

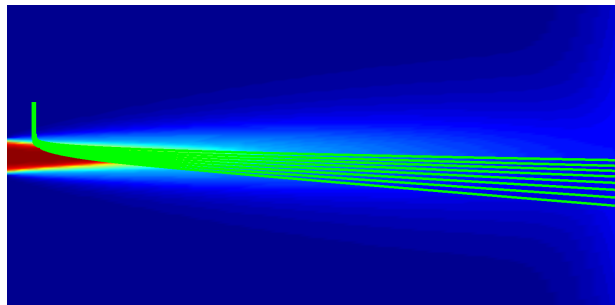
LERMPS



***Modélisation des propriétés effectives de dépôts
élaborés par projection thermique***

Rodolphe BOLOT

***Université de Technologie de Belfort-Montbéliard,
Laboratoire d'Études et de Recherches sur les Matériaux,
les Procédés et les Surfaces - LERMPS***



Limoges, le 5 juin 2009

***Réseau des Plasmas Froids
ATELIER « Procédés Plasmas thermiques, dépôts et découpe »***

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

- Dépôt = enchevêtrement de lamelles, pores interlamellaires et globulaires, fissures (céramiques), oxydes (métaux et alliages)
- L'architecture du réseau poreux influence les propriétés effectives d'un dépôt
- Les dépôts élaborés par projection thermique présentent des propriétés effectives très différentes de celles du (des) matériau(x) dense(s) qui le constitue(nt)

➤ **Exemples:**

- Conductivité thermique effective d'un dépôt de zircone partiellement stabilisée à l'yttria = typiquement 2 fois inférieure à celle du matériau dense.
- Conductivité thermique effective d'un dépôt abrasable AISi/polyester typiquement 200 fois inférieure à la conductivité de AISi.
- Module d'Young d'un dépôt poreux d'alumine typiquement 6 fois inférieur à celui de l'alumine.

➤ **Buts de l'estimation des propriétés:**

Est-ce une bonne barrière thermique?

Quel sera le comportement du dépôt lors de sollicitations?

Exemple d'intérêt d'une estimation

➤ Aspects thermiques/contraintes² (SYSWELD)

² J. Li & al., "Numerical study of residual stresses formation during the APS process", ITSC, Osaka, 2004.

Exemple: réalisation d'un dépôt d'alumine² de 200 μm sur un substrat d'acier de 1 mm d'épaisseur (50x10mm) en 10 passes –
Température en fin de projection: 500°C

Introduction

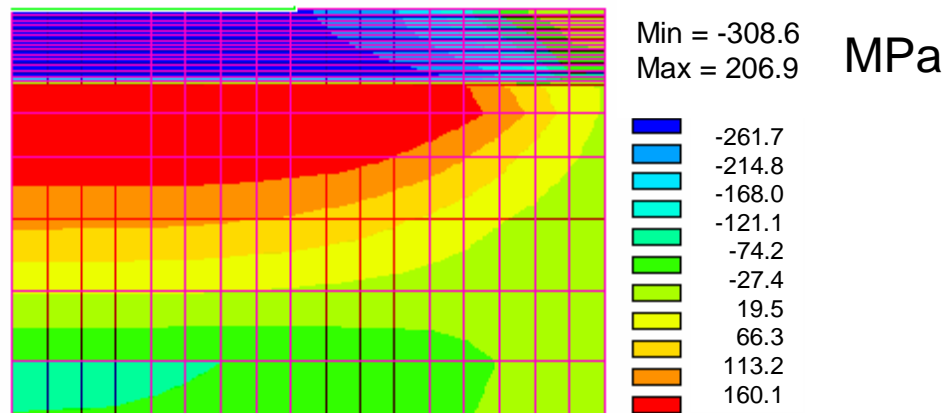
Méthodes
numériques

Discrétisation

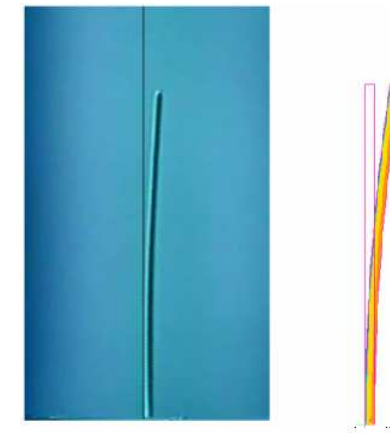
Applications

Développements
récents

Perspectives



✓ Champ de contrainte σ_{xx} dans le dépôt après refroidissement de l'ensemble dépôt/substrat à température ambiante



✓ Déformées expérimentale (flèche= 2 mm) et calculée (3 mm)

➤ Propriétés:

$\alpha_{\text{acier}} = 16.5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$; $\alpha_{\text{alumine}} = 5.1 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$; $E_{\text{dépôt}} = 60 \text{ GPa}$

Application à la conductivité thermique

➤ Influence du taux de porosité:

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

✓ Mesures: méthode « flash »: diffusivité

✓ Corrélations empiriques

Klemens (1991):
$$\frac{\lambda_{eff}}{\lambda_{dens}} = (1 - C \varepsilon)$$

Pores sphériques:

Raghavan (1998):
$$\frac{\lambda_{eff}}{\lambda_{dens}} = (1 - \varepsilon)^{3/2} + \frac{\lambda_{pore}}{\lambda_{dens}} \varepsilon^{1/4}$$

Hasselman (1978):
$$\frac{\lambda_{eff}}{\lambda_{dens}} = \frac{1}{1 + (2\varepsilon/\pi)(b/a)}$$
 Ellipsoïdes de révolution:

$C=4/3$; ε taux de porosité ; b/a =allongement

Introduction

**Méthodes
numériques**

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

➤ **Éléments finis:**

✓ **Architectures simplifiées ou non**

OOOF: Finite Element Analysis of Microstructures – logiciel
développé par NIST sous LINUX

Inconvénient principal: extrêmement gourmand en RAM

(impossibilité de traiter de très grosses images sans approximations)

➤ **Différences finies:**

Dorvaux (Proc. 85th AGARD SMP Meeting, 1997)

Bolot *et al.* (Num. Heat Trans., **47**(9), 2005)

- ✓ Architecture réelle du réseau poreux capturée par MEB
- ✓ Analyse d'image (...binarisation)
- ✓ Maillage = image (pixel = cellule)
- ✓ Système d'équations (taille = nb pixels)
- ✓ Résolution (méthodes SOR ou LSOR)

Introduction

**Méthodes
numériques**

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

- ▶ **Estimation de la conductivité thermique effective de dépôts élaborés par projection**
 - Développement d'un code de calcul basé sur l'analyse d'images de coupes micrographiques obtenues par MEB
 - Première étape = seuillage et binarisation
 - Maillage = pixels de l'image
 - Propriétés: chaque pixel présente une conductivité thermique fonction de sa couleur (ex image binaire: blanc=matrice ; noir=pores)
 - Exemple: image de 1024x768 donne 0.786 millions de cellules et autant d'équations dans le système à résoudre
 - Nécessité d'utiliser des algorithmes de résolution avancés (SOR et LSOR)

[1] R. Bolot et al., *Num. Heat Trans. Part A: Applications*, **47**(9) 875-898 (2005)

[2] G. Antou & al., *High Temperature Material Processes* **9** (1) 109-125 (2005)

[3] S. Costil & al., *Journal of Thermal Spray Technology*, **16** (5-6) (2007)

[4] R. Bolot & al., *Welding and Cutting*, **8** (2) 104-109 (2009)

Conservation de la chaleur dans chaque pixel

► Discrétisation bidimensionnelle

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

$$-\vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) = 0$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0$$

$$-\frac{2(T(i+1, j) - T(i, j))}{\frac{1}{\kappa(i+1, j)} + \frac{1}{\kappa(i, j)}} + \frac{2(T(i, j) - T(i-1, j))}{\frac{1}{\kappa(i, j)} + \frac{1}{\kappa(i-1, j)}} - \frac{2(T(i, j+1) - T(i, j))}{\frac{1}{\kappa(i, j+1)} + \frac{1}{\kappa(i, j)}} + \frac{2(T(i, j) - T(i, j-1))}{\frac{1}{\kappa(i, j)} + \frac{1}{\kappa(i, j-1)}} = 0$$

$$Ap(i, j)T(i, j) = Ax(i, j)T(i-1, j) + Ax(i+1, j)T(i+1, j) + Ay(i, j)T(i, j-1) + Ay(i, j+1)T(i, j+1)$$



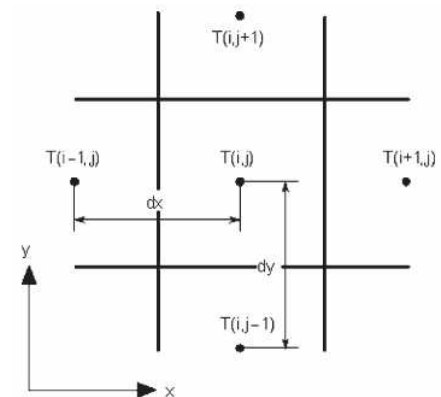
1 équation linéaire par pixel

avec :

$$Ax(i, j) = \frac{2}{\frac{1}{\kappa(i, j)} + \frac{1}{\kappa(i-1, j)}} \quad \text{et} \quad Ay(i, j) = \frac{2}{\frac{1}{\kappa(i, j)} + \frac{1}{\kappa(i, j-1)}}$$

et :

$$Ap(i, j) = Ax(i, j) + Ax(i+1, j) + Ay(i, j) + Ay(i, j+1)$$



Porosité et conductivité thermique effective

► Flux thermique / conductivité apparente^{5,6}

⁵"A two-dimensional heat transfer model for thermal barrier coating average thermal conductivity computation" *Num. Heat Trans.*, 47(9), 2005 ; ⁶*Matériaux 2006, Dijon, France*

Introduction

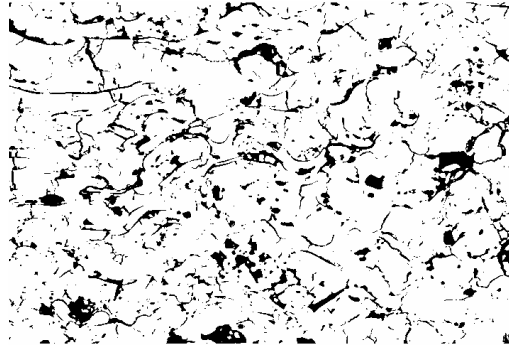
Méthodes numériques

Discrétisation

Applications

Développements récents

Perspectives



✓ Réseau poreux (maillage)

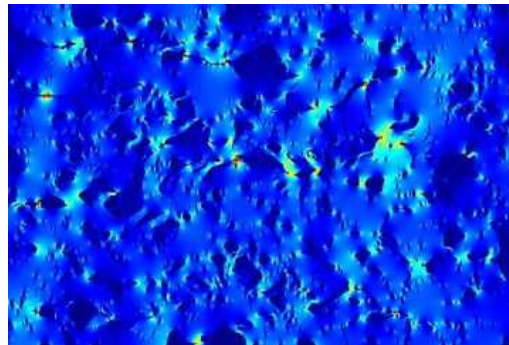
Ex: Dépôt de zircone
(poudre Saint-Gobain
PLASMATEX 108S,
Y₂O₃, 8% en masse)
MEB: 0.144µm/pixel

$$K_{\text{matrice}} = 2.5$$

$$K_{\text{pores}} = 0.025$$



✓ Température



✓ Flux thermique

▪ **Taux de porosité: 12.6%**
Résultats: $K_{\text{eff}} / K_{\text{matrice}} = 0.47$
($K_{\text{eff}} \approx 1.18 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)

▪ **Processus habituel:**
Au moins 10 captures aléatoires différentes par échantillon (puis moyenne)

▪ **Originalité / travaux antérieurs:**
>LSOR / SOR (résolution)= gain de temps

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

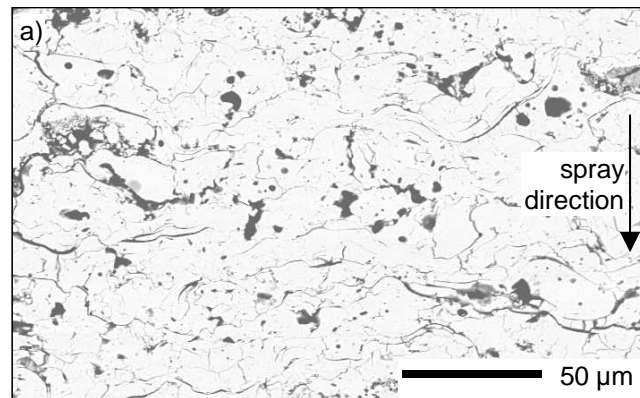
ApplicationsDéveloppements
récents

Perspectives

➤ Influence de la refusion LASER *in-situ* sur la conductivité d'une barrière de type YPSZ^{7,8}

⁷ G. Antou, "Pore network architecture and thermal conductivity of Y-PSZ TBCs *in situ* remelted during their deposition", ITSC, Bâle, 2005. ⁸ R. Bolot & al., *Matériaux 2006*, Dijon, France.

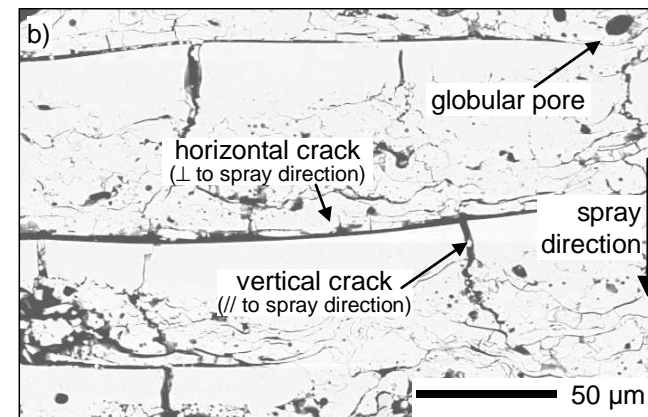
Poudre METCO 204B NS



✓ Procédé conventionnel:
 $\kappa_{\text{eff}}/\kappa_{\text{dens}} = 0.37$

➤ Conclusions:

- Fissures horizontales = barrières thermiques efficaces
- Point clé: avoir une résolution suffisante pour capturer les fissures horizontales (notamment interlamellaires)



✓ Refusion LASER *in-situ*:
 $\kappa_{\text{eff}}/\kappa_{\text{dens}} = 0.22$
(diminution de 40%)

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

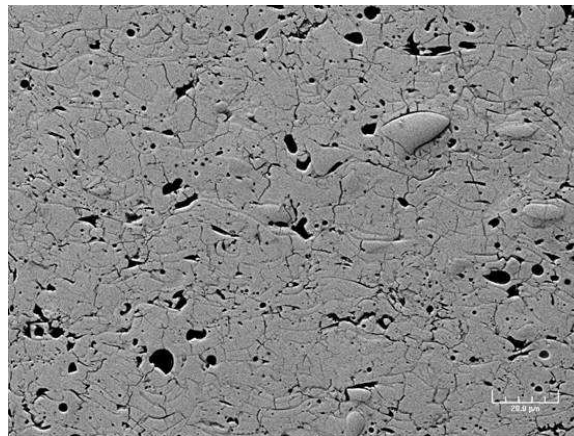
ApplicationsDéveloppements
récents

Perspectives

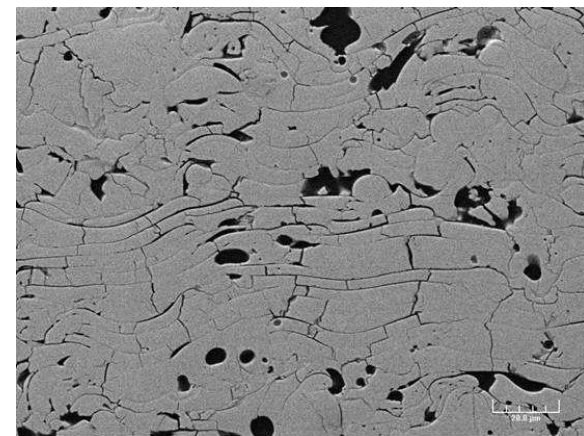
➤ Influence du procédé d'élaboration sur la conductivité effective de dépôts d'alumine⁸

⁸ S. Costil & al. "On the Role of Spraying Process on Microstructural, Mechanical and Thermal Response of Alumina Coatings", *Journal of Thermal Spray Technology*, **16** (5-6) (2007)

1. Poudre d'alumine en APS conventionnel
2. ROKIDE® (Procédé de projection de baguettes d'alumine à la flamme, développé par *Saint-Gobain Coating Solutions*)



✓ Procédé APS:
 $k_{\text{eff}} R = 18 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$



✓ Procédé ROKIDE®:
 $k_{\text{eff}} R = 9 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$

R : valeurs calculées à température ambiante

Exemples d'applications

► Composites abrasables de type AlSi/polyester⁹

⁹R. Bolot, J.L. Seichepine, F. Vucko, C. Coddet, D. Sporer, P. Fiala, B. Bartlett, "Thermal Conductivity of AlSi/Polyester Abradable Coatings", *Welding and Cutting* 8 (2) (2009), pp. 104-109.

Introduction

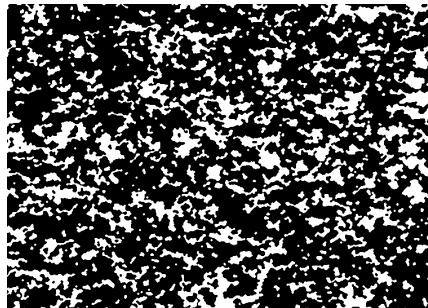
Méthodes numériques

Discrétisation

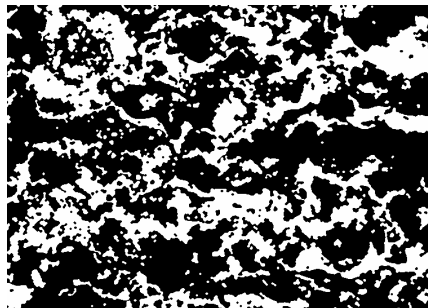
Applications

Développements récents

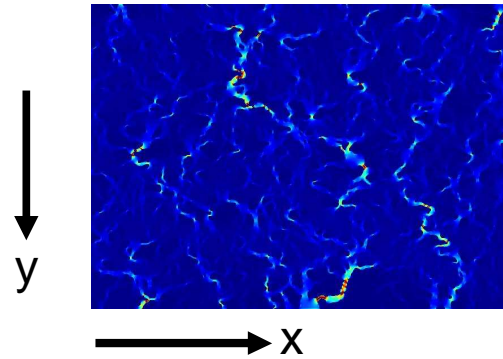
Perspectives



x50 (3 μ m/pixel)



x200 (0.75 μ m/pixel)



Calcul:

$$\kappa_{\text{eff-y}} = 0.47 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

Mesures:

$$\kappa_{\text{eff-y}} = 0.53 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

Calculs:

$$\kappa_{\text{eff-x}} = 4.5 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

$$(\kappa_{\text{eff-y}} = 0.85)$$

Données:

$$\kappa_{\text{phase1(Al/Si)}} = 130 \text{ (pixels blancs)}$$

$$\kappa_{\text{phase2(polyester)}} = 0.17 \text{ (pixels noirs)}$$

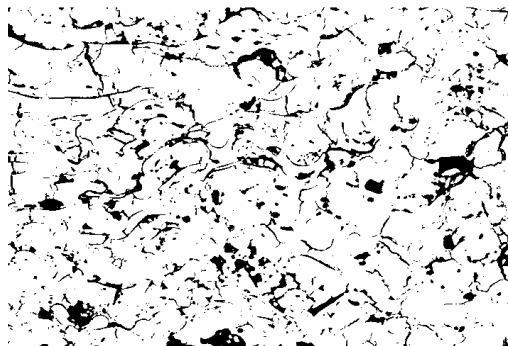
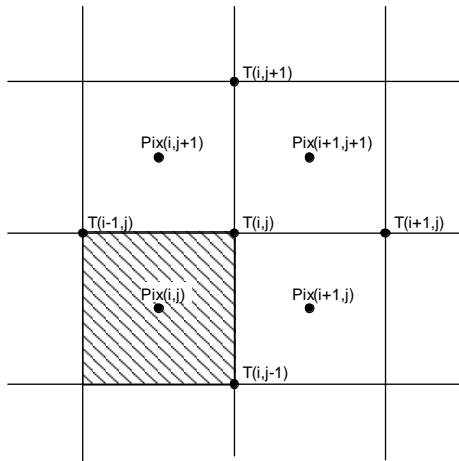
Conclusions:

- Continuité de la phase blanche si grossissement trop élevé
- Nécessité de couvrir une zone suffisamment large

➤ Formulation nodale (plutôt que centres de cellules)

Discrétisation différente:

$$Ap(i, j)T(i, j) = Ax(i, j)T(i-1, j) + Ax(i+1, j)T(i+1, j) + Ay(i, j)T(i, j-1) + Ay(i, j+1)T(i, j+1)$$



avec :

$$Ax(i, j) = \frac{\kappa(i, j) + \kappa(i, j+1)}{2} \quad \text{et} \quad Ay(i, j) = \frac{\kappa(i, j) + \kappa(i+1, j)}{2}$$

et :

$$Ap(i, j) = Ax(i, j) + Ax(i+1, j) + Ay(i, j) + Ay(i, j+1)$$

Résultats sur la première image (YPSZ, poudre PLASMATEX 108S):

■ Formulation initiale:

$$\kappa_{\text{eff}} / \kappa_{\text{matrice}} = 0.47 \quad \kappa_{\text{eff}} = 1.18 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

■ Formulation nodale:

$$\kappa_{\text{eff}} / \kappa_{\text{matrice}} = 0.52 \quad \kappa_{\text{eff}} = 1.31 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

**Développements
récents**

Perspectives

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

**Développements
récents**

Perspectives

‣ Formulation « split pixels »

Exemple: 4 volumes d'intégration/pixel au lieu de 1

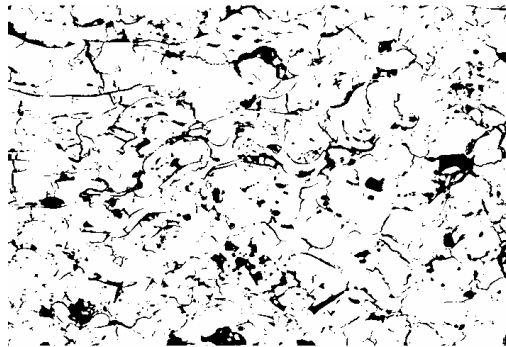


Image initiale: 712x484
volumes d'intégration

Split pixels: 1424x968
volumes d'intégration

Résultats sur la première image (YPSZ,
poudre PLASMATEX 108S):

- Formulation initiale:

$$K_{\text{eff}} / K_{\text{matrice}} = 0.47 \quad K_{\text{eff}} = 1.18 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

- Formulation nodale:

$$K_{\text{eff}} / K_{\text{matrice}} = 0.52 \quad K_{\text{eff}} = 1.31 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

- Formulation initiale avec Split4:

$$K_{\text{eff}} / K_{\text{matrice}} = 0.48 \quad K_{\text{eff}} = 1.205 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

- Formulation nodale avec Split4:

$$K_{\text{eff}} / K_{\text{matrice}} = 0.51 \quad K_{\text{eff}} = 1.28 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$$

‣ **Conclusion:** Convergence des 2 formulations avec SPLIT pixels
(différence réduite de 10 à 5% entre les 2 formulations)

Introduction

Méthodes
numériques

Discrétisation

Applications

Développements
récents

Perspectives

- ▶ **Thèse Jiang Hao QIAO (début nov. 2008)**
 - Extension au cas du module d'Young (calculs mécaniques 2D)
 - Modélisation tridimensionnelles de la conductivité thermique (base images volumiques)
 - Étapes:
 - Mise au point du modèle 3D: images de synthèse
 - Validation: images 3D reconstituées (base 2D)
 - Applications: Images 3D réelles (tomographie)

Merci de votre attention

Introduction

Méthodes
numériques

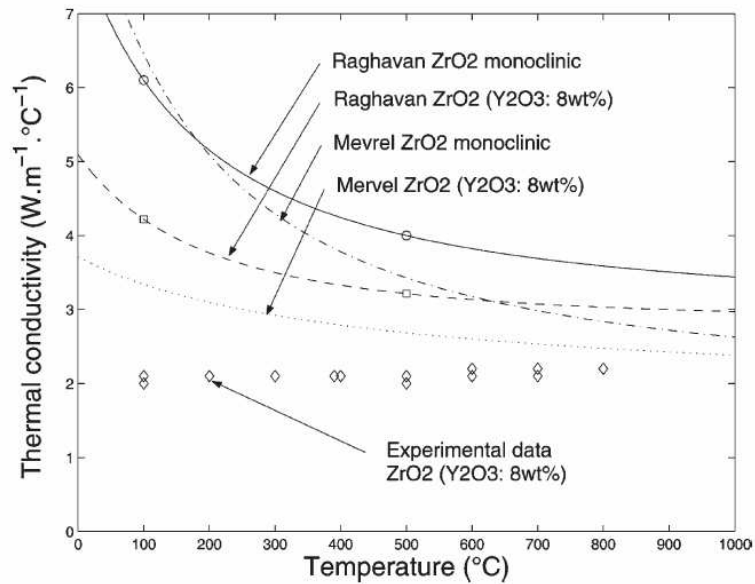
Discrétisation

Applications

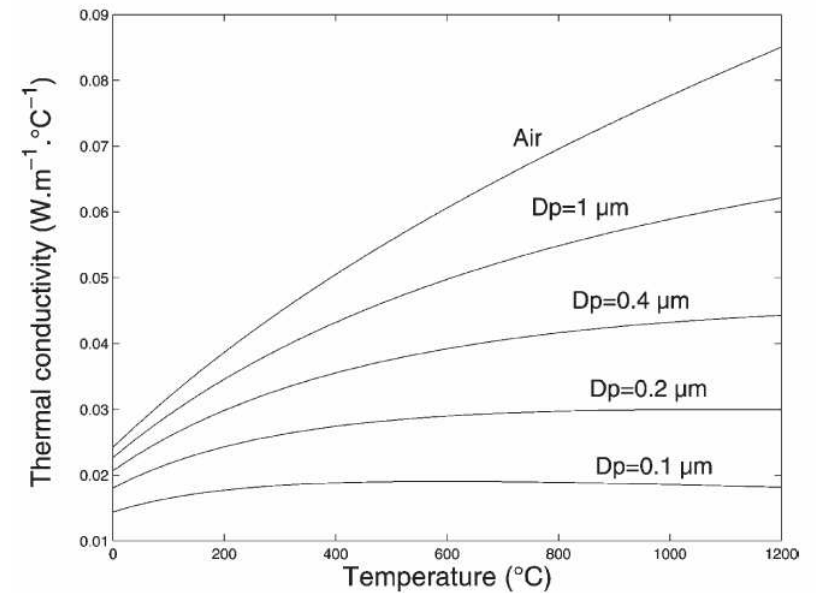
Développements
récents

Perspectives

➤ Zircone partiellement stabilisée à l'yttria



✓ Y-PSZ



✓ Pores