

Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials

Virginie Drean, Mario Ricchiuto, Gerard Vignoles

► **To cite this version:**

Virginie Drean, Mario Ricchiuto, Gerard Vignoles. Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials. [Rapport de recherche] RR-7417, INRIA. 2010. <inria-00526117>

HAL Id: inria-00526117

<https://hal.inria.fr/inria-00526117>

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*

Virginie Drean — Mario Ricchiuto — Gérard Vignolles

N° 7417

October 2010

Thème NUM

 *Rapport
de recherche*

Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials

Virginie Drean , Mario Ricchiuto , Gérard Vignolles *†

Thème NUM — Systèmes numériques
Équipes-Projets BACCHUS

Rapport de recherche n° 7417 — October 2010 — 34 pages

Abstract: Dans ce papier, le premier 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 à la géométrie du problème et à sa mise en équation. Une première étude, basée sur l'analyse des dimensions des variables physiques et des équations associées, permet de connaître l'échelle des grandeurs et les difficultés du modèle, principalement au niveau de la raideur du problème étudié. Le schéma numérique retenu pour la modélisation de l'auto-cicatrisation de la matrice est alors présenté.

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

* INRIA - Bordeaux Sud-Ouest

† LCTS

Two-dimensional oxydation modelling of MAC composite materials

Résumé : Dans ce papier, le premier 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 à la géométrie du problème et à sa mise en équation. Une première étude, basée sur l'analyse des dimensions des variables physiques et des équations associées, permet de connaître l'échelle des grandeurs et les difficultés du modèle, principalement au niveau de la raideur du problème étudié. Le schéma numérique retenu pour la modélisation de l'auto-cicatrisation de la matrice est alors présenté.

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

Contents

1	Introduction: Contexte et motivations de ce travail	3
2	Modélisation des mécanismes d'oxydation-cicatrisation	4
2.1	Hypothèses et approximations retenues	4
2.1.1	Modèle existant	4
2.1.2	Modèle 2D	6
2.2	Grandeurs et équations du modèle	7
2.2.1	Grandeurs et domaines de résolution du modèle	7
2.2.2	Equations du modèle	8
2.3	Récapitulation	11
2.3.1	Equations avec indicateurs de phase	11
2.3.2	Equations généralisées avec indicateurs de phase	12
3	Etude préliminaire des équations du modèle	14
3.1	Adimensionnement des grandeurs du modèle	14
3.1.1	Choix des grandeurs caractéristiques	14
3.1.2	Adimensionnement des grandeurs du modèle	14
3.1.3	Réécriture des équations du modèle	15
3.2	Analyse de la raideur du problème étudié	17
3.2.1	Analyse de la raideur du modèle simplifié	17
3.2.2	Analyse de la raideur du modèle complet	18
4	Formulation variationnelle du problème d'oxydation	21
4.1	Méthode de résolution des équations 2D par éléments finis	21
4.1.1	Eléments finis de Lagrange triangulaires de degré un (P1).	21
4.2	Formulation variationnelle du problème considéré	23
4.2.1	Ecriture des bilans de masse de l'oxygène	23
4.3	Méthode de résolution temporelle des équations	30
4.3.1	Schéma d'Euler implicite	30
4.3.2	Schéma de Gear implicite	31
4.4	Méthode de résolution des équations 1D par éléments finis	31
5	Conclusion	33

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 présentée. 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.

Nous commencerons par présenter le modèle physico-chimique retenu pour l'oxydation des composites MAC.

Ce modèle 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.

Puis nous nous intéresserons à l'adimensionnement et à l'étude de la raideur des équations considérées et au schéma numérique retenu.

2 Modélisation des mécanismes d'oxydation-cicatrisation

2.1 Hypothèses et approximations retenues

2.1.1 Modèle existant

Nous allons dans un premier temps brièvement décrire le principal modèle existant et comparable à celui que nous développons aujourd'hui. Les variables et hypothèses qu'il utilise sont en partie reprises dans notre modèle.

Les travaux de [4] présentent une modélisation physico-chimique menant à la prédiction de la durée de vie des composites céramiques à matrice autocicatrisante, matériaux proposés par la Snecma Propulsion Solide.

Une représentation simplifiée de la géométrie des différentes couches de protection matricielle et du bouchon d'oxyde de bore est choisie (FIG.1). Elle permet de définir des paramètres géométriques microscopiques clés du modèle, tels que les grandeurs e_P (épaisseur de la couche de pyrocarbone), L_f (longueur de la

fissure), issus de mesures sur le matériau, ou encore des paramètres macroscopiques décrivant l'endommagement par oxydation (h_m , h_P par exemple). Ces différents paramètres sont également utilisés dans notre modèle, que nous décrivons ensuite.

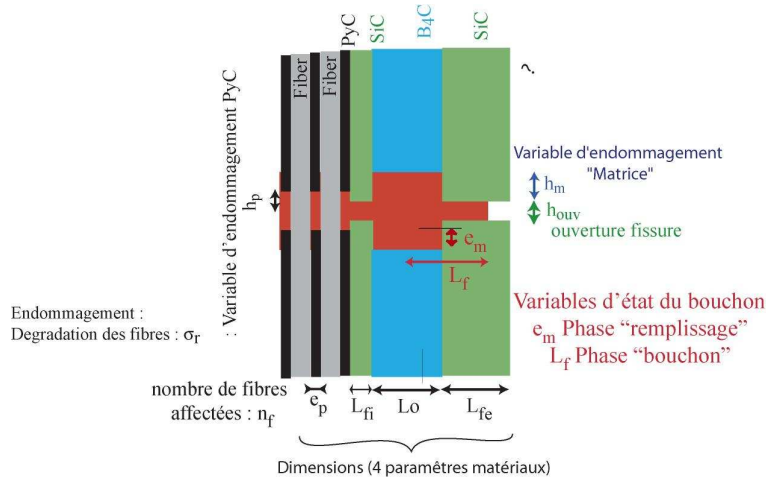


Figure 1: Représentation simplifiée de la géométrie des couches considérées; paramètres du modèle.

Afin de décrire les réactions chimiques, ce modèle se base sur les travaux de LCTS [5]. Il est montré qu'aux températures dans la gamme [400-700]°C qui nous intéressent particulièrement, la principale couche matricielle qui réagit est un carbure de bore (B_4C). En présence d'oxygène, la réaction d'oxydation aboutit à un oxyde de bore (B_2O_3) liquide. Les équations pour la cinétique chimique et l'évolution des grandeurs du modèle seront détaillées dans la section suivante (Modèle 2D).

Cette cinétique d'oxydation est introduite dans la simulation, mais elle n'est pas le mécanisme limitant la réaction. En effet, le mécanisme limitant est le phénomène de diffusion de l'oxygène à travers le bouchon d'oxyde. Les grandeurs caractéristiques retenues pour la modélisation de la matrice sont alors les flux de B_4C consommés et les flux de B_2O_3 créés. La variable essentielle pour ce modèle simplifié est donc le flux d'oxygène parvenant jusqu'à la matrice. Les proportions en volumes de ces flux sont directement liées aux proportions stoechiométriques de la réaction et aux volumes molaires. La description de la formation du bouchon d'oxyde est indissociable du mécanisme de diffusion de l'oxygène à travers le bouchon. Sa composition ainsi que l'identification du coefficient de diffusion ont été obtenues expérimentalement en fonction de la température par [6].

Dans la simulation, la composition du bouchon est supposée constante. La diffusion de l'oxygène est modélisée par la loi de Fick en régime établi. Une géométrie complexe et évolutive est considérée: une représentation simplifiée de la géométrie est proposée avec un modèle de type filaire à noeuds (FIG.2).

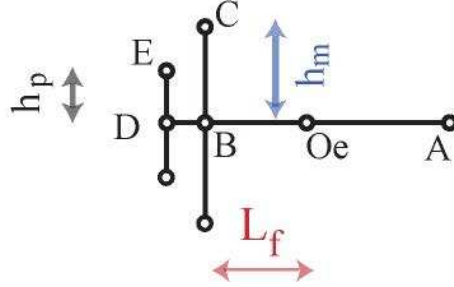


Figure 2: Représentation simplifiée de la géométrie des couches considérées; paramètres du modèle.

Sur la représentation simplifiée de la géométrie du bouchon, sont représentés aux noeuds:

- **E** : interface entre le bouchon et le pyC ,
- **C** : interface entre le bouchon et la couche matricielle de B_4C ,
- **Oe** : limite de remplissage de la fissure par le bouchon
- **A** : longueur maximale du bouchon et jonction avec un macro-pore,
- **D** et **B** : noeuds du modèle $1D$.

L'intégration de la loi de Fick sur cette géométrie est réalisée analytiquement. Les grandeurs h_m , h_p et L_f sont des variables du modèle filaire.

Les résultats obtenus montrent que la prise en compte des mécanismes de type physicochimiques est essentielle pour assurer une prédiction du comportement et de la durée de vie des matériaux composites CMC à matrice autocicatrisante en milieu oxydant. L'évolution des variables d'endommagement (h_m , h_p) par oxydation de matrice et de pyrocarbone est obtenue et pourra être comparée à celle obtenue avec notre modèle $2D$.

2.1.2 Modèle $2D$

Le choix de structuration de ce modèle repose sur diverses hypothèses résultant de la connaissance du matériau et de ses constituants, ainsi que du choix du type d'oxydation envisagé (oxygène O_2 seul oxydant, et fourni par l'air sec).

La nouvelle idée directrice est de travailler sur une vue $2D$ dans le plan de la fissure transverse aux fibres. Ainsi, les quantités définies dans la direction parallèle aux fibres sont des champs $2D$ définis sur les domaines ad hoc. Par exemple, la hauteur de B_4C consommée est une quantité $hm(x, y)$, définie uniquement sur le domaine de la matrice réactive (i.e. B_4C). La création du bouchon d'oxyde amènera à l'existence de domaines à frontière libre, correspondant à la présence de liquide entre les lèvres de matériau inerte (i.e. SiC), soit un domaine liquide ω_L qui va envahir progressivement le domaine inerte.

L'application des bilans de masse d'oxygène va permettre d'obtenir les flux d'oxygène à travers toutes les interfaces, puis ceci permettra de mettre à jour les

variables *verticales* et l'avancement de la frontière liquide $\delta\omega_{li}$ dans la deuxième partie du modèle.

Dans ce modèle 2D, nous considérons une fissure unique débouchant sur une seule tranche de matériau de type fibre, car la rupture totale du matériau est conditionnée presque instantanément par la rupture de cette *première zone sensible*.

Nous allons porter maintenant notre attention sur le sous-modèle dédié au transfert de masse d'oxygène.

Les hypothèses retenues pour ce modèle sont les suivantes :

- la matrice contient une couche active de carbure de bore B_4C entre deux couches de même épaisseur de SiC ;
- cette dernière couche est considéré comme inerte. En effet, la vitesse d'oxydation de ce constituant est très faible dans la gamme de température envisagée ($T < 800$ °C);
- auprès de la fibre, une interphase de pyC de faible épaisseur est réactive elle aussi vis-à-vis de l'oxygène;
- on considère que les fibres sont impénétrables;
- le carbure de bore B_4C donne par oxydation de l'oxyde liquide B_2O_3 , avec une nette expansion volumique, et provoque la création d'un bouchon.

La première partie du modèle concerne la phase de création du bouchon. Le bouchon vient ensuite remplir la fissure; ceci sera l'objet de la deuxième partie du modèle.

2.2 Grandeurs et équations du modèle

2.2.1 Grandeurs et domaines de résolution du modèle

Les différentes couches de matrice ainsi que les fibres sont considérées comme des domaines de résolution.

Les fibres constituent le domaine Ω_f . Ce domaine est défini par l'indicateur de phase Φ_f , tel que

$$\Phi_f(\vec{x}) = 1 \text{ si } \vec{x} \in \Omega_f, \quad (1)$$

$$\Phi_f(\vec{x}) = 0 \text{ si } \vec{x} \notin \Omega_f. \quad (2)$$

L'hypothèse que les fibres sont impénétrables fait qu'elles constituent des trous dans le domaine de résolution.

Les autres domaines sont Ω_i pour la matrice inerte (SiC) et Ω_r pour la matrice réactive (B_4C). De la même façon que pour les fibres, on définit des indicateurs de phase Φ_i et Φ_r pour chacun de ces domaines, tels que, pour la matrice inerte

$$\Phi_i(\vec{x}) = 1 \text{ si } \vec{x} \in \Omega_i, \quad (3)$$

$$\Phi_i(\vec{x}) = 0 \text{ si } \vec{x} \notin \Omega_i, \quad (4)$$

et pour la matrice réactive

$$\Phi_r(\vec{x}) = 1 \text{ si } \vec{x} \in \Omega_r, \quad (5)$$

$$\Phi_r(\vec{x}) = 0 \text{ si } \vec{x} \notin \Omega_r. \quad (6)$$

Le domaine Ω_{fi} associé à la couche de *pyC* est si fin qu'on le traitera plutôt par une condition aux limites non-linéaire sur la frontière $\delta\Omega_{fi}$.

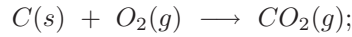
Le domaine Ω_L est quant à lui associé à la phase liquide, et sera utilisé dans la deuxième partie du modèle où l'avancée de la frontière liquide est considérée. Pour étudier la phase de création du bouchon, on définit les quantités suivantes, grandeurs essentielles du modèle :

- l'épaisseur (ouverture) e_f de la fissure, qui est en fait une moyenne calculée en fonction des paramètres de cyclage, par un modèle ad hoc;
- les longueurs intérieures L_{fi} et extérieures L_{fe} de la fissure;
- l'épaisseur de la couche de matrice active e_m ;
- l'épaisseur de la couche de matrice inerte e_i ;
- l'épaisseur de la couche de pyrocarbone e_{pyC} .

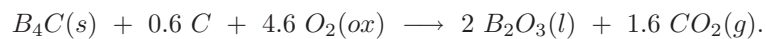
2.2.2 Equations du modèle

Les phénomènes physiques pris en compte sont :

- la diffusion de l'oxygène O_2 à travers la phase fluide : on utilise la 1^{ère} loi de Fick avec un coefficient de diffusion que l'on notera ensuite $D_{O_2}^g$;
- la diffusion de O_2 à travers le bouchon liquide : on utilise la même loi mais avec un coefficient $D_{O_2}^L$, beaucoup plus faible que le précédent. Ce coefficient peut être fonction de la composition précise du liquide;
- la réaction d'oxydation du *pyC* avec le bilan



- la réaction d'oxydation du B_4C , considérée comme instantanée, selon la réaction :



Ici, on aura une concentration nulle d'oxygène au front de réaction;

- l'augmentation de la taille du bouchon provient du bilan entre l'expansion volumique due à la réaction précédente, et la réduction de volume due au phénomène d'éjection liée à l'aspect cyclique de la contrainte, et donc, de l'ouverture de la fissure e_f ;
- on néglige la diffusion du CO_2 aussi bien à l'état gazeux que dissous dans l'oxyde. Egalement, on considère que le flux d'oxygène consommé par la fissure est toujours très faible devant les apports éventuels, ce qui permet de maintenir la concentration d'oxygène C_{O_2} égale à sa valeur $C_{O_2}^e$ dans l'air à l'extérieur du domaine de résolution.

Bilans de masse d'oxygène Ecrivons à présent les bilans de masse d'oxygène. La grandeur $h_{O_2}(x, y)$ est définie comme la hauteur disponible pour l'oxygène en un point (x, y) de l'espace. Pour tout le domaine, le bilan de masse s'écrit

$$\frac{\partial(h_{O_2}C_{O_2})}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D_{O_2}h_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2}) + h_{O_2}S_{O_2}, \quad (7)$$

avec D_{O_2} le coefficient de diffusion du O_2 , fonction de l'espace (soit en phase gazeuse ($D_{O_2}^g$), soit en phase liquide ($D_{O_2}^L$)). Dans la première partie du modèle (phase de création du bouchon), ce coefficient de diffusion est choisi comme constant par sous-domaine; on a ainsi:

- sur le domaine $\delta\Omega_{fi} \rightarrow D_{O_2} = D_{O_2}^g$,
- sur le domaine $\Omega_i \rightarrow D_{O_2} = D_{O_2}^g$,
- sur le domaine $\Omega_r \rightarrow D_{O_2} = D_{O_2}^g$.

La grandeur S_{O_2} est la source d'oxygène, également fonction de l'espace. Ce terme source, non trivial dans le domaine Ω_r sera détaillé dans la sous-section suivante.

Ce bilan de masse est assorti de conditions aux limites (CL).

A l'extérieur du domaine, on a

- soit de l'air sec rafraîchi en permanence en oxygène :

$$C_{O_2} = C_{O_2}^e = x_{O_2} \frac{P_a}{RT},$$

et donc une CL de type Dirichlet;

- soit un échange à travers une couche limite avec une source d'air ambiant :

$$-D_{O_2}h_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2} \cdot \vec{n} = h_{O_2} \frac{D_{O_2}}{\delta} (C_{O_2} - x_{O_2} \frac{P_a}{RT}),$$

et donc une CL de type mixte.

Sur le bord de la fibre, la CL correspond à la consommation de tout le flux par l'oxydation du carbone; on a alors

$$D_{O_2}h_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2} \cdot \vec{n} = -\frac{e_P}{h_P} D_{O_2}C_{O_2},$$

e_P étant l'épaisseur de la couche de pyrocarbone.

Bilans de hauteurs L'écriture des bilans de hauteur résulte de la résolution de problème

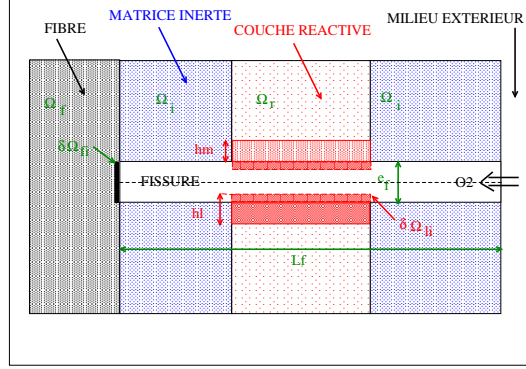


Figure 3: Représentation simplifiée de la géométrie des couches considérées; paramètres du modèle.

Une représentation simplifiée de la géométrie des couches considérées (FIG.3) permet de définir des paramètres géométriques microscopiques tels que ef ou Lf , issus de mesures sur le matériau. Trois paramètres décrivent l'endommagement par oxydation: hm (hauteur de matrice réactive consommée), hl (hauteur d'oxyde liquide formée) et hp (hauteur de pyrocarbone consommée) sont également considérés.

Pour les domaines où la matrice est inerte (i.e. Ω_i et ω_L), on considère que la grandeur h_{O_2} est fixe et déterminée. On aura alors

$$h_{O_2} = e_f,$$

épaisseur de la fissure. L'équation du bilan de masse est ainsi simplifiée :

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = D_{O_2} \vec{\Delta} C_{O_2}.$$

Notons que la grandeur h_{O_2} peut varier avec l'espace et le temps mais de façon complètement extérieure au modèle.

Sur le domaine Ω_r , le bilan de hauteur fait intervenir la mise en série de la diffusion de l'oxygène à travers la hauteur h_{O_2} , puis la hauteur h_L de liquide, et la consommation par l'interface B_4C / B_2O_3 à la hauteur h_m . Ceci amène à l'équation d'évolution

$$\frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{V_{B_4C}^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{O_2}. \quad (8)$$

On peut également écrire que

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{O_2}. \quad (9)$$

En soustrayant les équations (8) et (9) l'une à l'autre, nous obtenons la diminution de la hauteur disponible pour oxygène (sous entendu dans le gaz) $h_{O_2} = h_m - h_L$, soit

$$-\frac{\partial h_{O_2}}{\partial t} = \frac{(2V_L^m - V_{B_4C}^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{O_2}. \quad (10)$$

A partir de cette équation (10), le critère pour l'arrêt de la première partie du modèle apparaît: dès que $h_{O_2} = 0$ on considère que le bouchon est créé. On peut alors passer à la deuxième partie du modèle, dans laquelle h_{O_2} est maintenant supposé être dans le liquide et non plus dans le gaz.

Notons que l'évolution de la grandeur h_{O_2} dépend de h_L , qui devient ainsi une nouvelle variable définie uniquement sur le domaine Ω_r .

L'équation (10) permet à présent de définir le terme source (puits) d'oxygène S_{O_2} sur le domaine Ω_r :

$$h_{O_2} S_{O_2} = -\frac{4,6}{2V_L^m} \frac{\partial h_L}{\partial t} = -\frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{O_2}. \quad (11)$$

Sur la frontière $\delta\Omega_{fi}$, on doit intégrer une relation similaire à travers l'épaisseur de pyrocarbone e_P , donnée par l'équation (12)

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{O_2}, \quad (12)$$

où la variable h_P est la hauteur de pyrocarbone consommée, et n'est pas la même variable que la limite de h_{O_2} en $\delta\Omega_{fi}$.

L'équation (12) est fortement liée à la spécification de la CL pour la grandeur C_{O_2} sur la frontière $\delta\Omega_{fi}$:

$$D_{O_2}^g h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2} \cdot \vec{n} = -\frac{e_P}{h_P} D_{O_2}^g C_{O_2} \quad (13)$$

2.3 Récapitulation

Finalement, nous rappelons les équations qui régissent la première partie de ce modèle et donc la phase de création du bouchon.

2.3.1 Equations avec indicateurs de phase

Les variables considérées sont alors la hauteur d' O_2 disponible h_{O_2} , la concentration d' O_2 C_{O_2} , la hauteur d'oxyde liquide h_L formé par consommation de l'interface b_4C / B_2O_3 à la hauteur h_m , et la hauteur de pyC consommée h_P . Les équations considérées sont les suivantes:

$$\frac{\partial(h_{O_2} C_{O_2})}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (h_{O_2} D_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{O_2}, \quad \text{sur } \Omega_r \cup \Omega_i, \quad (14)$$

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

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

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{O_2}, \quad \text{sur } \delta\Omega_{fi}. \quad (17)$$

La grandeur \dot{h} est fixée extérieurement au modèle (par exemple histoire mécanique du matériau: ouverture/fermeture cyclique de la fissure).

Ces équations sont assorties de conditions aux limites (CL).
Sur la frontière extérieure $\delta\Omega_e$ nous avons

$$C_{O_2} = C_{O_2}^e, \text{ ou} \quad (18)$$

$$-D_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2} \cdot \vec{n}_{fe} = \frac{D_{O_2}^g}{\delta} (C_{O_2} - C_{O_2}^e). \quad (19)$$

Et sur la frontière des fibres $\delta\Omega_{fi}$:

$$D_{O_2} h_{O_2} \vec{\nabla} C_{O_2} \cdot \vec{n}_{fi} = D_{O_2}^g \frac{e_P}{h_P} C_{O_2}. \quad (20)$$

De plus, nous considérons les conditions initiales (CI) suivantes:

$$C_{O_2}(\vec{x}, 0) = C_{O_2}^e; \quad (21)$$

$$h_{O_2}(\vec{x}, 0) = e_f; \quad (22)$$

$$h_L(\vec{x}, 0) = 0; \quad (23)$$

$$h_P(\vec{x}, 0) = 0 \text{ sur } \delta\Omega_{fi}; \quad (24)$$

$$(25)$$

2.3.2 Equations généralisées avec indicateurs de phase

Ecrivons pour finir les grandeurs du modèle et ces dernières équations de façon plus générale en utilisant tous les indicateurs de phase définis.

Domaines gazeux et liquides Pour cela, nous définissons également un indicateur de phase Φ_g pour le domaine gazeux Ω_g et un indicateur de phase Φ_L pour le domaine liquide Ω_L . Les indicateurs de phase de ce domaine peuvent alors s'écrire comme

$$\Phi_g = 1 - \Phi_L$$

Domaines inertes et réactifs Faisons de même pour la matrice inerte: le sous domaine Ω_i est défini par

$$\Omega_i = 1 - \Omega_r - \Omega_f - \Omega_e,$$

Ω_r , Ω_f et Ω_e étant respectivement les sous-domaines de la matrice réactive, des fibres et de l'espace extérieur.

Coefficient de diffusion Le coefficient de diffusion peut être écrit de manière générale telle que

$$D_{O_2} = \Phi_L D_{O_2}^L + \Phi_g D_{O_2}^g.$$

Rappelons que le coefficient de diffusion en phase liquide est bien plus petit que le coefficient en phase gazeuse: $D_{O_2}^L \ll D_{O_2}^g$. Nous pourrions prendre dans un premier temps un rapport de l'ordre de 10^3 entre ces deux coefficients.

Hauteur de liquide Sur le domaine Ω_r , la hauteur de liquide formé s'écrit

$$h_L = \Phi_r[(h_m - h_{O_2}^g)\Phi_g + h_m\Phi_L],$$

soit

$$h_L = \Phi_r[(h_m - h_{O_2}^g)(1 - \Phi_L) + h_m\Phi_L],$$

et donc

$$h_L = \Phi_r[h_m + (\Phi_L - 1)h_{O_2}^g].$$

Hauteur disponible de O_2 en phases gazeuse et liquide Sur les domaines Ω_i et Ω_L , la hauteur disponible de O_2 est fixe et déterminée; nous avons ainsi:

$$h_{O_2} = \Phi_i(\Phi_L + \Phi_g)e_f,$$

soit

$$h_{O_2} = \Phi_i e_f.$$

Sur le domaine Ω_r , la hauteur disponible de O_2 varie et s'écrit alors:

$$h_{O_2} = \Phi_L\Phi_r h_{O_2}^L + \Phi_g\Phi_r h_{O_2}^g,$$

Sur l'ensemble du domaine de résolution, nous avons ainsi

$$h_{O_2} = \Phi_L(\Phi_r h_{O_2}^L + \Phi_i e_f) + \Phi_g(\Phi_r h_{O_2}^g + \Phi_i e_f),$$

et donc

$$h_{O_2} = \Phi_i e_f + \Phi_r(\Phi_L h_{O_2}^L + (1 - \Phi_L)h_{O_2}^g)$$

Equations générales du modèle Maintenant que les grandeurs sont écrites de manière générale, les équations du modèle deviennent, pour le bilan de masse

$$\frac{\partial(h_{O_2}C_{O_2})}{\partial t} = D_{O_2}\vec{\nabla}\cdot(h_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2}) - \frac{D_{O_2}}{4,6h_L}C_{O_2}, \quad (26)$$

pour la hauteur disponible de O_2

$$\frac{\partial h_{O_2}^g}{\partial t} = \Phi_r \frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2} + \dot{h}, \quad (27)$$

$$\frac{\partial h_{O_2}^L}{\partial t} = \Phi_r \Phi_L \frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{O_2}, \quad (28)$$

pour la hauteur de liquide formé

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^g}{h_L} C_{O_2}, \quad (29)$$

et pour la hauteur de matrice consommée

$$\frac{\partial h_m}{\partial t} = \Phi_r \left(\frac{\partial h_{O_2}^g}{\partial t} + \frac{\partial h_L}{\partial t} \right). \quad (30)$$

3 Etude préliminaire des équations du modèle

3.1 Adimensionnement des grandeurs du modèle

Afin d'analyser la raideur du problème à résoudre, et du pas de temps à choisir pour le schéma numérique, il convient d'adimensionner les grandeurs utilisées dans ce modèle.

3.1.1 Choix des grandeurs caractéristiques

Commençons par choisir les grandeurs adéquates pour l'adimensionnement.

Les variables que nous allons adimensionner sont:

- les volumes molaires V ; nous choisissons comme volume molaire de référence celui de l'oxyde V_L^m , ainsi les volumes molaires utilisés dans le modèle seront adimensionnés comme: $\bar{V} = V/V_L^m$;
- les hauteurs h ; nous choisissons comme hauteur caractéristique la longueur de la fissure L_f , ainsi les hauteurs utilisées dans le modèle seront adimensionnées comme: $\bar{h} = h/L_f$;
- les coefficients de diffusion D ; nous choisissons comme coefficient de diffusion de référence celui de l'oxygène en phase gazeuse $D_{O_2}^g$, ainsi les coefficients de diffusion utilisés dans le modèle seront adimensionnés comme: $\bar{D} = D/D_{O_2}^g$;
- la concentration C en O_2 ; nous choisissons comme concentration de référence la concentration en O_2 extérieure $C_{O_2}^e$, ainsi la concentration utilisée dans le modèle sera adimensionnée comme: $\bar{C} = C/C_{O_2}^e$;
- le temps t ; le temps caractéristique du problème sera une combinaison des grandeurs de référence que nous venons de choisir.

3.1.2 Adimensionnement des grandeurs du modèle

Ecrivons à présent les nouvelles grandeurs sans dimension du problème.

Pour les hauteurs (et paramètres ayant la dimension d'une hauteur), nous avons maintenant (TAB. 1):

h (m)	Référence h_{ref} (m)	\bar{h} (\odot)
$h_{O_2}^{g,L}$	L_f	$\bar{h}_{O_2}^{g,L}$
h_L	L_f	\bar{h}_L
h_P	L_f	\bar{h}_P
δ	L_f	$\bar{\delta}$
e_f	L_f	\bar{e}_f
L_f	L_f	1
e_P	L_f	\bar{e}_P

Table 1: Hauteurs du modèle adimensionnées.

V^m ($m^3.mol^{-1}$)	Référence V_{ref}^m ($m^3.mol^{-1}$)	V^m (\odot)
$V_{B_4C}^m$	V_L^m	$V_{B_4C}^m$
V_L^m	V_L^m	1
V_P^m	V_L^m	V_P^m

Table 2: Volumes molaires du modèle adimensionnés.

Pour les volumes molaires, nous avons maintenant (TAB. 2):

Pour la concentration, nous avons maintenant (TAB. 3):

C_{O_2} ($mol.m^{-3}$)	Référence C_{ref} ($mol.m^{-3}$)	C_{O_2} (\odot)
C_{O_2}	$C_{O_2}^e$	C_{O_2}

Table 3: Concentration du modèle adimensionnée.

Pour les coefficients de diffusion, nous avons maintenant (TAB. 4):

D_{O_2} ($m^2.s^{-1}$)	Référence D_{ref} ($m^2.s^{-1}$)	\bar{D}_{O_2} (\odot)
$D_{O_2}^g$	$D_{O_2}^g$	1
$D_{O_2}^L$	$D_{O_2}^g$	$D_{O_2}^L$

Table 4: Coefficients de diffusion du modèle adimensionnés.

3.1.3 Réécriture des équations du modèle

Finalement, les équations du modèle présentées dans le chapitre précédent (eq.26, 28 et 29) sont réécrites sous forme adimensionnée.

Réécriture des bilans de masse d'oxygène Nous utilisons les grandeurs du modèle sans dimension. L'équation (eq.26) s'écrit alors:

$$\frac{\partial(L_f C_{O_2}^e)(\bar{h}_{O_2} \bar{C}_{O_2})}{\partial t} = D_{O_2}^g \bar{D}_{O_2} \frac{1}{L_f} \bar{\nabla} \cdot (L_f \bar{h}_{O_2} \frac{1}{L_f} \bar{\nabla} C_{O_2}^e \bar{C}_{O_2}) - \frac{D_{O_2}^g \bar{D}_{O_2}}{4,6 L_f \bar{h}_L} C_{O_2}^e \bar{C}_{O_2}, \quad (31)$$

soit

$$\frac{L_f^2}{D_{O_2}^g} \frac{\partial(\bar{h}_{O_2} \bar{C}_{O_2})}{\partial t} = \bar{D}_{O_2} \bar{\nabla} \cdot (\bar{h}_{O_2} \bar{\nabla} \bar{C}_{O_2}) - \frac{\bar{D}_{O_2}}{4,6 \bar{h}_L} \bar{C}_{O_2}. \quad (32)$$

Il apparaît alors le temps caractéristique pour l'adimensionnement des équations du modèle:

$$[t_{ref}] = \left[\frac{L_f^2}{D_{O_2}^g} \right] = \left[\frac{m^2}{m^2.s^{-1}} \right] = [s]$$

Le temps sans dimension est calculé comme $\bar{t} = t/t_{ref}$.

L'équation (eq. 32) devient finalement:

$$\frac{\partial(\bar{h}_{O_2} \bar{C}_{O_2})}{\partial \bar{t}} = \bar{D}_{O_2} \bar{\nabla} \cdot (\bar{h}_{O_2} \bar{\nabla} \bar{C}_{O_2}) - \frac{\bar{D}_{O_2}}{4,6 \bar{h}_L} \bar{C}_{O_2}. \quad (33)$$

Réécriture des bilans de hauteur Nous faisons de même pour les équations des bilans de hauteur (eq.28 et 29).

Ainsi, pour la hauteur disponible de O_2 en phase gazeuse et en phase liquide nous obtenons

$$\frac{\partial L_f \bar{h}_{O_2}^g}{\partial \bar{t} t_{ref}} = \Phi_r \frac{V_L^m (\bar{V}_{B_4C}^m - 2\bar{V}_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^g \bar{D}_{O_2}^g}{L_f \bar{h}_L} C_{O_2}^e \bar{C}_{O_2} + \frac{L_f}{t_{ref}} \bar{h}, \quad (34)$$

$$\frac{\partial L_f \bar{h}_{O_2}^L}{\partial \bar{t} t_{ref}} = \Phi_r \Phi_L \frac{V_L^m (\bar{V}_{B_4C}^m - 2\bar{V}_L^m)}{4,6} \frac{D_{O_2}^g \bar{D}_{O_2}^L}{L_f \bar{h}_L} C_{O_2}^e \bar{C}_{O_2} + \frac{L_f}{t_{ref}} \bar{h}, \quad (35)$$

soit en simplifiant

$$\frac{\partial \bar{h}_{O_2}^g}{\partial \bar{t}} = \Phi_r \frac{(\bar{V}_{B_4C}^m - 2\bar{V}_L^m)}{4,6} \frac{\bar{D}_{O_2}^g}{\bar{h}_L} \bar{C}_{O_2} + \bar{h}, \quad (36)$$

$$\frac{\partial \bar{h}_{O_2}^L}{\partial \bar{t}} = \Phi_r \Phi_L \frac{(\bar{V}_{B_4C}^m - 2\bar{V}_L^m)}{4,6} \frac{\bar{D}_{O_2}^L}{\bar{h}_L} \bar{C}_{O_2} + \bar{h}. \quad (37)$$

Quant à la hauteur de liquide formé, l'équation sans dimension est

$$\frac{\partial L_f \bar{h}_L}{\partial \bar{t} t_{ref}} = \Phi_r \frac{2V_L^m \bar{V}_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^g \bar{D}_{O_2}^g}{L_f \bar{h}_L} C_{O_2}^e \bar{C}_{O_2}, \quad (38)$$

soit en simplifiant

$$\frac{\partial \bar{h}_L}{\partial \bar{t}} = \Phi_r \frac{2\bar{V}_L^m}{4,6} \frac{\bar{D}_{O_2}^g}{\bar{h}_L} \bar{C}_{O_2}. \quad (39)$$

Finalement, pour la hauteur de matrice consommée, nous écrivons

$$\frac{\partial L_f \bar{h}_m}{\partial \bar{t} t_{ref}} = \Phi_r \left(\frac{\partial L_f \bar{h}_{O_2}^g}{\partial \bar{t} t_{ref}} + \frac{\partial L_f \bar{h}_L}{\partial \bar{t} t_{ref}} \right), \quad (40)$$

soit en simplifiant

$$\frac{\partial \bar{h}_m}{\partial \bar{t}} = \Phi_r \left(\frac{\partial \bar{h}_{O_2}^g}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{h}_L}{\partial \bar{t}} \right), \quad (41)$$

Estimation du temps caractéristique pour l'adimensionnement des grandeurs du modèle Nous avons vu que le temps caractéristique pour l'adimensionnement du modèle pouvait s'écrire comme

$$t_{ref} = \frac{L_f^2}{D_{O_2}^g}$$

Ce temps peut alors être estimé, connaissant les valeurs numériques (ou du moins en choisissant des valeurs numériques) pour l'épaisseur de la fissure L_f et pour le coefficient de diffusion de l'oxygène en phase gazeuse $D_{O_2}^g$.

Nous prenons:

- $L_f = 200.10^{-6} \text{ m}$ pour la longueur de la fissure, et
- $D_{O_2}^g = 9,84.10^{-10} T^{1.75} = 9,37.10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ avec une température T de 700°C pour le coefficient de diffusion de l'oxygène en phase gazeuse.

Ainsi, le temps caractéristique t_{ref} vaut $t_{ref} = (300 \cdot 10^{-6})^2 / 9,37 \cdot 10^{-5} = 9,6 \cdot 10^{-4}$ s.

Les valeurs relativement faibles des grandeurs caractéristiques du modèle montrent la raideur du problème étudié. De plus, le fait de considérer des coefficients de diffusion dont le ratio est petit (typiquement $D_{O_2}^L / D_{O_2}^g \ll 1$ est également un générateur de raideur.

3.2 Analyse de la raideur du problème étudié

Pour avoir une idée de la raideur du problème à résoudre, nous nous intéressons à la matrice jacobienne du système d'équations considéré dans ce modèle. Dans un premier temps, nous allons nous intéresser plus particulièrement au modèle simplifié concernant l'évolution des hauteurs.

3.2.1 Analyse de la raideur du modèle simplifié

La concentration C_{O_2} est fixée; on prendra $C_{O_2} = C_{O_2}^e$ connue.

Ainsi, la concentration n'étant plus une variable du modèle, l'équation pour le bilan de masse d'oxygène (eq.26) n'est plus prise en compte.

Nous avons alors seulement les équations (eq.28), (eq.29) et (eq.12) pour l'évolution des hauteurs:

$$\frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6h_L} C_{o_2} + \dot{h}, \quad (42)$$

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{o_2}, \quad (43)$$

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{o_2}. \quad (44)$$

Les variables du système sont alors $W_i = [h_{O_2}, h_L, h_P]$ et le système peut être écrit comme

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = \vec{F}_i(W_i)$$

La matrice jacobienne de ce système est

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial W_1} & \frac{\partial F_1}{\partial W_2} & \frac{\partial F_1}{\partial W_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial W_1} & \frac{\partial F_2}{\partial W_2} & \frac{\partial F_2}{\partial W_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial W_1} & \frac{\partial F_3}{\partial W_2} & \frac{\partial F_3}{\partial W_3} \end{pmatrix}$$

soit

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m) D_{O_2}^g C_{O_2}}{4,6} \frac{1}{h_L^2} & 0 \\ 0 & -\frac{2V_L^m C_{O_2} D_{O_2}^L}{4,6} \frac{1}{h_L^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{V_P^m D_{O_2}^g C_{O_2}}{h_P^2} \end{pmatrix}$$

Afin de calculer les valeurs propres λ_j de la matrice J , nous calculons le déterminant de $|J - \lambda I|$, I étant la matrice identité. Les valeurs propres sont alors obtenues

en résolvant $\det|J - \lambda I| = 0$.

Ceci nous donne:

$$\det|J - \lambda I| = \det \begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{(V_{B_4C}^m - 2V_L^m)D_{O_2}^a C_{O_2}}{4,6} \frac{1}{h_L^2} & 0 \\ 0 & -\frac{2V_L^m D_{O_2}^L C_{O_2}}{4,6} \frac{1}{h_L^2} - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{V_P^m C_{O_2}}{h_P^2} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Le calcul du déterminant donne

$$\det|J - \lambda I| = (-\lambda) \left(-\frac{2V_L^m D_{O_2}^L C_{O_2}}{4,6} \frac{1}{h_L^2} - \lambda \right) \left(-\frac{V_P^m C_{O_2}}{h_P^2} - \lambda \right) = 0$$

La matrice possède donc trois valeurs propres distinctes

- $\lambda_1 = 0$,
- $\lambda_2 = -\frac{2V_L^m D_{O_2}^L C_{O_2}}{4,6} \frac{1}{h_L^2} < 0$,
- $\lambda_3 = -\frac{V_P^m C_{O_2}}{h_P^2} < 0$.

Deux des trois valeurs propres ont donc une partie réelle négative telle que

$$\sigma \leq \text{Re}(\lambda_j) \leq \tau \leq 0$$

Calculons à présent le quotient de raideur q_r défini comme

$$q_r = \sigma/\tau$$

en prenant comme valeur de σ la plus petite des valeurs propres et comme valeur de τ la plus grande des valeurs propres de J .

Estimons donc les valeurs propres λ_2 et λ_3 avec $h_L \sim 1.10^{-6} \text{ m}$, $h_P \sim 0,5.10^{-6} \text{ m}$ et $C_{O_2} = C_{O_2}^e = 0,21 \frac{P_a}{RT} \sim 2,63$ avec $T = 700 \text{ }^\circ\text{C}$.

Nous obtenons donc

- $\lambda_2 \sim -5$, et
- $\lambda_3 \sim -6960$.

Le quotient de raideur vaut alors $q_r = \sigma/\tau \sim 1390 \gg 1$.

Le système d'équations différentielles considérées est donc raide (satisfait à: $\text{Re}(\lambda_j) \leq 0$ et $q_r \gg 1$).

3.2.2 Analyse de la raideur du modèle complet

Nous considérons à présent l'équation d'évolution de la concentration C_{O_2} . Afin de simplifier le calcul des valeurs propres du système, nous choisissons de conserver la grandeur h_{O_2} constante; on prendra $h_{O_2} = e_f$ connue.

Ainsi, la hauteur d'oxygène disponible n'étant plus une variable du modèle, l'équation pour son évolution (eq.28) n'est plus prise en compte.

Nous avons alors seulement les équations pour la concentration C_{O_2} et pour l'évolution des hauteurs h_P et h_L :

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D_{O_2}^g \vec{\nabla} C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f h_L} C_{O_2}, \quad (45)$$

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} \frac{D_{O_2}^L}{h_L} C_{O_2}, \quad (46)$$

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{O_2}. \quad (47)$$

Nous réalisons alors les changements de variables suivants:

- $X = 1/h_L$, et
- $Y = 1/h_P$.

Nous avons ainsi à résoudre le système d'équations suivant:

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = D_{O_2}^g \vec{\Delta}(C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X C_{O_2}, \quad (48)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\Phi_r \frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^3 C_{O_2}, \quad (49)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -V_P^m D_{O_2}^g Y C_{O_2}. \quad (50)$$

Les variables du système sont alors $W_i = [C_{O_2}, X, Y]$ et le système peut ainsi être écrit comme

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = \vec{F}_i(W_i) + D_{O_2} \vec{G}_i(\vec{\Delta} W_i)$$

Le terme pour la diffusion $\vec{G}_i(\vec{\Delta} W_i)$ ne concerne que la variable C_{O_2} et nous aurons donc pour ce terme de diffusion une matrice de la forme

$$\begin{pmatrix} D_{O_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\Delta} C_{O_2} \\ \vec{\Delta} X \\ \vec{\Delta} Y \end{pmatrix}$$

La raideur du système d'équations considérées ne provient à priori pas du terme de diffusion; ainsi, nous analysons cette raideur en calculant les valeurs propres de la matrice jacobienne J définie par

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial W_1} & \frac{\partial F_1}{\partial W_2} & \frac{\partial F_1}{\partial W_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial W_1} & \frac{\partial F_2}{\partial W_2} & \frac{\partial F_2}{\partial W_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial W_1} & \frac{\partial F_3}{\partial W_2} & \frac{\partial F_3}{\partial W_3} \end{pmatrix}$$

soit

$$J = \begin{pmatrix} -\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X & -\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} C_{O_2} & 0 \\ -\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^3 & -3\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^2 C_{O_2} & 0 \\ -V_P^m D_{O_2}^g Y^3 & 0 & -3V_P^m D_{O_2}^g Y^2 C_{O_2} \end{pmatrix}$$

Afin de calculer les valeurs propres λ_j de la matrice J , nous calculons le déterminant de $|J - \lambda I|$, I étant la matrice identité. Les valeurs propres sont alors obtenues en résolvant $\det|J - \lambda I| = 0$.

Ceci nous donne:

$$\det|J - \lambda I| = \det \begin{vmatrix} -\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X - \lambda & -\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} C_{O_2} & 0 \\ -\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^3 & -3\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^2 C_{O_2} - \lambda & 0 \\ -V_P^m D_{O_2}^g Y^3 & 0 & -3V_P^m D_{O_2}^g Y^2 C_{O_2} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Le calcul du déterminant donne

$$\begin{aligned} \det|J - \lambda I| &= \left(-\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X - \lambda\right) \left(-3\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^2 C_{O_2} - \lambda\right) \left(-3V_P^m D_{O_2}^g Y^2 C_{O_2} - \lambda\right) \\ &\quad - \left(-\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L X^3\right) \left(-\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} C_{O_2}\right) \left(-3V_P^m D_{O_2}^g Y^2 C_{O_2} - \lambda\right) = 0 \end{aligned}$$

La matrice possède donc trois valeurs propres distinctes

- $\lambda_1 = -3V_P^m D_{O_2}^g Y^2 C_{O_2} < 0$,
- $\lambda_2 = \frac{X \sqrt{9\left(\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L\right)^2 C_{O_2}^2 X^2 - 2\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} \frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L C_{O_2} X + \left(\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f}\right)^2 + 3\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L C_{O_2} X^2 + \frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X}}{2} > 0$,
- $\lambda_3 = -\frac{X \sqrt{9\left(\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L\right)^2 C_{O_2}^2 X^2 - 2\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} \frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L C_{O_2} X + \left(\frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f}\right)^2 - 3\frac{2V_L^m}{4,6} D_{O_2}^L C_{O_2} X^2 - \frac{D_{O_2}^L}{4,6e_f} X}}{2} < 0$.

Deux des trois valeurs propres ont donc une partie réelle négative telle que

$$\sigma \leq \text{Re}(\lambda_j) \leq \tau \leq 0$$

Calculons à présent le quotient de raideur q_r défini comme

$$q_r = \sigma / \tau$$

en prenant comme valeur de σ la plus petite des valeurs propres et comme valeur de τ la plus grande des valeurs propres de J .

Estimons donc les valeurs propres λ_1 et λ_3 avec $h_L \sim 0,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, $h_P \sim 0,5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ et $C_{O_2} = C_{O_2}^e = 0,21 \frac{P_a}{RT} \sim 2,63$ avec $T = 700 \text{ }^\circ\text{C}$.

Nous obtenons donc

- $\lambda_1 \sim -2089270$, et
- $\lambda_3 \sim -9.62$.

Le quotient de raideur vaut alors $q_r = \sigma / \tau \sim 271180 \gg 1$.

Le système d'équations considérées est donc à priori raide (satisfait à: $\text{Re}(\lambda_j) \leq 0$ et $q_r \gg 1$), mais le fait qu'une des valeurs propres soit positive fausse cette constatation: la prise en compte de la diffusion permet d'"adoucir" le problème.

4 Formulation variationnelle du problème d'oxydation

Nous allons maintenant présenter le schéma numérique choisi pour la modélisation du problème de l'oxydation d'un composite MAC.

4.1 Méthode de résolution des équations 2D par éléments finis

La méthode des éléments finis consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle (comme minimisation de l'énergie, en général) dans un espace de dimension infinie. La solution approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres comme, par exemple, ses valeurs en certains points (les noeuds du maillage).

Les avantages de cette méthode sont, entre autres, le traitement possible de géométries complexes et la détermination plus naturelle des conditions aux limites.

Ses inconvénients sont la complexité de mise en oeuvre et le coût en temps de calcul et en mémoire.

4.1.1 Eléments finis de Lagrange triangulaires de degré un (P1).

Tous les problèmes bidimensionnels comme les problèmes monodimensionnels résolus par éléments finis peuvent s'écrire sous la forme générale du problème suivant [7][8]: trouver la fonction u appartenant à l'espace de Hilbert V telle que

$$a(u, v) = l(v) \forall v \in V$$

avec V un espace de Hilbert réel muni du produit scalaire et de la norme associée, a une forme bilinéaire continue et elliptique sur V , et l une forme linéaire continue sur V .

Le théorème de Lax-Milgram conduit alors aux conclusions suivantes :

- le problème admet une solution unique u dans V ;
- si la forme bilinéaire a est symétrique, le problème variationnel est équivalent au problème de minimisation suivant : trouver $u \in V$ qui réalise le minimum de la forme quadratique $J(v) = a(v, v) - l(v)$

On doit maintenant construire un sous-espace $V_h \subset V$ de dimension finie dans lequel s'écrira le problème approché : trouver la fonction u_h appartenant à l'espace V_h telle que :

$$a(u_h, v_h) = l(v_h) \forall v_h \in V_h$$

Ce problème admet également une solution unique car $V_h \subset V$, et donc les hypothèses du théorème de Lax-Milgram sont également vérifiées dans V_h . Dans ce cas l'espace d'approximation V_h est un espace de fonctions continues affines par éléments triangulaires.

Dans chaque triangle, la restriction des fonctions de V_h est donc un polynôme de degré un de la forme $a_0 + a_1x + a_2y$ qui est donc déterminé de façon unique par

ses valeurs en trois points distincts : on choisit les trois sommets du triangle. Ceci assure la continuité globale des fonctions de V_h sur le domaine polygonal Ω .

En effet sur chaque arête commune à deux triangles adjacents, les restrictions des fonctions de V_h sont des fonctions affines fixées de manière unique par la donnée de leurs valeurs aux deux sommets sur l'arête. Globalement les fonctions de V_h seront uniquement déterminées par leurs valeurs aux sommets ou noeuds de la triangulation.

La dimension totale de V_h est donc égale au nombre de noeuds du maillage. Dans le cas de conditions aux limites de Dirichlet sur une partie de la frontière, la dimension de V_h est évidemment réduite au nombre des noeuds associés à une valeur inconnue de la solution. Elle est donc égale au nombre de noeuds total moins le nombre de noeuds où la solution est fixée par une condition de Dirichlet.

Les fonctions de base P1 La construction d'une base de V_h se fait selon la technique classique de Lagrange. On prend comme fonctions de base les N fonctions ω_I de V_h définies par les N conditions suivantes aux N noeuds (x_I, y_I) du maillage :

$$\omega_I(x_J, y_J) = \delta_{IJ}$$

Ces fonctions ont un support réduit à l'union des triangles dont le point (x_I, y_I) est un sommet. Dans cette base une fonction de V_h s'écrit :

$$v_h(x, y) = v_I \omega_I(x, y)$$

Les fonctions de forme P1 On appellera fonctions de forme P1 les restrictions des fonctions de base dans un élément. Dans chaque triangle T de sommets (A_1, A_2, A_3) , il n'y a que trois fonctions de base non-nulles. Les restrictions de ces fonctions de base $\omega_{I_1}, \omega_{I_2}, \omega_{I_3}$ sont les trois fonctions polynomiales de degré 1 prenant la valeur 1 en un des sommets et 0 aux deux autres sommets. Notons les respectivement λ_1, λ_2 , et λ_3 .

λ_1 est le polynôme de degré 1 prenant la valeur 1 en A_1 et 0 en A_2 et A_3 :

$$\lambda_1(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y$$

λ_1 est donc déterminée par le système linéaire suivant :

$$\lambda_1(x_1, y_1) = a_0 + a_1x_1 + a_2y_1 = 1 \quad (51)$$

$$\lambda_1(x_2, y_2) = a_0 + a_1x_2 + a_2y_2 = 0 \quad (52)$$

$$\lambda_1(x_3, y_3) = a_0 + a_1x_3 + a_2y_3 = 0 \quad (53)$$

Le déterminant de ce système

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} = 2\text{Aire}(T)$$

est différent de 0 si les points A_1, A_2, A_3 ne sont pas alignés.

En résolvant le système 3×3 ci-dessus et les systèmes analogues pour λ_2 et λ_3

on obtient les formules suivantes

$$\lambda_1 = \frac{x_2y_3 - x_3y_2 + x(y_2 - y_3) + y(x_3 - x_2)}{2\text{Aire}(T)} \quad (54)$$

$$\lambda_2 = \frac{x_3y_1 - x_1y_3 + x(y_3 - y_1) + y(x_1 - x_3)}{2\text{Aire}(T)} \quad (55)$$

$$\lambda_3 = \frac{x_1y_2 - x_2y_1 + x(y_1 - y_2) + y(x_2 - x_1)}{2\text{Aire}(T)} \quad (56)$$

On en déduit les expressions suivantes des gradients :

$$\frac{\partial\lambda_1}{\partial x} = \frac{y_2 - y_3}{2\text{Aire}(T)} \quad (57)$$

$$\frac{\partial\lambda_1}{\partial y} = \frac{x_3 - x_2}{2\text{Aire}(T)} \quad (58)$$

$$\frac{\partial\lambda_2}{\partial x} = \frac{y_3 - y_1}{2\text{Aire}(T)} \quad (59)$$

$$\frac{\partial\lambda_2}{\partial y} = \frac{x_1 - x_3}{2\text{Aire}(T)} \quad (60)$$

$$\frac{\partial\lambda_3}{\partial x} = \frac{y_1 - y_2}{2\text{Aire}(T)} \quad (61)$$

$$\frac{\partial\lambda_3}{\partial y} = \frac{x_2 - x_1}{2\text{Aire}(T)} \quad (62)$$

Les trois fonctions λ_1 , λ_2 , λ_3 s'appellent les coordonnées barycentriques du triangle T .

Une fonction quelconque de V_h prenant les valeurs v_1 , v_2 , v_3 aux sommets A_1 , A_2 , A_3 du triangle T s'écrit dans T sous la forme

$$v_h(x, y) = v_1\lambda_1(x, y) + v_2\lambda_2(x, y) + v_3\lambda_3(x, y).$$

4.2 Formulation variationnelle du problème considéré

Fort de ces rappels mathématiques, écrivons à présent la formulation variationnelle du problème d'oxydation considéré.

4.2.1 Ecriture des bilans de masse de l'oxygène

Rappelons alors l'équation considérée

$$\frac{\partial(h_{O_2}C_{O_2})}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (h_{O_2}D_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2}) - \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{O_2} \quad (63)$$

ainsi que les CL associées sur la frontière extérieure $\delta\Omega_e$ nous avons

$$C_{O_2} = C_{O_2}^e, \text{ ou} \quad (64)$$

$$-D_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2} \cdot \vec{n}_{fe} = \frac{D_{O_2}^g}{\delta}(C_{O_2} - C_{O_2}^e). \quad (65)$$

et sur la frontière des fibres $\delta\Omega_{fi}$:

$$D_{O_2}h_{O_2}\vec{\nabla}C_{O_2} \cdot \vec{n}_{fi} = D_{O_2}^g \frac{\epsilon_P}{h_P} C_{O_2}. \quad (66)$$

et les CI suivantes:

$$C_{O_2}(\vec{x}, 0) = C_{O_2}^e; \quad (67)$$

$$h_{O_2}(\vec{x}, 0) = e_f; \quad (68)$$

$$h_L(\vec{x}, 0) = 0; \quad (69)$$

Le problème approché s'écrit dans l'espace V_h des fonctions continues affines par triangles. Notons I l'ensemble des indices des noeuds du maillage correspondants à une valeur inconnue de la solution u . C'est à dire ici l'ensemble des noeuds n'appartenant pas la frontière Γ_0 (ici les frontières $\delta\Omega_e$ et $\delta\Omega_{f_i}$). Notons J l'ensemble des indices des sommets du maillage appartenant la frontière Γ_0 . La solution \tilde{u}_h s'écrira dans la base des ω_j pour $j \in I$ selon :

$$u_h(x, y) = \sum_{j=1}^{N-1} u_j \omega_j(x, y), \quad j \in I$$

La fonction auxiliaire u_0 sera approchée par une fonction $u_{0,h}$ continue et affine par morceaux prenant les valeurs imposées sur Γ_0 et nulle sur tous les noeuds d'indices $j \in I$:

$$u_{0,h}(x, y) = \sum_{j=1}^{N-1} u_d(x_j, y_j) \omega_j(x, y), \quad j \in J$$

Ce choix de $u_{0,h}$ présente deux avantages [7][8]:

- la solution cherchée u_h et la solution calculée \tilde{u}_h prennent les mêmes valeurs aux points où la solution u est inconnue. Il n'y a donc pas de transformation a posteriori à effectuer sur les résultats.
- les conditions aux limites ne produisent qu'une modification limitée du système linéaire qui n'intervient que sur quelques composantes du second-membre.

En intégrant dans la formulation variationnelle tous ces éléments, on obtient en définitive le problème approché dans V_h : trouver les valeurs u_j pour $j \in I$, v_h étant une fonction de base de V_h .

Dans le problème que nous considérons ici, nous faisons l'hypothèse que la solution recherchée est $u_h = C_{h,o_2}$. Cette solution du problème approché dans V_h est alors écrite sur la base des ω_j ; les fonctions h_{o_2} et h_L sont supposées être connues aux noeuds du maillage et sont représentées dans la base des ω_j . On a ainsi

$$\int \int_{\Omega} \frac{\partial(h_{o_2} C_{h,o_2})}{\partial t} v_h d\Omega = \int \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot (h_{o_2} D_{O_2} \vec{\nabla} C_{h,o_2}) v_h d\Omega - \int \int_{\Omega} \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{h,o_2} v_h d\Omega \quad (70)$$

avec $d\Omega = dx dy$.

Le terme diffusif est réécrit en utilisant les formules de Green:

$$\int \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x_i} v dx_1 dx_2 = - \int \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} u dx_1 dx_2 + \int_{\Gamma} u \cdot n_i v d\gamma = - \int \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i} u dx_1 dx_2 + CL$$

et nous obtenons en linéarisant le problème

$$\int \int_{\Omega} \frac{\partial(h_{o_2} C_{h,o_2})}{\partial t} v_h d\Omega = - \int \int_{\Omega} h_{o_2} D_{O_2} \vec{\nabla} C_{h,o_2} \vec{\nabla} v_h d\Omega + CL - \int \int_{\Omega} \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{h,o_2} v_h d\Omega$$

soit la formulation variationnelle faible suivante sur les fonctions de bases ω_j :

$$\begin{aligned} \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\frac{\partial(h_{o_2} C_{o_2})}{\partial t} \right)_j &= - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i d\Omega \right) (h_{o_2} D_{O_2} C_{o_2})_j \\ &\quad - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{o_2} \right)_j + CL_j \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left[h_{o_2} \frac{\partial C_{o_2}}{\partial t} + C_{o_2} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} \right]_j &= - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i d\Omega \right) (h_{o_2} D_{O_2} C_{o_2})_j \\ &\quad - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{o_2} \right)_j + CL_j \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) (h_{o_2} \frac{\partial C_{o_2}}{\partial t})_j &= - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i d\Omega \right) (h_{o_2} D_{O_2} C_{o_2})_j \\ - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{o_2} \right)_j &- \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) (C_{o_2} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t})_j + CL_j \end{aligned}$$

Finalement, comme la hauteur h_{O_2} est positive:

$$\begin{aligned} \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\frac{\partial C_{o_2}}{\partial t} \right)_j &= - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i d\Omega \right) \left(\frac{1}{h_{O_2}} h_{o_2} D_{O_2} C_{o_2} \right)_j \\ - \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\Phi_r \frac{1}{h_{O_2}} \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{o_2} \right)_j &- \Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\frac{1}{h_{O_2}} C_{o_2} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} \right)_j + \left(\frac{1}{h_{O_2}} CL \right)_j \end{aligned}$$

On obtient un système de N_i équations à N_i inconnues où N_i désigne le nombre de points du maillage d'indices $i \in I$ donc le nombre de noeuds correspondant à des valeurs inconnues de la solution.

Ce système s'écrit sous la forme matricielle

$$M \left(\frac{\partial C_{o_2}}{\partial t} \right) + K(D_{O_2} C_{o_2}) = MF$$

où K est la matrice de raideur de coefficients

$$K_{i,j} = \int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i dx dy$$

M la matrice de masse de coefficients

$$M_{i,j} = \int \int_{\Omega} \omega_j \omega_i dx dy$$

et F le vecteur second-membre de composantes :

$$F_j = -(\Phi_r \frac{1}{h_{O_2}} \frac{D_{O_2}^L}{4,6h_L} C_{o_2})_j - (\frac{C_{o_2}}{h_{O_2}} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t})_j + (\frac{1}{h_{O_2}} CL)_j$$

où l'on reconnaît

- un premier terme représentant les efforts surfaciques (correspondant au second-membre du problème différentiel).
- un deuxième terme (CL), intégrale curviligne, provenant des conditions aux limites de Neumann.
- un éventuel dernier terme, expression des conditions de Dirichlet non-homogènes.

Le calcul des coefficients $K_{i,j}$ de la matrice de raideur et des composantes F_i du second-membre se fait par une procédure d'assemblage des contributions apportées par chacun des éléments T_k de la triangulation [8].

Par exemple pour la matrice de raideur K :

$$K_{i,j} = \int \int_{\Omega} \nabla \omega_j \nabla \omega_i dx dy = \sum_k \int \int_{T_k} \nabla \omega_j \nabla \omega_i dx dy$$

On observe que la matrice K est très creuse, un grand nombre de ses coefficients sont nuls, en raison du choix de fonctions ω_i de support limité.

Quant à la matrice de masse, on l'obtient en utilisant les formules d'intégration exactes suivantes [8]:

$$\begin{aligned} \int \int_T \omega_i dx dy &= \frac{Aire(T)}{3} \\ \int \int_T \omega_i^2 dx dy &= \frac{Aire(T)}{6} \\ \int \int_T \omega_i \omega_j dx dy &= \frac{Aire(T)}{12} \end{aligned}$$

Ce qui donne les éléments de la matrice :

$$M(T_k) = Aire(T_k) \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

Il peut être avantageux de calculer la matrice de masse condensée (Mass Lumping). On obtient dans ce cas une matrice de masse diagonale :

$$M(T_k) = \frac{\text{Aire}(T_k)}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Regardons à présent le traitement du second membre F [8]. Son calcul s'effectue en sommant les contributions de chaque élément triangulaire: le second membre est alors connu par sa valeur aux noeuds, et peut être représenté dans la base des ω_j . Dans chaque élément, on calculera donc les contributions

$$\int \int_{\Omega} \Sigma_j F_j \omega_i \omega_j dx dy \quad \forall i$$

ce qui nous ramène au calcul de la matrice de masse élémentaire.

Regardons à présent le traitement des conditions aux limites (CL) [8]. Nous avons ici un terme de bord provenant des conditions de Neumann (ou des conditions mixtes):

$$\int_{\Gamma} C_{O_2} \cdot n_i v d\gamma$$

Son calcul s'effectue sur les éléments ayant un côté sur la frontière Γ . Il se ramène à une intégrale simple sur un côté A d'un triangle.

Nous considérons dans notre problème deux frontières :

- $\Gamma_1 = \delta\Omega_e$ (frontière extérieure);
- $\Gamma_2 = \delta\Omega_{fi}$ (frontière des fibres).

Nous avons alors:

$$CL = \int_{\Gamma} C_{O_2} \cdot n_i v d\gamma = \int_{\Gamma_1} C_{O_2} \cdot n_1 v d\gamma_1 + \int_{\Gamma_2} C_{O_2} \cdot n_2 v d\gamma_2$$

soit

$$CL = -\frac{D_{O_2}^g}{\delta} \int_{\Gamma_1} (C_{O_2} - C_{O_2}^e) v d\gamma_1 - D_{O_2}^g e_P \int_{\Gamma_2} \frac{C_{O_2}}{h_{O_2} h_P} v d\gamma_2 \quad (71)$$

Nous connaissons les valeurs de C_{O_2} , h_{O_2} et h_P aux noeuds du maillage. Si le côté A a pour extrémités les noeuds x_I et x_J , on a alors sur A :

- $C_{O_2} = (C_{O_2})_I \omega_I + (C_{O_2})_J \omega_J$,
- $h_{O_2} = (h_{O_2})_I \omega_I + (h_{O_2})_J \omega_J$,
- $h_P = (h_P)_I \omega_I + (h_P)_J \omega_J$.

Nous obtenons en utilisant la formule de Simpson [8] pour le cas général ($g = C_{O_2}$, h_{O_2} et h_P)

$$g_J \int_A \omega_I \omega_J \gamma = \frac{\text{Longueur}(A)}{6} g_J$$

$$g_J \int_A \omega_J^2 \gamma = \frac{\text{Longueur}(A)}{3} g_J$$

Pour un triangle frontière T de sommets (I, J, K) , I et J appartenant à la frontière Γ (côté A de T), nous obtenons ainsi

$$CL = \begin{pmatrix} CL_{T,I} \\ CL_{T,J} \\ CL_{T,K} \end{pmatrix} = \frac{\text{Longueur}(A)}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_I \\ g_J \\ g_K \end{pmatrix}$$

soit dans notre cas, en considérant T_1 un triangle de sommets (I_1, J_1, K_1) de la frontière Γ_1 et T_2 un triangle de sommets (I_2, J_2, K_2) de la frontière Γ_2

$$CL = \begin{pmatrix} CL_{T_1, I_1} \\ CL_{T_1, J_1} \\ CL_{T_1, K_1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} CL_{T_2, I_2} \\ CL_{T_2, J_2} \\ CL_{T_2, K_2} \end{pmatrix}$$

soit

$$CL = -\frac{D_{O_2}^g}{\delta} \frac{\text{Longueur}(A_1)}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (C_{O_2} - C_{O_2}^e)_{I_1} \\ (C_{O_2} - C_{O_2}^e)_{J_1} \\ (C_{O_2} - C_{O_2}^e)_{K_1} \end{pmatrix}$$

$$-D_{O_2}^g e_P \frac{\text{Longueur}(A_2)}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\frac{C_{O_2}}{h_{O_2} h_P})_{I_2} \\ (\frac{C_{O_2}}{h_{O_2} h_P})_{J_2} \\ (\frac{C_{O_2}}{h_{O_2} h_P})_{K_2} \end{pmatrix}$$

Ecriture des bilans de hauteur Rappelons les équations concernées

$$\frac{\partial h_{O_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4 C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4, 6h_L} C_{O_2} + \dot{h}, \quad (72)$$

$$\frac{\partial h_L}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{O_2}, \quad (73)$$

$$\frac{\partial h_P}{\partial t} = V_P^m \frac{D_{O_2}^g}{h_P} C_{O_2}. \quad (74)$$

Ces équations vont poser un problème car elles dépendent de la fonction inverse des variables.

Nous commençons donc par les réécrire avec un changement de variable permettant de s'affranchir du comportement divergent des équations pour les faibles valeurs des grandeurs (i.e. proches de 0).

Nous posons alors :

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

et

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

Ce changement de variable revient donc à résoudre

$$\frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h}, \quad (75)$$

$$\frac{\partial(1/X)}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X C_{o_2}, \quad (76)$$

$$\frac{\partial(1/Y)}{\partial t} = V_P^m D_{O_2}^g Y C_{o_2}, \quad (77)$$

soit

$$\frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h}, \quad (78)$$

$$\frac{-1}{X^2} \frac{\partial X}{\partial t} = \Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X C_{o_2}, \quad (79)$$

$$\frac{-1}{Y^2} \frac{\partial Y}{\partial t} = V_P^m D_{O_2}^g Y C_{o_2}, \quad (80)$$

et donc

$$\frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h}, \quad (81)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{o_2}, \quad (82)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -V_P^m D_{O_2}^g Y^3 C_{o_2}, \quad (83)$$

La formulation variationnelle de ces équations est beaucoup plus aisée que pour l'équation de bilan de masse. Nous obtenons simplement

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

pour l'équation sur la hauteur d'oxygène disponible,

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

pour l'équation sur la hauteur de liquide formé, et

$$\Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(\frac{\partial Y}{\partial t} \right)_j = -\Sigma_{j \in I} \left(\int \int_{\Omega} \omega_i \omega_j d\Omega \right) \left(V_P^m D_{O_2}^g Y^3 C_{o_2} \right)_j$$

pour l'équation sur la hauteur de pyC consommé.

Sous forme matricielle, ces équations se réécrivent sous la forme suivante

$$\begin{aligned} M \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} &= M(\Phi_r(V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} X C_{o_2} + \dot{h}) \\ M \frac{\partial X}{\partial t} &= -M(\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X^3 C_{o_2}) \\ M \frac{\partial Y}{\partial t} &= -M(V_P^m D_{O_2}^g Y^3 C_{o_2}) \end{aligned}$$

M étant la matrice de masse élémentaire.

4.3 Méthode de résolution temporelle des équations

Etant donnée la complexité et la raideur du problème à résoudre, il convient d'opter pour la discrétisation temporelle pour un schéma implicite.

Nous retenons principalement deux schémas de résolution:

- le schéma d'Euler, schéma à un pas,
- le schéma de Gear, schéma à deux pas.

Ces deux schémas sont inconditionnellement stables. Le schéma de Gear semble plus avantageux car particulièrement adapté dans le cas d'équations raides (fortes variations locales des constantes).

4.3.1 Schéma d'Euler implicite

La discrétisation du problème temporel se fait de la manière suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} \sim \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} \quad (84)$$

avec la condition initiale $U_j^0 = U_0(x_j)$.

Nous résolvons alors pour l'équation sur le bilan de masse

$$MU^{n+1} = MU^n - \Delta t KU^{n+1} + \Delta t F$$

avec $U = C_{O_2}$, M la matrice de masse, K la matrice de raideur, F le second membre et Δt le pas de temps.

Quant aux équations sur les bilans de hauteur, nous résolvons

$$MU^{n+1} = MU^n + \Delta t F$$

avec $U = h_{O_2}$, X et Y .

4.3.2 Schéma de Gear implicite

La discrétisation du problème temporel se fait de la manière suivante

$$\frac{\partial U}{\partial t} \sim \frac{\frac{3}{2}U_j^{n+1} - 2U_j^n + \frac{1}{2}U_j^{n-1}}{\Delta t} \quad (85)$$

avec la condition initiale $U_j^0 = U_0(x_j)$ et la nécessité de connaître U_j^1 . Nous résolvons alors pour l'équation sur le bilan de masse

$$\frac{3}{2}MU^{n+1} = 2MU^n - \frac{1}{2}MU^{n-1} - \Delta tKU^{n+1} + \Delta tF$$

soit

$$\left[\frac{3}{2}M + \Delta tK\right]U^{n+1} = 2MU^n - \frac{1}{2}MU^{n-1} + \Delta tF$$

avec $U = C_{O_2}$, M la matrice de masse, K la matrice de raideur, F le second membre et Δt le pas de temps.

Quant aux équations sur les bilans de hauteur, nous résolvons

$$\frac{3}{2}MU^{n+1} = 2MU^n - \frac{1}{2}MU^{n-1} + \Delta tF$$

avec $U = h_{O_2}$, X et Y .

4.4 Méthode de résolution des équations 1D par éléments finis

Pour un problème 1D donné, nous considérons cette fois un intervalle $[a, b]$. Cet intervalle est discrétisé en N sous-intervalles ou éléments $T_i = [x_{i-1}, x_i]$. Les éléments T_i n'ont pas forcément la même longueur; $V_{o,h}$ est alors l'espace des fonctions continues affines par morceaux (sur les segments T_i) et nulles aux extrémités a et b .

On rappelle que les fonctions $v_h \in V_{o,h}$ sont déterminées de manière unique par la donnée de leurs valeurs aux points x_i pour $i = 1, \dots, N-1$.

Ainsi, dans le cas 1D, nous ne considérons plus des triangles comme éléments de base du maillage, mais des segments.

La formulation variationnelle du problème considéré se fait de la même manière que dans le cas 2D, avec cette fois des intégrales simples sur les segments de $[a, b]$. Ainsi le problème approché dans V_h est

$$\int_a^b \frac{\partial(h_{o_2}C_{h,o_2})}{\partial t} v_h dx = \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} \cdot (h_{o_2}D_{O_2} \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}) v_h dx - \int_a^b \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{h,o_2} v_h dx \quad (86)$$

pour le bilan de masse d'oxygène, soit en utilisant une intégration par parties sur le terme diffusif linéarisé

$$\int_a^b \frac{\partial(h_{o_2}C_{h,o_2})}{\partial t} v_h dx = -D_{O_2} \int_a^b h_{o_2} \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2} \frac{\partial}{\partial x} v_h dx \quad (87)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(b) \frac{\partial}{\partial x} v_h(b) - \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(a) \frac{\partial}{\partial x} v_h(a) \quad (88)$$

$$- \int_a^b \Phi_r \frac{D_{O_2}^L}{4, 6h_L} C_{h,o_2} v_h dx \quad (89)$$

et pour les bilans de hauteur:

$$\int_a^b \frac{\partial h_{h,o_2}}{\partial t} v_h dx = \Phi_r (V_{B_4C}^m - 2V_L^m) \frac{D_{O_2}^g}{4,6} \int_a^b X_h C_{o_2} dx + \int_a^b \dot{h} dx, \quad (90)$$

$$\int_a^b \frac{\partial X_h}{\partial t} dx = -\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} \int_a^b X_h^3 C_{o_2} dx, \quad (91)$$

$$\int_a^b \frac{\partial Y_h}{\partial t} dx = -V_P^m D_{O_2}^g \int_a^b Y_h^3 C_{o_2} dx, \quad (92)$$

La formulation variationnelle du problème s'écrit finalement

$$\begin{aligned} \Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\frac{\partial C_{h,o_2}}{\partial t} \right)_j &= -\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \frac{\partial \omega_j}{\partial x} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} dx \right) \left(\frac{1}{h_{O_2}} h_{o_2} D_{O_2} C_{h,o_2} \right)_j \\ -\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\Phi_r \frac{1}{h_{O_2}} \frac{D_{O_2}^L}{4,6 h_L} C_{h,o_2} \right)_j &- \Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\frac{1}{h_{O_2}} C_{h,o_2} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} \right)_j \\ &+ \left(\frac{1}{h_{O_2}} \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(b) \frac{\partial}{\partial x} v_h(b) - \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(a) \frac{\partial}{\partial x} v_h(a) \right)_j \end{aligned}$$

pour l'évolution de la concentration en oxygène,

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

pour l'équation sur la hauteur d'oxygène disponible,

$$\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\frac{\partial X_h}{\partial t} \right)_j = -\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\Phi_r \frac{2V_L^m D_{O_2}^L}{4,6} X_h^3 C_{o_2} \right)_j$$

pour l'équation sur la hauteur de liquide formé, et

$$\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(\frac{\partial Y_h}{\partial t} \right)_j = -\Sigma_{j \in I} \left(\int_a^b \omega_i \omega_j dx \right) \left(V_P^m D_{O_2}^g Y_h^3 C_{o_2} \right)_j$$

Sous forme matricielle, ces équations se réécrivent sous la forme suivante

$$M \left(\frac{\partial C_{o_2}}{\partial t} \right) + K (D_{O_2} C_{o_2}) = MF$$

où F est le vecteur second-membre de composantes :

$$F_j = -\left(\Phi_r \frac{1}{h_{O_2}} \frac{D_{O_2}^L}{4,6 h_L} C_{o_2} \right)_j - \left(\frac{C_{o_2}}{h_{O_2}} \frac{\partial h_{o_2}}{\partial t} \right)_j + \left(\frac{1}{h_{O_2}} \left(\frac{1}{h_{O_2}} \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(b) \frac{\partial}{\partial x} v_h(b) - \frac{\partial}{\partial x} C_{h,o_2}(a) \frac{\partial}{\partial x} v_h(a) \right) \right)_j$$

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

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

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

Le calcul des matrices de raideur et de masse ainsi que du second membre se fait par assemblage des contributions des éléments $T_i = [x_{i-1}, x_i]$ avec $i = 1, \dots, N-1$.

Les éléments de la matrice de raideur K sont alors calculés comme

$$K_{ij} = \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} \omega_i(x) \frac{\partial}{\partial x} \omega_j dx$$

et les éléments de la matrice de masse M comme

$$M_{ij} = \int_a^b \omega_i(x) \omega_j dx$$

Considérons l'élément $T_i = [x_{i-1}, x_i]$. Sur cet élément, il n'y a que deux fonctions de base non nulles : ω_{i-1} et ω_i , définies comme

$$\omega_{i-1}|_{T_i} = \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}}$$

$$\omega_i|_{T_i} = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \omega_{i-1}|_{T_i} = \frac{-1}{x_i - x_{i-1}}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \omega_i|_{T_i} = \frac{1}{x_i - x_{i-1}}$$

L'écriture des matrices de masse et de raideur ne dépend plus alors de l'aire des éléments comme en 2D mais des longueurs de segments.

5 Conclusion

Dans ce papier une modélisation de l'oxydation des composites CMC à matrice autocicatrisante est présentée. Le problème physique considéré est décrit et sa mise en équation permet de retenir un schéma numérique approprié au phénomène d'oxydation de la matrice. La nouvelle idée directrice par rapport aux travaux existants sur le sujet est de travailler sur une vue 2D dans le plan de la fissure transverse aux fibres. Ainsi, les quantités définies dans la direction parallèle aux fibres sont des champs 2D définis sur des domaines ad hoc. La création du bouchon d'oxyde amène à l'existence de domaines à frontière libre. Les résultats obtenus pour la première partie de création du bouchon fera l'objet d'un rapport.

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).
- [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] Cluzel C., Baranger E., Ladevèze P. et Mouret A., “Prédiction de la durée de vie des composites céramiques à matrice autocicatrisante: II- analyse des mécanismes de fissuration et d’oxydation” (2006).
- [5] Quemard L., Rebillat F., Guette A., Tawil H. et Louchet-Pouillier C., “Self-healing mechanisms of a SiC fiber reinforced multilayered ceramic matrix”, *J. of European Ceramic Society*, **27-4**, 2085 (2007).
- [6] Rebillat F., Martin X. et Guette A., “Kinetic oxydation laws of boron carbide in dry and wet environments”, *HTCMC proceeding* (2004).
- [7] Jacques-Hervé SAIAC, “Mathématiques et méthodes numériques”, *Cours E.S.C.P.I. - Second Cycle* (2009).
- [8] Bijan Mohammadi et Jacques-Hervé SAIAC, “Pratique de la simulation numérique”, *DUNOD industries et technologies* (2003).



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