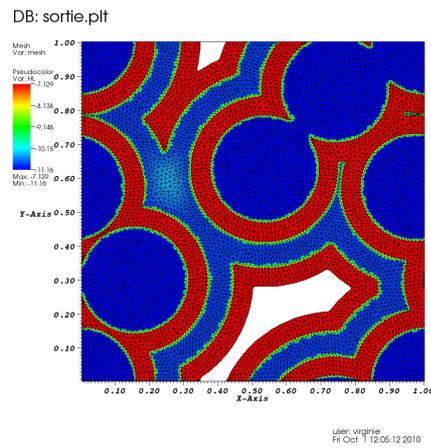


Figure 117: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 5 s$

à une valeur de la concentration d'oxygène plus faible localement. Comme la diffusion de l'oxygène est plus rapide avec une épaisseur de fissure plus faible ici que dans le cas précédent, la hauteur disponible en oxygène  $h_{O_2}$  est proche de 0 plus rapidement: le bouchon se forme plus vite, c'est pourquoi les simulations présentées ne dépassent pas le temps  $t = 100 s$ .

Sur la figure FIG.118, correspondant au temps  $t = 50 s$ , il semble qu'il n'y ait plus du tout d'oxygène disponible dans la zone réactive. Mais une visualisation en log et l'étude locale des valeurs de  $h_{O_2}$  montrent qu'il reste encore une faible hauteur d'oxygène disponible (FIG.119). Aux temps supérieurs (avant  $t$

Figure 118: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 50 s$ Figure 119: Solution  $h_{O_2}$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 50 s$ 

$\sim 100 s$ ), ces valeurs sont extrêmement faibles et nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif.

**Evolution de la hauteur de liquide formé dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_l$  qui représente la hauteur de liquide formé dans la fissure. Rappelons que cette variable est nulle dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation (on considère qu'il n'y a pas de propagation du liquide dans le domaine inerte).

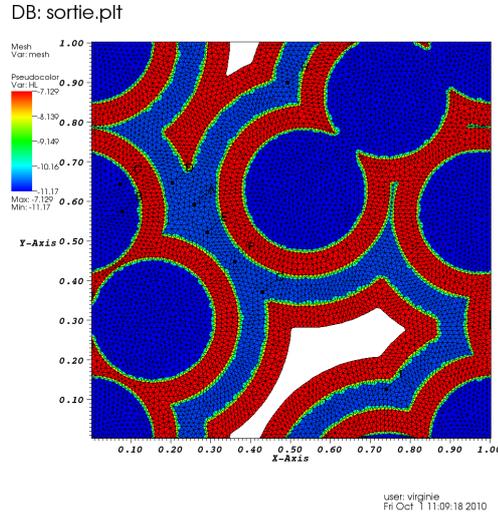


Figure 120: Solution  $h_{O_2}$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 100 s$

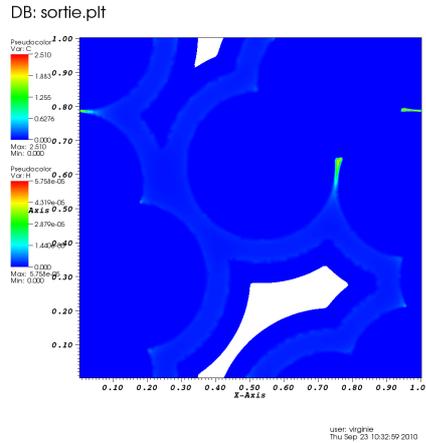


Figure 121: Solution  $h_l$  au temps  $t = 10 s$

Nous observons bien que la hauteur de liquide formé dans la zone réactive croît lorsque le temps augmente. La hauteur  $h_l$  est fixe et proche de 0 dans la zone inerte (et dans la zone des fibres), qui apparaît en bleu sur ces figures. Dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur de liquide formé est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus forte localement et à des endroits en "coin" (zone réactive "coincée dans les fibres"). La figure (FIG.123) est présentée: la hauteur de liquide  $h_l$  n'est pas encore maximale, du liquide peut encore être formé à ces endroits. Ceci est bien visible lorsqu'on représente le logarithme de la variable  $h_l$  (FIG.125).



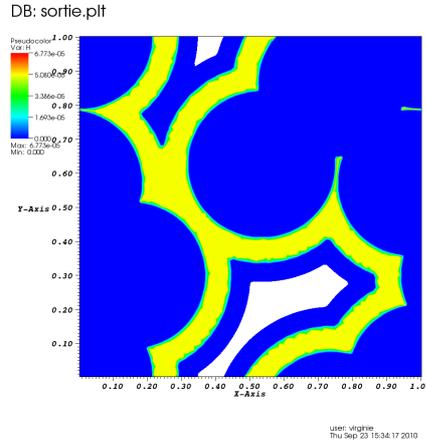


Figure 124: Solution  $h_l$  au temps  $t = 150 s$

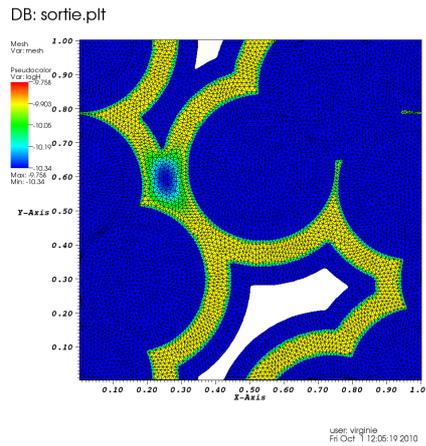


Figure 125: Solution  $h_l$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 50 s$

**Evolution de la concentration en oxygène dans la fissure** Sur les figures suivantes, la solution  $C_{O_2}$  représentée est calculée avec la méthode d'Euler implicite aux temps  $t = 5, 50$  et  $100 s$  (FIG.127 à 129). Le pas de temps choisi est  $\Delta t = 0,1 s$ .

Nous observons bien que la concentration en oxygène dans la fissure décroît lorsque le temps augmente, et est d'autant plus faible que la région considérée est éloignée du bord extérieur. De plus, nous observons bien la propagation de l'oxygène dans le domaine réactif.

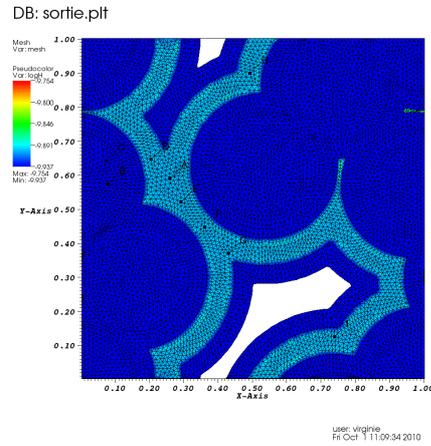


Figure 126: Solution  $h_l$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 100$  s

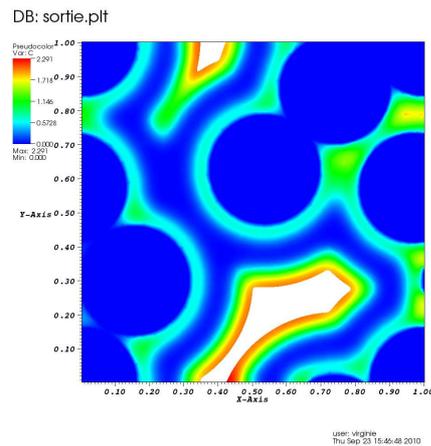


Figure 127: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 5$  s, sans le maillage

**Evolution de la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_{O_2}^g$  (notée  $h_{O_2}$ ) qui représente la hauteur d'oxygène disponible dans la fissure (FIG.130 et 131). Rappelons que cette variable est fixe et vaut la hauteur de la fissure  $e_f$  dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation. Ici, la hauteur de fissure considérée est de  $0.5 \mu m$ ; ce paramètre est adimensionné dans la simulation par la taille du maillage considéré, i.e.  $624 \mu m$ : la hauteur maximale d'oxygène disponible est donc ici de  $8.013 \cdot 10^{-4}$ .

Sur la figure FIG.130, nous observons bien que la hauteur disponible en oxygène dans la zone réactive décroît lorsque le temps augmente. La hauteur

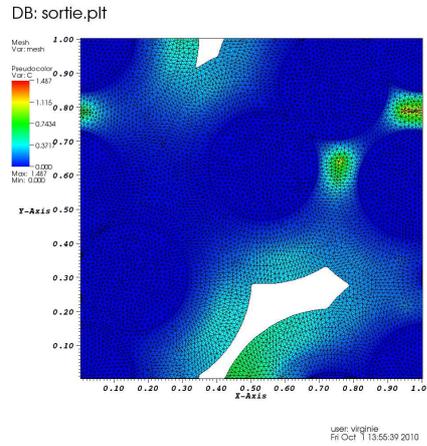


Figure 128: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 50$  s

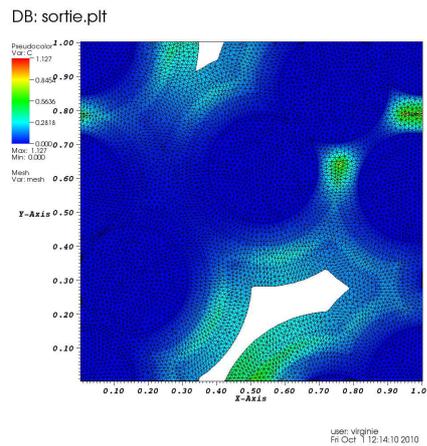
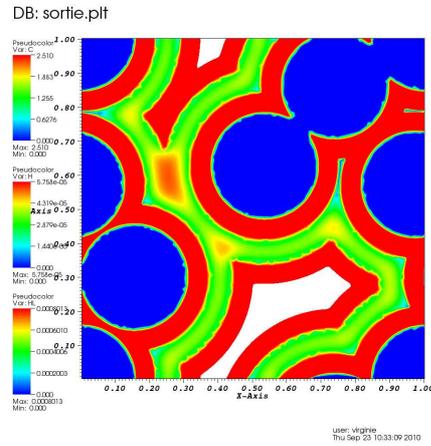
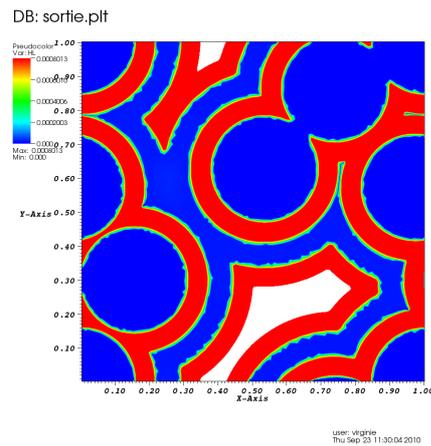


Figure 129: Solution  $C_{O_2}$  au temps  $t = 100$  s

$h_{O_2}$  est fixe et maximale (égale à  $8.013 \cdot 10^{-4}$ ) dans la zone inerte, qui apparaît en rouge sur ces figures.

Comme précédemment, dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur disponible en oxygène est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus faible localement. Comme la diffusion de l'oxygène est plus rapide avec une épaisseur de fissure plus faible ici que dans le cas précédent, la hauteur disponible en oxygène  $h_{O_2}$  est proche de 0 plus rapidement: le bouchon se forme plus vite, c'est pourquoi les simulations présentées ne dépassent pas le temps  $t = 75$  s.

Sur la figure FIG.131, correspondant au temps  $t = 50$  s, il semble qu'il n'y ait plus du tout d'oxygène disponible dans la zone réactive. Mais une visualisation en log et l'étude locale des valeurs de  $h_{O_2}$  montrent qu'il reste encore une faible hauteur d'oxygène disponible (FIG.132 et 133). Aux temps supérieurs (avant  $t$

Figure 130: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 5$  sFigure 131: Solution  $h_{O_2}$  au temps  $t = 50$  s

$\sim 75$  s), ces valeurs sont extrêmement faibles et nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif.

**Evolution de la hauteur de liquide formé dans la fissure** A présent, nous regardons l'évolution de la variable  $h_l$  qui représente la hauteur de liquide formé dans la fissure. Rappelons que cette variable est nulle dans le domaine inerte pour cette première partie du modèle d'oxydation (on considère qu'il n'y a pas de propagation du liquide dans le domaine inerte).

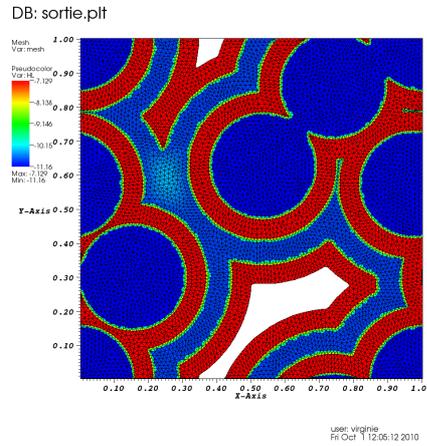


Figure 132: Solution  $h_{O_2}$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 50$  s

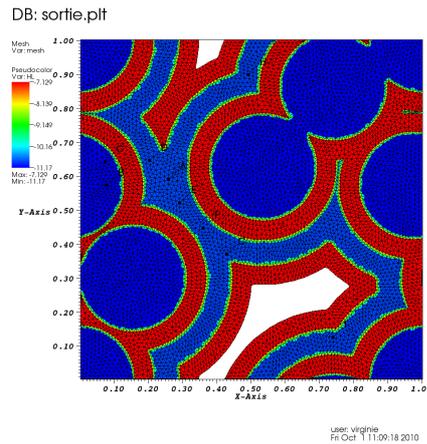


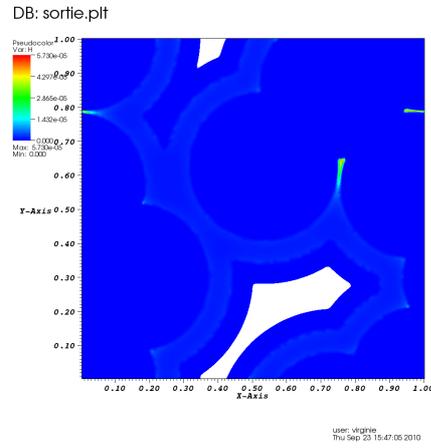
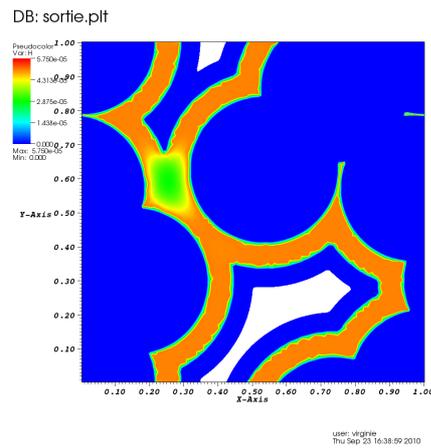
Figure 133: Solution  $h_{O_2}$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 100$  s

Sur les figures FIG.134 et 135, nous observons bien que la hauteur de liquide formé dans la zone réactive croît lorsque le temps augmente. La hauteur  $h_l$  est fixe et proche de 0 dans la zone inerte (et dans la zone des fibres), qui apparaît en bleu sur ces figures.

Dans le domaine réactif, des zones apparaissent à l'intérieur où la hauteur de liquide formé est plus élevée. Ces zones correspondent à une valeur de la concentration d'oxygène plus forte localement et à des endroits en "coin" (zone réactive "coincée dans les fibres").

La figure FIG.136 est présentée: la hauteur de liquide  $h_l$  n'est pas encore maximale, du liquide peut encore être formé à ces endroits.

Pour des temps vers  $t = 75$  s, nous pouvons considérer que le bouchon est formé dans tout le domaine réactif: sur la figure FIG.(137), nous observons au temps  $t = 100$  s qu'il y a du liquide partout en zone réactive.

Figure 134: Solution  $h_l$  au temps  $t = 5$  sFigure 135: Solution  $h_l$  au temps  $t = 50$  s

Dans ce cas où la hauteur de la fissure est plus faible, nous observons que le bouchon se forme plus tôt que dans le cas précédent.

## 6 Conclusion

La première partie du modèle d'oxydation en 2D d'un composite MAC a été étudiée.

Dans un premier temps, le schéma numérique utilisé est présenté et validé avec des cas-tests pour la diffusion notamment, et est également utilisé en 1D.

Pour le modèle 2D, les premiers résultats numériques sont cohérents avec les phénomènes physiques attendus.

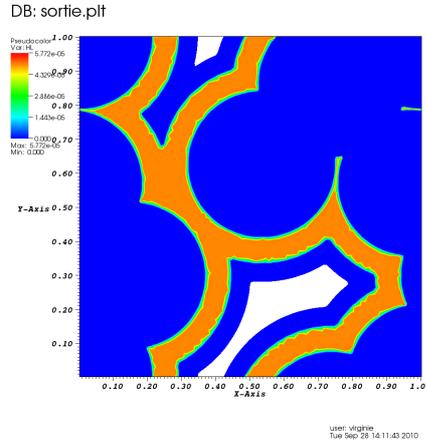


Figure 136: Solution  $h_l$  au temps  $t = 100$

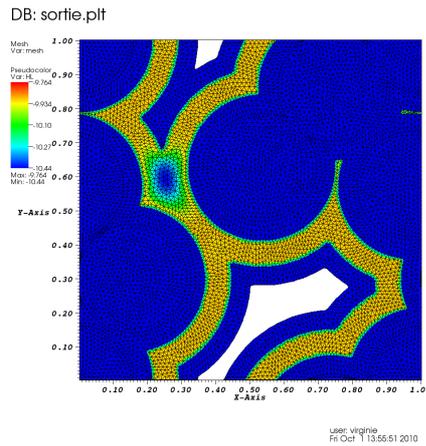


Figure 137: Solution  $h_l$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 50 s$

L'étude de la deuxième phase du modèle, qui traite de l'avancée du liquide dans la fissure est en cours.

## References

- [1] Thebault J., "Résistance à la corrosion des composites céramiques thermostrostructuraux", J. Phys IV France, 831 (1993).
- [2] Lara-Curzio E., "Oxydation induced stress-rupture of fiber bundles", J. of Engineering Materials and Technology, **120**, 105 (1998).

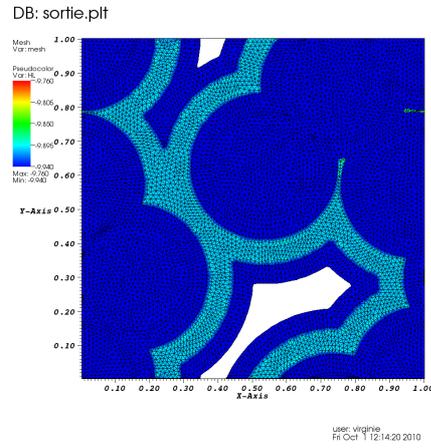


Figure 138: Solution  $h_l$  en visualisation logarithmique au temps  $t = 100$  s

- [3] Forio P. et Lamon J., “Fatigue behaviour at high temperature in air of a 2D SiC/Si-B-C composite with a self-healing multilayered matrix”, *Ceramic Transactions*, **128**, 127 (2001).
- [4] Guillaume COUEGNAT, thèse “Approche multiéchelle du comportement mécanique de matériaux



---

Centre de recherche INRIA Bordeaux – Sud Ouest  
Domaine Universitaire - 351, cours de la Libération - 33405 Talence Cedex (France)

Centre de recherche INRIA Grenoble – Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38334 Montbonnot Saint-Ismier  
Centre de recherche INRIA Lille – Nord Europe : Parc Scientifique de la Haute Borne - 40, avenue Halley - 59650 Villeneuve d'Ascq  
Centre de recherche INRIA Nancy – Grand Est : LORIA, Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique  
615, rue du Jardin Botanique - BP 101 - 54602 Villers-lès-Nancy Cedex  
Centre de recherche INRIA Paris – Rocquencourt : Domaine de Voluceau - Rocquencourt - BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex  
Centre de recherche INRIA Rennes – Bretagne Atlantique : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex  
Centre de recherche INRIA Saclay – Île-de-France : Parc Orsay Université - ZAC des Vignes : 4, rue Jacques Monod - 91893 Orsay Cedex  
Centre de recherche INRIA Sophia Antipolis – Méditerranée : 2004, route des Lucioles - BP 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex

---

Éditeur  
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)  
<http://www.inria.fr>  
ISSN 0249-6399