



**HAL**  
open science

# Contraintes résiduelles et évolutions microstructurales dans les procédés de fabrication et de mise en forme

Daniel Weisz-Patrault

► **To cite this version:**

Daniel Weisz-Patrault. Contraintes résiduelles et évolutions microstructurales dans les procédés de fabrication et de mise en forme. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Sorbonne Université, 2021. tel-03235558v2

**HAL Id: tel-03235558**

**<https://hal.science/tel-03235558v2>**

Submitted on 18 Jun 2021

**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.



# Mémoire de Habilitation à Diriger les Recherches

*présenté à*

**Sorbonne Université**



*sur le sujet*

**Contraintes résiduelles et évolutions microstructurales dans les  
procédés de fabrication et de mise en forme**

*par*

**Daniel WEISZ-PATRAULT**

Chargé de Recherches CNRS

Laboratoire de Mécanique des Solides, École Polytechnique, Palaiseau



*le mercredi 19 mai 2021 devant le jury composé de*

<b>Pierre Montmitonnet,</b>	DR CNRS (CEMEF, Mines ParisTech)	Rapporteur
<b>Samuel Forest,</b>	DR CNRS (Centre des Matériaux, Mines ParisTech)	Rapporteur
<b>Roland Logé,</b>	Professeur (Thermomechanical Metallurgy Lab, EPFL)	Rapporteur
<b>Jean-Baptiste Leblond,</b>	Professeur (Institut d'Alembert, Sorbonne Université)	Examineur
<b>Frédéric Barlat,</b>	Professeur (Pohang University of Science and Technology)	Examineur
<b>Andrei Constantinescu,</b>	DR CNRS (LMS, École Polytechnique)	Examineur
<b>Alain Ehrlacher,</b>	Professeur (Navier, École des Ponts ParisTech)	Examineur



# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>iii</b>
<b>Remerciements</b>	<b>v</b>
<b>Présentation générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Méthodes inverses en temps réel</b>	<b>3</b>
1.1 Introduction . . . . .	4
1.2 Méthode inverse pour des capteurs de contact en temps réel . . . . .	4
1.3 Mesure de contraintes résiduelles en temps réel . . . . .	7
1.4 Développements théoriques pour l'élasticité 3D . . . . .	9
<b>2 Simulations non-linéaires rapides de procédés</b>	<b>15</b>
2.1 Introduction . . . . .	16
2.2 Table de sortie . . . . .	16
2.3 Bobinage . . . . .	19
2.4 Fabrication additive . . . . .	30
<b>3 Modèles macroscopiques à mésostructure</b>	<b>47</b>
3.1 Introduction . . . . .	48
3.2 Inclusion glissante pour la nucléation de phase . . . . .	48
3.3 Plasticité de transformation . . . . .	50
3.4 Modèle multiéchelle de croissance de grain . . . . .	54
<b>4 Identification de comportements en dynamique</b>	<b>75</b>
4.1 Introduction . . . . .	76
4.2 Identification du comportement de joints collés . . . . .	76
4.3 Identification Bayésienne des incertitudes . . . . .	80
<b>Projets en cours et perspectives de recherches</b>	<b>89</b>

*À la mémoire de mon grand-père Michel Weisz  
et de son ami Dominique François, qui m'avait fait l'honneur de présider mon jury de thèse*

# Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu Pierre Montmitonnet, Samuel Forest et Roland Logé, qui ont accepté de rapporter sur ce travail, mais aussi Jean-Baptiste Leblond et Frédéric Barlat qui ont accepté de participer au jury. Leurs commentaires, conseils et critiques me seront sans aucun doute très utiles pour faire évoluer mes recherches et mes réflexions.

Bien sûr, je tiens aussi à remercier tous les collègues, qui ont contribué aux travaux exposés dans ce mémoire. Je saisis cette occasion pour saluer mon collègue et ami Alain Ehrlacher, qui a su me transmettre son enthousiasme pour s'aventurer dans des sujets variés. Je lui dois beaucoup, d'abord parce qu'il a été mon professeur et directeur de thèse, mais aussi parce qu'il m'a fait confiance, quand je suis devenu un chercheur indépendant, pour encadrer avec moi des sujets que j'avais en tête, ou quand il m'a confié son cours de "mécanique physique des matériaux" à l'École des Ponts ParisTech. Travailler avec lui est toujours une source d'inspiration et de satisfaction. Je remercie également Andrei Constantinescu, avec qui j'ai plaisir à travailler, et qui m'a fait confiance, dès mon arrivée au LMS, pour co-encadrer avec lui la première thèse de ma carrière. Je remercie aussi Éric Charkaluk, dont la bonne humeur est communicative, et avec qui je collabore avec plaisir dans le monde de la fabrication additive, dont il m'a ouvert les portes. À mon arrivée au LMS, j'ai partagé le bureau de Gérard Gary, qui m'a initié aux essais en dynamique, et a nourri mon intérêt pour ces aspects de la mécanique que je ne connaissais pas. Pour cela et pour le temps passé à discuter je le remercie. Je pense également à mes collègues mathématiciens de l'université de Weimar : Klaus Guerlebeck, Sebastian Bock et Dmitrii Legatiuk, avec qui j'ai travaillé sur des aspects connexes à mes recherches, et qui m'ont fait l'honneur de m'inviter à de nombreuses reprises. Par ailleurs, j'ai toujours eu le goût des applications, et en cela je remercie Nicolas Legrand, qui est une source, apparemment inépuisable, de problèmes concrets et difficiles. Mais la recherche c'est aussi des développements qui se dessinent au travers de nouvelles collaborations, merci aux chercheurs qui se sont engagés avec moi dans ces projets, en particulier Michael Peigney, Benoit Appolaire, Sabine Denis, Grégoire Allaire, Jean-Yves Hascoët, Christophe Josserand, Christophe Tournier, Ahmed El Bartali et Jean-François Witz.

Cette présentation est aussi l'occasion de remercier les étudiants, qui m'ont fait confiance pour encadrer leur stage de master, leur thèse ou leur post-doctorat, et à qui je dois bien des aspects de ces travaux. Un grand merci à eux tous et en particulier à Maxime Gantier, Thomas Koedinger, Joffrey Bluthé, Anthony Janin, Sofia Sakout, Nicolas Dimov, Insaf Echerradi, Shahul Hameed, Charles Francart et Pierre Margerit.

Je remercie aussi Laurent Maghdissian pour sa bonne humeur, son soutien et ses conseils pour mes cours dans le département génie mécanique de l'École des Ponts ParisTech, surtout depuis que les enseignements à distance se sont généralisés. Merci également à Karam Sab, qui m'a intégré au département, et pour son soutien depuis que je suis étudiant.

Je remercie chaleureusement tous ceux qui font du LMS un laboratoire accueillant, agréable et stimulant, qu'ils soient chercheurs, étudiants, ingénieurs, techniciens, secrétaires ou gestionnaires, que ce soit au travers de discussions professionnelles ou au détour d'un coca (pour moi) et d'un café pour le reste des gens normalement constitués.

Enfin, je remercie chaleureusement ma mère et ma tante, Catherine et Emmanuelle Weisz, d'avoir pris la peine de relire ce manuscrit pour en corriger la langue, même si le caractère technique de cette présentation n'a pas dû rendre la tâche aisée. Bien sûr, je reste seul responsable des scories que ce texte ne manquera pas de contenir malgré tout.



# Présentation générale

## Travaux de recherches

Dans cette présentation générale, je passe en revue l'ensemble des travaux, que j'ai menés depuis la fin de mon doctorat, pour donner un aperçu de la diversité des sujets et des approches utilisées (méthodes inverses, calculs analytiques, optimisations numériques, thermodynamique et approches énergétiques, statistiques Bayésiennes etc.). Par ailleurs, j'essaie de mettre en valeur et de rendre claire la structure globale, qui donne une cohérence à cet ensemble de travaux. En effet, l'ambition de ce mémoire n'est pas de détailler un domaine particulier, avec une longue présentation pédagogique de l'état de l'art. Je vise d'avantage à donner à voir, de manière synthétique et organisée, le cheminement de mon parcours de recherche et ma volonté d'aborder des sujets variés avec un regard que j'espère original, mais parfois naïf aussi probablement.

Les enjeux de recherche, les idées principales et les méthodes seront évoqués, ainsi que les résultats intéressants. En revanche, compte tenu du caractère synthétique de cette présentation, je ne détaillerai pas les calculs théoriques de chacun des sujets. Pour cela, le lecteur pourra se reporter aux articles publiés. Par ailleurs, pour faciliter la lecture, les références sont triées par chapitre et séparées selon que j'en suis co-auteur ou non.

Mes travaux sont principalement axés sur l'évaluation des contraintes résiduelles et de l'évolution de la microstructure dans les métaux (et plus particulièrement les aciers) à l'issue de différents procédés de mise en forme ou de fabrication. Mes recherches visent donc à offrir des outils pour une meilleure compréhension des conditions essentielles dans lesquelles se forment les contraintes résiduelles et les microstructures qui sous-tendent très largement le comportement macroscopique des matériaux. Ce cadre général se décline en différents axes : **(axe 1) méthodes inverses en temps réel** (pour l'estimation de conditions inaccessibles dans des procédés), **(axe 2) simulations rapides des procédés** en considérant de nombreux couplages (mécanique, thermique, transition de phase, contacts mécaniques, etc.) et **(axe 3) modèles théoriques macroscopiques conservant des informations provenant de la microstructure** (transformations de phase, recristallisation, croissance de grain etc.). Cela permet d'intégrer, au niveau macroscopique, des phénomènes traversant les échelles (atomique, polycristalline et milieu continu). Par exemple, ces modèles cherchent à conserver à l'échelle du milieu continu, l'évolution statistique de la microstructure (arrangement cristallin, désorientation entre les grains, morphologie). Un quatrième axe s'ajoute à cette perspective globale : **(axe 4) caractérisation des matériaux en dynamique**, incluant les sources d'incertitudes.

La conclusion de ce mémoire sera l'occasion de détailler mon projet de recherche pour les années à venir.

## Enseignements

J'ai eu la chance de pouvoir enseigner en master à l'École des Ponts ParisTech dès ma première année de thèse. Depuis, j'ai eu la charge de plusieurs cours de master comme en master MAGIS (École Polytechnique) et dans le cycle ingénieur de différentes écoles.

Récemment, j'ai concentré mes activités d'enseignement à l'École des Ponts ParisTech. Je suis notamment responsable du module "mécanique physique des matériaux", qui intervient au premier semestre de la deuxième année du cycle ingénieur et pour lequel j'ai enregistré mes cours en vidéo, que j'ai diffusés. Par ailleurs, je suis également responsable de module "mécanique linéaire de la rupture", qui intervient au second semestre de la deuxième année du cycle ingénieur. Enfin, je suis chargé du cours "identification de l'état des structures" en master "durabilité des matériaux et des structures" (DMS).



## Axe 1

# Méthodes inverses en temps réel

### Contents

---

1.1 Introduction . . . . .	4
1.2 Méthode inverse pour des capteurs de contact en temps réel . . . . .	4
1.3 Mesure de contraintes résiduelles en temps réel . . . . .	7
1.4 Développements théoriques pour l'élasticité 3D . . . . .	9

---

## 1.1 Introduction

Le développement de méthodes inverses pour identifier en temps réel les conditions de contact pour le procédé de laminage (cf. figure 1.1) est l'axe de recherche par lequel j'ai débuté ma carrière pendant mon stage de master puis mon doctorat à l'École des Ponts ParisTech, au laboratoire Navier, sous la direction d'Alain Ehrlacher [1–10]. J'ai dès le début bénéficié du soutien d'ArcelorMittal notamment grâce à Nicolas Legrand (R&D, ArcelorMittal Chicago), avec qui je collabore encore régulièrement. Ce soutien s'est situé à la fois sur un plan financier (contrats de recherche) et sur le plan des connaissances tant du procédé de laminage que de ses implications métallurgiques. Cette collaboration m'a permis également de contribuer au projet européen RollGap Sensors (RFS-PR-08051) et ainsi d'accéder aux mesures inédites de température et de déformation à l'intérieur des cylindres de laminage, qui ont été rendues possibles par les développements des différents partenaires. Les derniers développements, que j'ai apportés à cet axe de recherche, ont permis de publier une étude expérimentale d'envergure et inédite où l'on a fait la preuve de l'efficacité d'une mesure des efforts de contact en temps réel pendant le procédé de laminage.

Par ailleurs, j'ai poursuivi ces travaux dans le cadre de l'ANR PLATEFORM, en développant des idées pour estimer les contraintes résiduelles de la tôle, pendant le procédé de laminage, en utilisant un cylindre spécifique et instrumenté positionné en aval du laminage et sur lequel la tôle défile.

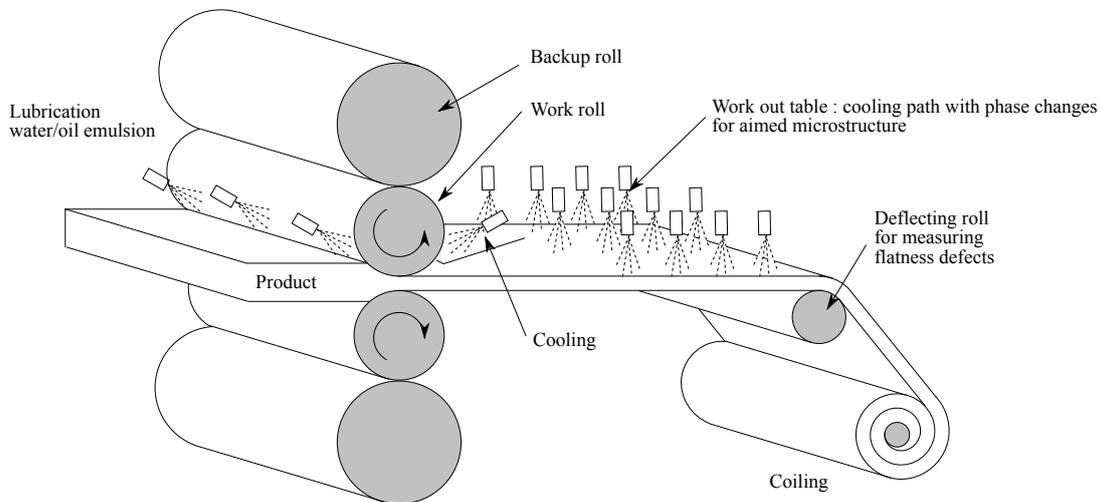


FIGURE 1.1 – Vue schématique des procédés liés au laminage industriel.

## 1.2 Méthode inverse pour des capteurs de contact en temps réel

*Cette section est liée à [11].*

L'idée de ces travaux, cherchant à identifier en temps réel des conditions de contact en laminage industriel (inaccessibles à la mesure directe), vient du constat que les études par simulation numérique lourde (couplant le comportement élasto-visco-plastique de la tôle (produit) et le comportement élastique des cylindres (outils), ainsi que les aspects thermiques, changement de phase etc.) ont peu de contreparties expérimentales. Par ailleurs, on cherche à s'orienter vers des calculs rapides permettant d'évaluer en temps réel pendant le procédé, les conditions de contact entre les outils et le produit, pour mieux agir sur les paramètres de contrôle et ainsi mieux maîtriser l'état des contraintes résiduelles et la microstructure. Cette optique générale nous a conduit à proposer des méthodes indirectes de mesure pour ne pas perturber les contacts en question. L'idée majeure est de travailler sur les cylindres et non directement sur l'interaction entre ces derniers et la tôle qui a un comportement fortement non-linéaire et sur laquelle il est difficile d'effectuer des mesures. En effet le cylindre est un objet particulièrement simple, linéaire isotrope, dont les conditions aux limites nous renseignent grandement sur le contact (pression et cisaillement ainsi que les flux de chaleur). Ces travaux obtiennent donc des informations sur une interaction fortement non-linéaire (outils/produit)

alors même que l'objet d'étude est simplement linéaire. Il s'agit de mesurer des grandeurs telles que la température ou encore les déformations à l'intérieur de l'outil cylindrique et par méthode inverse d'en déduire les conditions de contact responsables de ces champs.

Toute méthode inverse repose sur une simulation directe du système à considérer. Une revue de la littérature des différentes méthodes numériques pour simuler le procédé de laminage a été publiée [14]. Par exemple, [15] s'appuie sur un modèle aux éléments finis avec un comportement rigide-plastique et [16] a développé un modèle 3D couplant la thermique et la mécanique pour simuler l'interaction tôle/cylindre. Par ailleurs, [17] a calculé, en post-processing du modèle de [16], le flambement de tôle en sortie de cage de laminage, pour prédire précisément les défauts de planéité dans les tôles. Des simulations de laminage à chaud [18] ont également été menées par éléments finis et couplées avec un réseau de neurones artificiels entraîné sur les simulations pour prédire rapidement le comportement de la tôle pendant le procédé.

Le développement de mesures indirectes en ligne, qui permettent d'estimer en temps réel les conditions de contact mécanique et thermique entre la tôle et l'outil, est motivé par la validation des modèles d'une part et le suivi et le contrôle par asservissement des paramètres du procédé de laminage d'autre part. Pour réaliser de telles mesures en temps réel, un projet européen s'est monté [19] et j'ai eu la chance d'y participer, ayant ainsi accès à des développements technologiques permettant effectivement de démontrer la faisabilité de telles mesures dans un contexte industriel. Quelques technologies avaient été envisagées auparavant, notamment des capteurs de type aiguille, qui permettent de mesurer directement les contraintes de contact, bien que la présence du capteur détériore la tôle et modifie les conditions de contact à mesurer. Malgré ces défauts, un certain nombre d'études ont été menées dans ce sens comme [20] pour les contraintes normales ou [21] pour les contraintes de cisaillement ou encore [22].

L'apport principal des travaux auxquels j'ai participé est que la mesure est indirecte (non pas effectuée dans le contact mais sous la surface des cylindres de laminage), ce qui permet de ne pas modifier les conditions de contact, que l'on cherche à estimer et d'éviter de marquer la tôle. Pour ce faire j'ai développé une méthode inverse semi-analytique qui permet des temps de calculs compatibles avec une exploitation en temps réel, contrairement à d'autres méthodes reposant sur des résolutions aux éléments finis [23] ou aux éléments frontières [24]. Une méthode inverse analytique préexiste pour ce problème [25] mais est insuffisante pour estimer correctement les conditions de contact et nécessite d'avantage de capteurs [26].

J'ai donc utilisé mes travaux de thèse pour interpréter des mesures de déformation dans un cylindre de laminage. Le principe de mesure consiste à insérer des fibres optiques munies d'un réseau de Bragg (c'est-à-dire un interféromètre pour la mesure des déformations) dans une pièce cylindrique nommé "plug". Le schéma de principe d'insertion des fibres optiques sous la surface du plug est présenté figure 1.2a). Quatre fibres sont insérées, dont trois sont collées pour mesurer le tenseur de déformation et dont la quatrième est graissée pour mesurer la température locale. Le plug est ensuite inséré dans un cylindre de laminage spécialement usiné pour accueillir ce dernier ainsi que la connectique. L'état de surface du cylindre de laminage après polissage est compatible avec une utilisation industrielle, c'est-à-dire ne laissant pas de marque à la surface du produit (cf. figure 1.2b). Les réseaux de Bragg sont des interféromètres qui réfléchissent une fréquence spécifique, qui dépend du pas du réseau. Ainsi, on peut mesurer la déformation du réseau, et par extension la déformation dans le cylindre en mesurant l'écart de fréquence de la lumière réfléchi. Les quatre réseaux ont des fréquences de réflexion bien distinctes, ce qui permet de collecter les signaux dans une seule fibre sans risquer de superposer les fréquences réfléchies. La fibre est extraite du cylindre par le centre et connectée à une centrale d'acquisition via un collecteur tournant (cf. figure 1.2c). Ce système expérimental développé par différents partenaires, dans le cadre du projet européen RollGap sensor (RFS-PR-08051), couplé aux méthodes inverses rapides que j'ai développées, permet de mesurer en temps réel les conditions de contact (pression et cisaillement) pendant le procédé.

La difficulté majeure est de reconstruire les pressions et les cisaillements dans la zone de contact entre le cylindre et l'outil, alors même que cette zone angulaire est extrêmement réduite (entre  $1^\circ$  et  $5^\circ$  de la circonférence du cylindre en laminage à froid par exemple). Il s'agit donc de reconstruire un signal très intense dans une zone de contact très réduite et nul partout ailleurs (pas de contact en dehors de la zone). Le signal à reconstruire est donc très singulier, et le problème est donc assez mal conditionné, c'est-à-dire que les erreurs expérimentales sont très fortement amplifiées lors du calcul inverse, qui permet d'estimer les efforts de contact à partir des mesures réalisées sous la surface du cylindre. La méthode utilisée consiste à utiliser le formalisme en potentiels complexes holomorphes de Muskhelishvili [27], qui permet d'écrire les contraintes

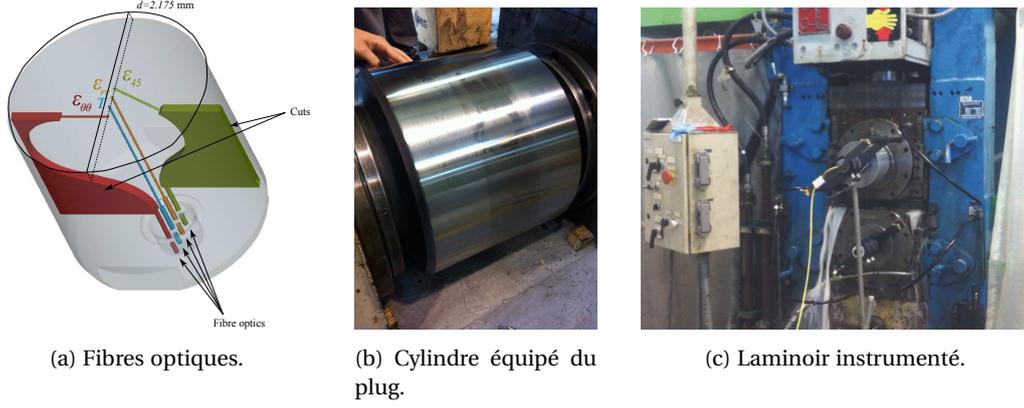


FIGURE 1.2 – Équipements pour mesurer les contraintes de contact.

sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta} = 2(\Phi(z) + \overline{\Phi(z)}) \\ -\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta} + 2i\sigma_{r\theta} = 2\exp(2i\theta)(\Psi(z) + \overline{\Psi(z)}) \end{cases} \quad (1.1)$$

Où  $\sigma_{rr}, \sigma_{\theta\theta}, \sigma_{r\theta}$  représentent les contraintes de Cauchy en polaire,  $\Phi(z), \Psi(z)$  sont deux fonctions holomorphes dans le plan complexe ( $z = r \exp(i\theta)$  où  $r, \theta$  sont les coordonnées polaires), qui sont déterminées en vérifiant les conditions aux limites, c'est-à-dire les déformations mesurées par les fibres optiques  $\varepsilon_{\theta\theta}^m(\theta), \varepsilon_{45}^m(\theta)$  dans les directions orthoradiale et à  $45^\circ$  respectivement. Des développements en série entière des potentiels  $\Phi(z) = \sum_{k=0}^{+\infty} \Phi_k z^k$  et  $\Psi(z) = \sum_{k=0}^{+\infty} \Psi_k z^k$  permettent d'écrire les déformations au niveau des fibres optiques :

$$\begin{cases} 2\mu\varepsilon_{\theta\theta}(r, \theta) = \sum_{k=0}^{+\infty} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{r}{R_m} \right)^k \left( (2+k)\Phi_k \exp(ik\theta) + (2+k)\overline{\Phi_k} \exp(-ik\theta) + \Psi_k \exp(i(k+2)\theta) + \overline{\Psi_k} \exp(-i(k+2)\theta) \right) \right. \\ \left. - \left( \frac{r}{R_m} \right)^k \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \left( \Phi_k \exp(ik\theta) + \overline{\Phi_k} \exp(-ik\theta) \right) \right] \\ 2\mu\varepsilon_{45}(r, \theta) = \sum_{k=0}^{+\infty} \left[ \frac{1}{2i} \left( \frac{r}{R_m} \right)^k \left( -k\Phi_k \exp(ik\theta) + k\overline{\Phi_k} \exp(-ik\theta) - \Psi_k \exp(i(k+2)\theta) + \overline{\Psi_k} \exp(-i(k+2)\theta) \right) \right. \\ \left. + \left( \frac{r}{R_m} \right)^k \frac{\mu}{\lambda + \mu} \left( \Phi_k \exp(ik\theta) + \overline{\Phi_k} \exp(-ik\theta) \right) \right] \end{cases} \quad (1.2)$$

Où  $\mu$  est le coefficient de cisaillement. Des calculs directs permettent d'écrire ces coefficients en fonction d'intégrales des mesures (1.3), qui se calculent en pratique avec une quadrature exploitant un algorithme de transformée de Fourier rapide (*fast Fourier transform* (fft)) pour que le calcul soit réalisé en temps réel. Cela permet d'identifier la solution en contrainte et en déplacement dans tout le cylindre et en particulier d'extraire les pressions et les cisaillements dans la zone de contact.

$$\begin{cases} \Phi_0 = \frac{\lambda + \mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} \varepsilon_{\theta\theta}^m(\theta) d\theta = \frac{\lambda + \mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} \varepsilon_{45}^m(\theta) d\theta \\ \forall k \geq 1 \quad \Phi_k = \frac{(1+i)(\lambda + \mu)}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\varepsilon_{45}^m(\theta) - i\varepsilon_{\theta\theta}^m(\theta)}{\exp(ik\theta)} d\theta \\ \forall k \geq 0 \quad \Psi_k = -\frac{(1+i)}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{(2\mu + (k+2)(\lambda + \mu))\varepsilon_{45}^m(\theta) - (2\mu + i(k+2)(\lambda + \mu))\varepsilon_{\theta\theta}^m(\theta)}{\exp(i(k+2)\theta)} d\theta \end{cases} \quad (1.3)$$

Toutes les méthodes inverses sont mal posées. Dans ce cas analytique, ceci est particulièrement évident car le coefficient  $(R_s/R_m)^k$ , que l'on retrouve dans (1.2), intervient dans le développement des contraintes de pression et de cisaillement dans le contact (avec  $R_s \geq R_m$  où  $R_s$  est le rayon du cylindre et  $R_m$  le rayon de mesure où sont insérées les fibres). Ainsi, une erreur de mesure ou de quadrature sur les coefficients  $\Phi_k, \Psi_k$

est amplifiée très fortement sur les hautes fréquences du développement. La régularisation du problème passe principalement par une troncature des sommes impliquées dans les développements en séries. Par ailleurs, on peut régulariser ce problème en limitant les oscillations des signaux. En pratique, on cherche une nouvelle évaluation des coefficients notés  $\hat{\Phi}_k, \hat{\Psi}_k$  proches de ceux déjà identifiés grâce à (1.3) et pour lesquels les dérivées des signaux de déformation sont pénalisées, ce qui revient à minimiser le problème suivant :

$$(\hat{\Phi}_k, \hat{\Psi}_k) = \underset{(\tilde{\Phi}_k, \tilde{\Psi}_k)}{\operatorname{argmin}} \int_0^{2\pi} [(\tilde{\varepsilon}_{\theta\theta}(R_m, \theta) - \varepsilon_{\theta\theta}(R_m, \theta))^2 + (\tilde{\varepsilon}_{45}(R_m, \theta) - \varepsilon_{45}(R_m, \theta))^2] d\theta + \alpha \int_0^{2\pi} \left[ \left( \frac{d\tilde{\varepsilon}_{\theta\theta}(R_m, \theta)}{d\theta} \right)^2 + \left( \frac{d\tilde{\varepsilon}_{45}(R_m, \theta)}{d\theta} \right)^2 \right] d\theta \quad (1.4)$$

Où  $\alpha$  est un paramètre adimensionnel, qui fixe l'intensité de la régularisation. Ce problème classique est particulièrement simple à traiter en annulant la dérivée au sens de Fréchet de la fonctionnelle à minimiser, ce qui conduit à l'équation différentielle :  $\tilde{\varepsilon}_{\theta\theta}(R_m, \theta) - \alpha \tilde{\varepsilon}_{\theta\theta}''(R_m, \theta) = \varepsilon_{\theta\theta}(R_m, \theta)$  et de même pour  $\tilde{\varepsilon}_{45}(R_m, \theta)$ . La solution de cette équation conduit simplement au filtre suivant :

$$\tilde{\Phi}_k = \frac{\Phi_k}{1 + \alpha k^2} \quad \Bigg| \quad \tilde{\Psi}_k = \frac{\Psi_k}{1 + \alpha k^2} \quad (1.5)$$

Les résultats obtenus sont compatibles avec les calculs aux éléments finis dans des conditions de calcul simulant les conditions des essais (cf. figure 1.3).

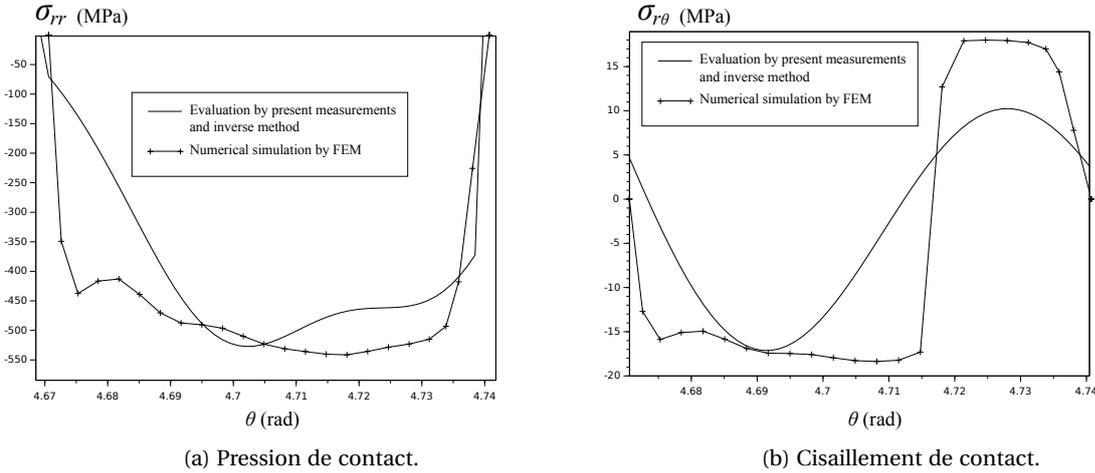


FIGURE 1.3 – Contraintes des contact calculées et mesurées.

Ces mesures sont à ma connaissance les premières mesures de contact en laminage dans des conditions d'essais réalistes (laminage à froid sur un laminoir industriel), permettant d'éviter une mesure invasive par friction sur la tôle, ce qui interdirait une utilisation industrielle. Ces mesures de contact servent aujourd'hui de référence pour valider les modèles de laminage récents. Sur le plan académique l'impact de ces travaux tient surtout à l'utilisation de solutions semi-analytiques pour traiter un problème inverse en temps réel, dans un contexte où les approches numériques par éléments finis échouent à apporter une solution viable. Sur le plan des applications, l'industrialisation de ces travaux pour instrumenter les laminoirs d'usine et contrôler les conditions de laminage en fonction de la mesure des pressions et cisaillement dans le contact, qui conditionne en grande partie la qualité des tôles produites, permettra d'optimiser le procédé pour mettre en forme des aciers. Cela ouvre notamment des perspectives intéressantes pour des aciers récents difficiles à laminier, tels que les aciers à très haute résistance, dont le potentiel tient par exemple à l'allègement des structures visant un gain énergétique.

### 1.3 Mesure de contraintes résiduelles en temps réel

*Cette section est liée à [12].*

J'ai développé ensuite d'autres méthodes inverses rapides, notamment dans le cadre de l'ANR PLATEFORM, pour estimer en temps réel les contraintes résiduelles des tôles laminées. Les contraintes résiduelles sont un enjeu très important des procédés de laminage car elles provoquent des défauts de planéité pouvant être critiques. Ces contraintes résiduelles sont dues à des déformations plastiques hétérogènes dans la zone de contact en laminage, mais également aux transformations de phase qui ont lieu sur la table de sortie lors du refroidissement des tôles par des jets d'eau (cf. figure 1.1). Ces contraintes peuvent être suffisamment intenses pour provoquer un flambement de la tôle sur la ligne de laminage, alors même qu'une tension importante est appliquée (on parle de défaut manifeste). Pour mesurer ce type de défauts, on utilise des techniques optiques de Moiré [28, 29] ou par laser [30, 31]. Cependant, il est très fréquent que la tension appliquée sur la tôle pendant le procédé masque les défauts de planéité engendrés par les contraintes résiduelles. Ces derniers ne sont découverts qu'en déroulant les bobines ou après découpe. Le principe général de ma contribution sur ce sujet est d'estimer en ligne les contraintes résiduelles grâce à un cylindre sur lequel la tôle est en déflexion (cf. figure 1.1). Ce principe n'est pas nouveau, et de nombreuses solutions techniques existent en s'appuyant sur cette idée. Cependant les mesures existantes sont grossières car les capteurs utilisés sont volumineux et nécessitent de découper le cylindre en tranches pour mesurer la résultante des efforts sur chaque tranche (cf. figure 1.4a) [32–34], ce qui conduit à endommager la tôle. Quelques solutions reposent sur des cylindres continus mais pour éviter que les signaux des différents capteurs introduits sous la surface des cylindres soient corrélés, ces derniers sont suffisamment espacés [35–39] ce qui conduit à fortement sous-estimer les contraintes résiduelles sur les rives des tôles. La solution que j'ai proposée est d'utiliser un cylindre troué (cf. figure 1.4b). Les déplacements à l'intérieur du trou peuvent être mesurés en diverses positions grâce à des capteurs capacitifs (très petits et précis pour des déplacements faibles). La méthode inverse consiste à utiliser les déplacements mesurés dans le trou du cylindre pour déduire les pressions de contact avec la tôle en déflexion. Cela permet ensuite de déduire le profil de traction dans la tôle le long de la largeur, ce qui conduit aux tractions résiduelles, lorsque l'on retranche la tension appliquée en ligne.

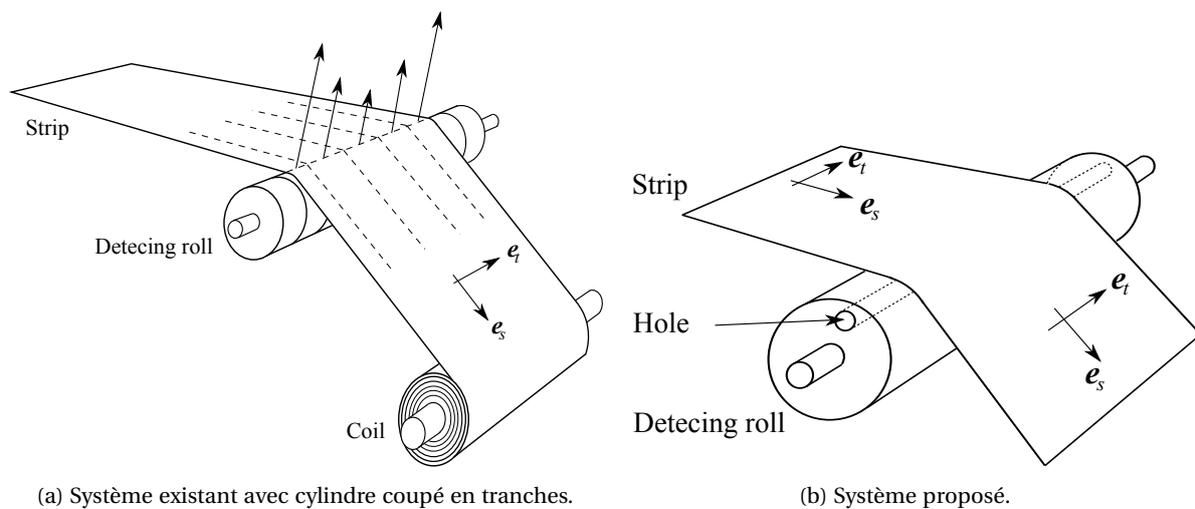


FIGURE 1.4 – Cylindre de mesure de contraintes résiduelles.

Le problème à traiter est un problème dit “inverse de Cauchy”, car on dispose grâce aux mesures de conditions aux limites surabondantes sur une partie de la frontière du domaine et on cherche à identifier les conditions aux limites sur le reste de la frontière. Diverses méthodes ont été proposées pour traiter ce type de problème en fonction des applications. Par exemple [40, 41] propose une méthode itérative reposant sur une résolution aux éléments frontières pour un problème de Laplace, [42, 43] propose une méthode reposant sur des solutions fondamentales d'un problème 2D d'élasticité isotrope, [44] propose une méthode énergétique pour des problèmes 3D, [45] introduit le concept de sensibilité topologique pour identifier de cavités à partir de données surabondantes.

La résolution que j'ai proposée s'appuie, comme les travaux présentés précédemment, sur la formulation des problèmes d'élasticité plans dans le corps des complexes grâce à deux potentiels complexes holomorphes [27]. Cependant, contrairement à mes travaux sur les cylindres de laminage, une transformation

conforme de Moebius notée  $\omega$  est utilisée pour résoudre pratiquement le problème inverse et simplifier la géométrie du problème en un anneau (cf. figure 1.5a) :

$$\omega : \begin{cases} E_\xi & \rightarrow & E_\zeta \\ \xi & \rightarrow & \zeta = \omega(\xi) = R_s \frac{\xi - a}{1 - \xi a} \end{cases} \quad \omega^{-1} : \begin{cases} E_\zeta & \rightarrow & E_\xi \\ \zeta & \rightarrow & \xi = \omega^{-1}(\zeta) = \frac{\zeta + R_s a}{R_s + \zeta a} \end{cases} \quad (1.6)$$

Où  $R_s$  est le rayon externe du cylindre et  $a$  un paramètre qui se calcule facilement en fonction du diamètre et de la position du trou. On peut réécrire les contraintes et déplacements en coordonnées Cartésiennes, grâce au système en potentiels holomorphes suivant :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} + \sigma_{yy} = 2 \left( \frac{\phi'(\xi)}{\omega'(\xi)} + \frac{\overline{\phi'(\xi)}}{\overline{\omega'(\xi)}} \right) \\ \sigma_{yy} - \sigma_{xx} + 2i\sigma_{xy} = 2 \left( \frac{\omega(\xi)}{[\omega'(\xi)]^2} \phi''(\xi) - \frac{\overline{\omega(\xi)} \omega''(\xi)}{[\omega'(\xi)]^3} \phi'(\xi) + \frac{\psi'(\xi)}{\omega'(\xi)} \right) \\ 2\mu(u_x + iu_y) = \kappa \phi(\xi) - \frac{\omega(\xi)}{\omega'(\xi)} \overline{\phi'(\xi)} - \overline{\psi(\xi)} \end{cases} \quad (1.7)$$

Où  $\xi$  est le point courant dans la géométrie annulaire et  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}$  les contraintes de Cauchy dans la géométrie réelle. J'ai pu démontrer par des calculs impliquant des développements en série de Laurent des potentiels, que l'idée d'un cylindre troué est viable pour améliorer l'estimation des contraintes résiduelles sur les lignes de laminage. En effet, la reconstruction du profil de contraintes résiduelles est satisfaisante sur cette étape purement numérique (cf. figure 1.5b). Cette contribution fait la preuve de l'intérêt technologique de cette idée, quoique de futurs essais expérimentaux soient nécessaires pour développer d'avantage cette problématique. Les enjeux académiques et applicatifs de ce travail sont essentiellement les mêmes que pour

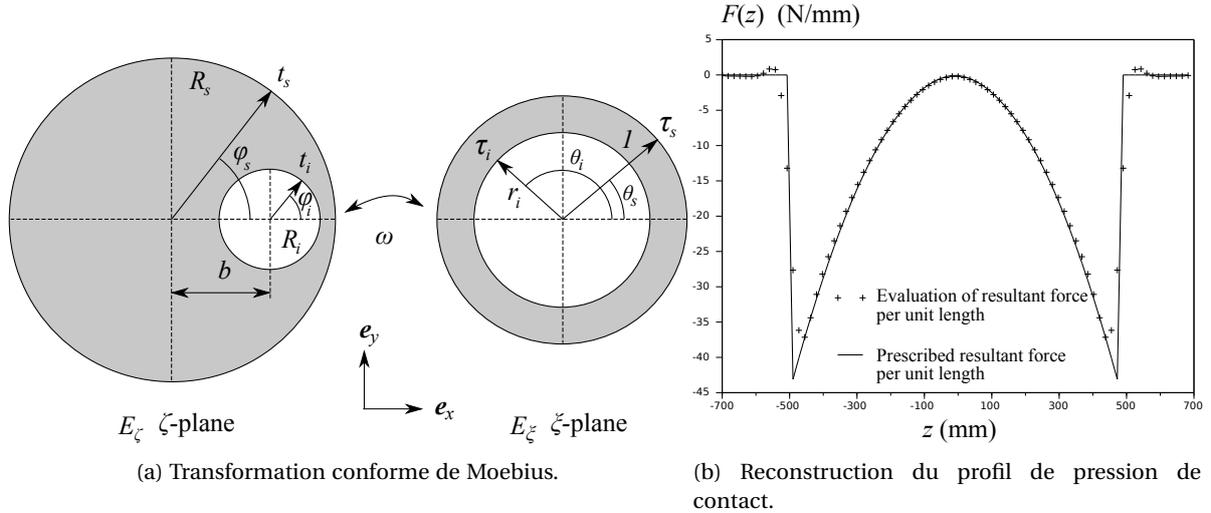


FIGURE 1.5 – Cylindre de mesure de contraintes résiduelles.

mes travaux sur les mesures de contact en laminage. En effet, la solution proposée est suffisamment rapide pour être utilisée en ligne pendant le défilement de la tôle, et apporte la possibilité de développer une boucle d'asservissement pour modifier automatiquement les conditions de laminage en amont afin de corriger, en temps réel, l'état des contraintes résiduelles associées au procédé.

## 1.4 Développements théoriques pour l'élasticité 3D

Cette section est liée à [13].

Par ailleurs, les développements de solutions analytiques pour ces problèmes inverses m'ont conduit à travailler sur des aspects théoriques intéressants. J'ai démontré avec Sebastian Bock et Klaus Guerlebeck (université de Weimar) un théorème pour représenter l'élasticité 3D dans l'algèbre des quaternions (avec

trois parties imaginaires portées par  $i, j, k$  telles que  $i^2 = j^2 = k^2 = -1$ ,  $ij = -ji = k$ ,  $jk = -kj = i$  et  $ki = -ik = j$ . Il s'agit d'une extension des résultats classiques de Muskhelishvili [27], que j'avais utilisés pour résoudre les problèmes inverses plans liés à la mesure des conditions de contact en laminage et de contraintes résiduelles. La solution permet d'écrire le vecteur déplacement et les contraintes en fonction de deux potentiels hypercomplexes monogéniques (extension du concept d'holomorphic utilisé pour les problèmes plans) :

$$2\mu u = 4(1-\nu)\Phi - \frac{1}{2}\bar{\partial}(\bar{x}\Phi + \bar{\Phi}x) - \hat{\Psi} \quad (1.8)$$

Où  $\mu$  est le coefficient de cisaillement,  $u = u_1 + iu_2 + ju_3 + ku_4$  le vecteur déplacement, et  $\Phi, \Psi$  deux fonctions monogéniques. Comme l'algèbre des quaternions a quatre dimensions et non trois (sinon il ne s'agirait pas d'une algèbre au sens où le produit de deux éléments ne serait pas toujours contenu dans l'ensemble), la quatrième dimension  $u_4 = 0$  porte une information supplémentaire qui s'exprime par une relation additionnelle sur les potentiels :

$$4(1-\nu)\Phi_4 - \Psi_4 = 0 \quad (1.9)$$

Cela force l'unicité de la représentation, ce qui permet de bien conditionner la recherche des potentiels hypercomplexes. Quoique l'intérêt de ce travail soit surtout théorique, on peut imaginer des solutions par approximation en interpolation polynomiale monogénique, pour générer des solutions en élasticité tridimensionnelle sans maillage.

## Publications de l'axe 1

- [1] Daniel **Weisz-Patrault**. Recherche et utilisation de méthodes analytiques inverses pour des problèmes couplés thermo élastiques. PhD thesis, Paris Est, 2012.
- [2] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlacher, and Nicolas Legrand. A new sensor for the evaluation of contact stress by inverse analysis during steel strip rolling. Journal of Materials Processing Technology, 211(9) : 1500–1509, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2011.03.025>.
- [3] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlacher, and Nicolas Legrand. Evaluation of temperature field and heat flux by inverse analysis during steel strip rolling. International Journal of Heat and Mass Transfer, 55(4) :629–641, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.10.048>.
- [4] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlacher, Nicolas Legrand, Nathalie Labbe, Jaroslav Horský, and Tomáš Luks. Experimental study of interfacial heat flux and surface temperature by inverse analysis with thermocouple (fully embedded) during hot steel strip rolling. In Advanced Materials Research, volume 452, pages 959–963. Trans Tech Publ, 2012. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.452-453.959>.
- [5] Nicolas Legrand, Nathalie Labbe, Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlacher, Tomasz Luks, and Jaroslav Horský. Analysis of roll gap heat transfers in hot steel strip rolling through roll temperature sensors and heat transfer models. In Key Engineering Materials, volume 504, pages 1043–1048. Trans Tech Publ, 2012. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.504-506.1043>.
- [6] Daniel **Weisz-Patrault**. Inverse three-dimensional method for fast evaluation of temperature and heat flux fields during rolling process. In Journées Annuelles de la SF2M, Joint IOM3 SF2MSymposium on Modelling of Rolling Processes, volume 100, pages 20–22, 2012.
- [7] Nicolas Legrand, Daniel **Weisz-Patrault**, Jaroslav Horský, Tomáš Luks, Nathalie Labbe, Michel Picard, and Alain Ehrlacher. Characterization of roll bite heat transfers in hot steel strip rolling and their influence on roll thermal fatigue degradation. In Key Engineering Materials, volume 554, pages 1555–1569. Trans Tech Publ, 2013. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.554-557.1555>.
- [8] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlacher, and Nicolas Legrand. Analytical inverse solution for coupled thermoelastic problem for the evaluation of contact stress during steel strip rolling. Applied Mathematical Modelling, 37(4) :2212–2229, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2012.05.013>.

- [9] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlicher, and Nicolas Legrand. Evaluation of contact stress during rolling process, by three dimensional analytical inverse method. International Journal of Solids and Structures, 50(20-21) :3319–3331, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.06.005>.
- [10] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlicher, and Nicolas Legrand. Temperature and heat flux fast estimation during rolling process. International Journal of Thermal Sciences, 75 :1–20, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2013.07.010>.
- [11] Daniel **Weisz-Patrault**, Laurent Maurin, Nicolas Legrand, Anas Ben Salem, and Abdelkebir Ait Bengrir. Experimental evaluation of contact stress during cold rolling process with optical fiber Bragg gratings sensors measurements and fast inverse method. Journal of Materials Processing Technology, 223 :105–123, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2015.03.047>.
- [12] Daniel **Weisz-Patrault**. Inverse cauchy method with conformal mapping : application to latent flatness defect detection during rolling process. International Journal of Solids and Structures, 56 :175–193, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2014.11.017>.
- [13] Daniel **Weisz-Patrault**, Sebastian Bock, and Klaus Gürlebeck. Three-dimensional elasticity based on quaternion-valued potentials. International Journal of Solids and Structures, 51(19-20) :3422–3430, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2014.06.002>.

## Références de l'axe 1

- [14] P. Montmitonnet. Hot and cold strip rolling processes. Computer methods in applied mechanics and engineering, 195 :6604–6625, 2006.
- [15] Z.Y. Jiang and A.K. Tieu. Modeling of the rolling processes by a 3-d rigid plastic/ visco-plastic finite element method with shifted iccg method. Comput Struct, 40 :79–2727, 2001.
- [16] A. Hacquin. Modelisation thermo-mecanique tridimensionnelle du laminage : couplage bande-cylindres [3D thermomechanical modelling of rolling processes : coupling strip and rolls]. PhD thesis, Cemef Ecole des Mines de Paris, 1996. In French.
- [17] S. Abdelkhalek, P. Montmitonnet, N. Legrand, and P. Buessler. Coupled approach for flatness prediction in cold rolling of thin strip. International Journal of Mechanical Sciences, 53 :661–675, 2011.
- [18] A.R. Shahani, S. Setayeshi, S.A. Nodamaie, M.A. Asadi, and S. Rezaie. Prediction of influence parameters on the hot rolling process using finite element method and neural network. Journal of materials processing technology, 209(4) :1920–1935, FEB 19 2009. ISSN 0924-0136. doi : 10.1016/j.jmatprotec.2008.04.055.
- [19] RFS-PR-08051. Advanced roll gap sensors for enhanced hot and cold rolling processes. European project, 2014. Final Report.
- [20] J. Jeswiet and W.B. Rice. The design of a sensor for measuring normal pressure and friction stress in the roll gap during cold rolling. In Tenth north american manufacturing research conference proceedings, pages 130–134, may 1982.
- [21] C Lu, AK Tieu, B Ma, and Z Jiang. Friction measurement in hot rolling of steel. In 44 th Mechanical Working and Steel Processing Conference and the 8 th International Rolling Conference and International Symposium on Zinc-Coated Steels, pages 605–614, 2002.
- [22] C.B. Andersen, B.G. Ravn, and T. Wanheim. Development of a commercial transducer for measuring pressure and friction on a model die surface. JMPT, 115 :205–211, 2001.
- [23] D.S. Schnur and N. Zabarar. Finite element solution of two-dimensional inverse elastic problems using spatial smoothing. International Journal For Numerical Methods In Engineering, 30 :57–75, 1990.
- [24] Luciano Bezerra and Sunil Saigal. Inverse boundary traction reconstruction with the bem. International Journal of Solids Structures, 32 :1417–1431, 1995.

- [25] D.J. Meierhofer and K.A. Stelson. Measurement of the interfacial stresses in rolling using the elastic deformation of the roll. Journal of engineering for industry, 109 :362–369, november 1987.
- [26] N. Legrand, T. Lavalard, and A. Martins. New concept of friction sensor for strip rolling : Theoretical analysis. Wear, 286-287(0) :8 – 18, 2012. ISSN 0043-1648. doi : 10.1016/j.wear.2011.11.002. Tribology in Manufacturing Processes.
- [27] N.I. Muskhelishvili. Some basic problems of the mathematical theory of elasticity. Noordhoff International Publishing, Groningen, 1953. 2nd edition (1977).
- [28] J Börchers and A Gromov. Topometric measurement of the flatness of rolled products - the system topplan. Mettalurgist, 52 :247–252, 2008.
- [29] J Paakkari. On-line measurement of large steel plates using Moiré topography. PhD thesis, Oulu University, 1998.
- [30] D.F Garcia, M Garcia, F Obeso, and V Fernandez. Flatness measurement system based on a nonlinear optical triangulation technique. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 51 :188–195, 2002.
- [31] J Molleda, R Usamentiaga, D.F Garcia, F.G Bulnes, and L Ema. Shape measurement of steel strips using a laser-based three-dimensional reconstruction technique. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 47 :1–8, 2011.
- [32] Olivo Giuseppe Sivilotti. Strip flatness sensor, December 2 1969. US Patent 3,481,194.
- [33] Wolfgang Mühlberg. Measurements op longitudinal stresses in moving metal bands and devices therefor, January 26 1971. US Patent 3,557,614.
- [34] Bernd Berger, Gert Mucke, Helmut Thies, and Eberhard Neuschütz. Apparatus for measuring stress distribution across the width of flexible strip, January 4 1983. US Patent 4,366,720.
- [35] Matthias Kipping, Rolf Franz, Matthias Tuschhoff, and Peter Sudau. Planarity measuring roller, June 6 2000. US Patent 6,070,472.
- [36] Cecil Dahlberg and Lars Jonsson. Seamless stressometer roll eliminating the strip marking and flatness measurement dilemma. In Achieving Profile and flatness in flat products. The Institute of Materials, Minerals and Mining, 2006. Achieving Profile and flatness in flat products, Birmingham UK, JAN 24-25, 2006.
- [37] Li-po Yang, Bing-qiang Yu, Dong Ding, and Hong-min Liu. Industrial shape detecting system of cold rolling strip. Journal of Central South University, 19 :994–1001, 2012.
- [38] Bernd Berger, Gert Mucke, Eberhart Neuschütz, and Helmut Thies. Deflection measuring roller, February 5 1991. US Patent 4,989,457.
- [39] Yu Bingqiang, Liu Hongmin, Yang Lipo, Peng Yan, and Li Zhiming. A new type of contact shape meter and its industry application. In Measuring Technology and Mechatronics Automation, 2009. ICMTMA'09. International Conference on, volume 2, pages 20–23. IEEE, 2009.
- [40] F Delvare, A Cimetière, and F Pons. An iterative boundary element method for cauchy inverse problems. Computational mechanics, 28(3-4) :291–302, 2002.
- [41] Franck Delvare, Alain Cimetière, Jean-Luc Hanus, and Patrice Bailly. An iterative method for the cauchy problem in linear elasticity with fading regularization effect. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 199(49-52) :3336 – 3344, 2010. ISSN 0045-7825. doi : 10.1016/j.cma.2010.07.004.
- [42] Liviu Marin and Daniel Lesnic. The method of fundamental solutions for the cauchy problem in two-dimensional linear elasticity. International journal of solids and structures, 41(13) :3425–3438, 2004.
- [43] Chein-Shan Liu. A modified collocation trefftz method for the inverse cauchy problem of laplace equation. Engineering Analysis with Boundary Elements, 32(9) :778–785, 2008.

- [44] Stéphane Andrieux and Thouraya N. Baranger. An energy error-based method for the resolution of the cauchy problem in 3d linear elasticity. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197 (9-12) :902 – 920, 2008. ISSN 0045-7825. doi : 10.1016/j.cma.2007.08.022.
- [45] Cédric Bellis and Marc Bonnet. A fem-based topological sensitivity approach for fast qualitative identification of buried cavities from elastodynamic overdetermined boundary data. International Journal of Solids and Structures, 47(9) :1221–1242, 2010.



## Axe 2

# Simulations non-linéaires rapides de procédés

### Contents

---

<b>2.1 Introduction</b> .....	<b>16</b>
<b>2.2 Table de sortie</b> .....	<b>16</b>
<b>2.3 Bobinage</b> .....	<b>19</b>
2.3.1 Enroulement .....	19
2.3.2 Refroidissement de bobine .....	21
2.3.3 Contraintes résiduelles .....	23
2.3.4 Effondrement de bobine .....	26
<b>2.4 Fabrication additive</b> .....	<b>30</b>
2.4.1 Thermique du procédé DED .....	30
2.4.2 Effet du procédé sur les caractéristiques à rupture .....	37

---

## 2.1 Introduction

J'ai initié cet axe de recherche à mon entrée au CNRS en 2014, dans le cadre d'un contrat de recherche avec ArcelorMittal d'une durée de trois ans. Il s'agissait de simuler des procédés de mise en forme ou de fabrication en prenant en compte les couplages physiques majeurs qui déterminent les contraintes résiduelles et les microstructures. J'ai notamment travaillé sur la table de sortie, où les tôles chaudes sous tension suivent un trajet de refroidissement pour viser une certaine cinétique thermique et établir une microstructure ciblée. En outre, j'ai travaillé sur le procédé de bobinage qui consiste à enrouler les tôles sur elles-mêmes à l'issue du procédé de laminage (cf. figure 1.1). Un certain nombre de nuances récentes présentent la particularité de poursuivre, pendant le refroidissement de la bobine, les transitions de phase initiées sur la table de sortie. Ces problèmes sont très fortement non-linéaires et des couplages entre la thermique, la métallurgie (i.e., transition de phase) et la mécanique sont au coeur des phénomènes. Cela s'ajoutant aux problèmes de grandes transformations, de comportement non-linéaire (élasto-plasticité ou visco-plasticité) et de contact (très nombreux pour le bobinage). Plus récemment, je me suis aussi attelé à proposer des modèles simplifiés rapides pour un procédé de fabrication additive par dépôt de matière sous énergie concentrée (*directed energy deposition* (DED)) et qui s'adapte aussi aux procédés de fabrication additive par soudure (*wire arc additive manufacturing* (WAAM)). Ces modèles permettent de reconstruire la cinétique thermique (avec des cycles caractéristiques de ces procédés) et les transitions de phase à l'échelle de la pièce et à l'échelle plus locale de la zone de fusion. Des mesures par pyrométrie infrarouge ont permis de valider ces approches.

L'objectif de ces travaux est de développer des méthodes efficaces pour simuler ces procédés, notamment l'évolution de la microstructure et des contraintes résiduelles. L'ambition est d'obtenir des calculs suffisamment rapides pour permettre des études paramétriques, l'aspect temps de calcul étant généralement extrêmement limitant pour les simulations de procédés. L'idée principale est de composer des approches hybrides entre des méthodes analytiques, des méthodes numériques et des approches énergétiques pour gérer efficacement les différents couplages et non-linéarités.

Les transformations métallurgiques peuvent souvent être approchées grâce à des modèles de nucléation et de croissance, qui dépendent notamment des éléments d'alliage, et prennent en compte la mobilité des interfaces entre les grains, ainsi que la diffusion du carbone (ce dernier ayant des solubilités très différentes dans l'austénite ou la ferrite). Ces taux de nucléation et de croissance sont ensuite utilisés pour caler des lois exponentielles (type Avrami) pour déterminer les proportions de phase qui décrivent statistiquement la microstructure. Le couplage entre la thermique et les changements de phase est réciproque, dans la mesure où les transitions de phase sont en partie déterminées par la cinétique de température et que, réciproquement, ces transitions apparaissent comme un terme source dans l'équation de la chaleur, du fait du saut d'enthalpie entre deux phases. Le couplage avec la mécanique est principalement dû au fait que les différentes phases ont des densités différentes et leur évolution induit donc des déformations au même titre que les variations de température.

À cela s'ajoute le phénomène de plasticité induite par les transformations de phase, lorsque celles-ci ont lieu sous contrainte mécanique. Ce phénomène s'explique à l'échelle de la microstructure. En effet, les déformations dues aux transitions de phase sont très importantes et conduisent à des déformations plastiques dans toute la microstructure. Si ces déformations se compensent habituellement (dans un essai de dilatométrie sans chargement extérieur) de telle sorte que la déformation plastique macroscopique est nulle, ce n'est plus le cas si un champ de contrainte macroscopique est appliqué, même si ce dernier est très faible (bien inférieur à la limite d'élasticité globale).

## 2.2 Table de sortie

*Cette section est liée à [46].*

J'ai travaillé sur ce sujet en collaboration avec Thomas Koedinger, dont j'encadrais le stage de master 2. La simulation numérique de la table de sortie (cf. *work out table* figure 1.1) est délicate et reste un enjeu de simulation numérique dans la mesure où les gradients thermiques sont très importants et conduisent à des transitions de phase assez rapides. La discrétisation temporelle doit donc être suffisamment fine pour capter ces changements structuraux. Par ailleurs, ce procédé est géométriquement très grand, les zones de refroidissement sont supérieures à cent mètres de long. Des calculs entièrement couplés [59–63] sont particulièrement lourds car ils prennent en charge la conduction thermique et la chaleur extraite par les jets d'eau en surface, les transitions de phase, ainsi que les déformations libres dues à l'expansion thermique, à la va-

riation de volume de changement de phase et à la plasticité de transformation. Non seulement il convient de discrétiser en temps suffisamment finement, mais également en espace pour capter les effets de structure et les contraintes résiduelles provoquées par les déformations libres. Ces contraintes de modélisation limitent drastiquement l'impact de tels modèles, qui ne parviennent pas à simuler la zone de refroidissement dans sa totalité (quelques mètres au lieu d'une centaine). Pour réaliser des calculs complets, le temps nécessaire serait extrêmement important et parfaitement incompatible avec des études paramétriques ou des optimisations sur les paramètres de contrôle du procédé. Ainsi, ces modèles permettent au mieux de comprendre des phénomènes sur un certain nombre de cas particuliers, mais pas d'aider significativement à l'optimisation du procédé.

L'approche que j'ai proposée consiste à décorrélérer le calcul thermo-métallurgique du calcul mécanique des contraintes. J'ai donc envisagé un couplage réciproque entre la conduction de la chaleur et les transitions de phase, mais un couplage non-réciproque avec le calcul mécanique (cf. figure 2.1a). Cette approche permet d'effectuer dans un premier temps un calcul thermo-métallurgique Lagrangien où l'on suit une particule matérielle qui avance dans la zone de refroidissement. En pratique, j'ai utilisé TACSI, un logiciel développé en R&D par ArcelorMittal dont la base théorique a été publiée [64–66]. On résout aux différences finies l'équation de la chaleur (2.1) dans l'épaisseur de la tôle en prenant en compte le terme source lié aux changements de phase solide/solide.

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \left[ \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x_3} \right] - \rho(T) c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_{p=2}^{N_p} \Delta H_p(T) \dot{X}_p \quad (2.1)$$

Où  $T$  est la température,  $(x_1, x_2, x_3)$  sont les coordonnées Cartésiennes,  $\lambda(T)$  est la conductivité thermique,  $\rho(T)$  la densité,  $c_p(T)$  la capacité thermique spécifique,  $\Delta H_p(T)$  le saut d'enthalpie de changement de phase,  $X_p$  la proportion de la  $p$ -ième phase et  $N_p$  le nombre de phases solides. Les conditions aux limites (2.2) consistent en une condition de convection et de radiation dans les zones où le refroidissement se fait à l'air, et en un flux imposé noté  $q_{BC}$  issu d'une courbe d'ébullition dans les zones où le refroidissement se fait par jets d'eau.

$$x_3 = \pm \frac{h}{2}, \begin{cases} -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x_3} = H_{air}(T - T_{air}) + \tilde{\sigma} \tilde{\epsilon}(T^4 - T_{air}^4) & \text{(air cooling)} \\ -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x_3} = q_{BC}(T) & \text{(water cooling)} \end{cases} \quad (2.2)$$

Où  $h$  est l'épaisseur de la tôle,  $H_{air}$  le coefficient de transfert thermique entre la tôle et l'air,  $\tilde{\sigma}$  la constante de Boltzmann,  $\tilde{\epsilon}$  l'émissivité de la tôle et  $q_{BC}(T)$  le flux de chaleur extrait par les jets d'eau. Ce calcul est très rapide en dépit d'une discrétisation temporelle assez fine, car il n'est pas nécessaire de mailler toute la structure de la bande, mais uniquement de suivre l'évolution temporelle d'une particule matérielle. Les transitions de phase sont calculées grâce à un modèle de nucléation et croissance simple. A l'issue de ce calcul, les évolutions de la température et des proportions de phase (austénite, ferrite, perlite, bainite et martensite) sont connues. On peut donc construire un champ de température et de proportion de phase qui correspond à la zone de refroidissement.

Un second calcul est ensuite dédié à la mécanique de la tôle élasto-plastique, où le chargement est en premier lieu les déformations libres associées à l'expansion thermique, aux variations de volume et à la plasticité de transformation. Ce calcul est fait aux éléments finis sur CAST3M [67] avec des éléments de coque épaisse. Le lien entre l'incrément des déformations libres, noté  $\Delta \varepsilon_{ij}^*, \Delta \varepsilon_{i3}^*$  (où  $i, j = 1, 2$ ), qui est calculé grâce aux variations de température et de proportion de phase, et l'incrément des déformations généralisées, noté  $\Delta E_{ij}^*, \Delta G_{i3}^*, \Delta R_{ij}^*$ , qui est imposé dans le modèle de coque épaisse, se lit :

$$\begin{cases} \Delta E_{ij}^* = \frac{1}{h} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \Delta \varepsilon_{ij}^* dx_3 \\ \Delta G_{i3}^* = \frac{1}{h} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \Delta \varepsilon_{i3}^* dx_3 \\ \Delta R_{ij}^* = \frac{12}{h^3} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} x_3 \Delta \varepsilon_{ij}^* dx_3 \end{cases} \quad (2.3)$$

Le calcul doit être incrémental dans la mesure où les déformations libres dépendent de l'état de contrainte dans la tôle, la plasticité de transformation dépendant de la contrainte appliquée. On fait donc entrer la tôle

progressivement dans le champ de température et de proportion de phase (cf. figure 2.1b). L'avantage est que cette progression n'est pas corrélée au pas de temps qui a permis de calculer les évolutions de température. Cette progression est corrélée à la taille du maillage, la tôle avance d'une maille par incrément. Cette stratégie permet un gain très significatif du point de vue du temps de calcul et on peut simuler la totalité du procédé (~ 100 m) en une heure environ, ce qui permet d'utiliser intensivement le modèle pour optimiser les stratégies de refroidissement.

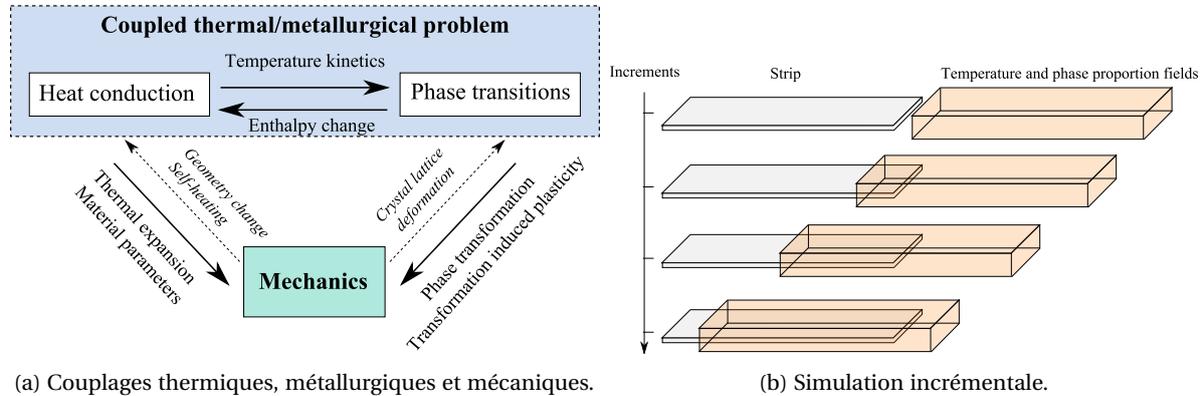


FIGURE 2.1 – Principe de la simulation de la table de sortie.

On peut suivre l'effet mécanique du refroidissement à mesure que la tôle entre dans la zone de refroidissement (cf. figure 2.2a et figure 2.2b). L'état de contrainte résiduelle a évolué significativement pendant le refroidissement, le profil longitudinal a été fortement relaxé, mais des contraintes hétérogènes dans l'épaisseur (moment de flexion) ont été introduites du fait de la dissymétrie du refroidissement entre les faces supérieure et inférieure. Par ailleurs, une simulation en grandes transformations permet de simuler le défaut géométrique final résultant du procédé de refroidissement.

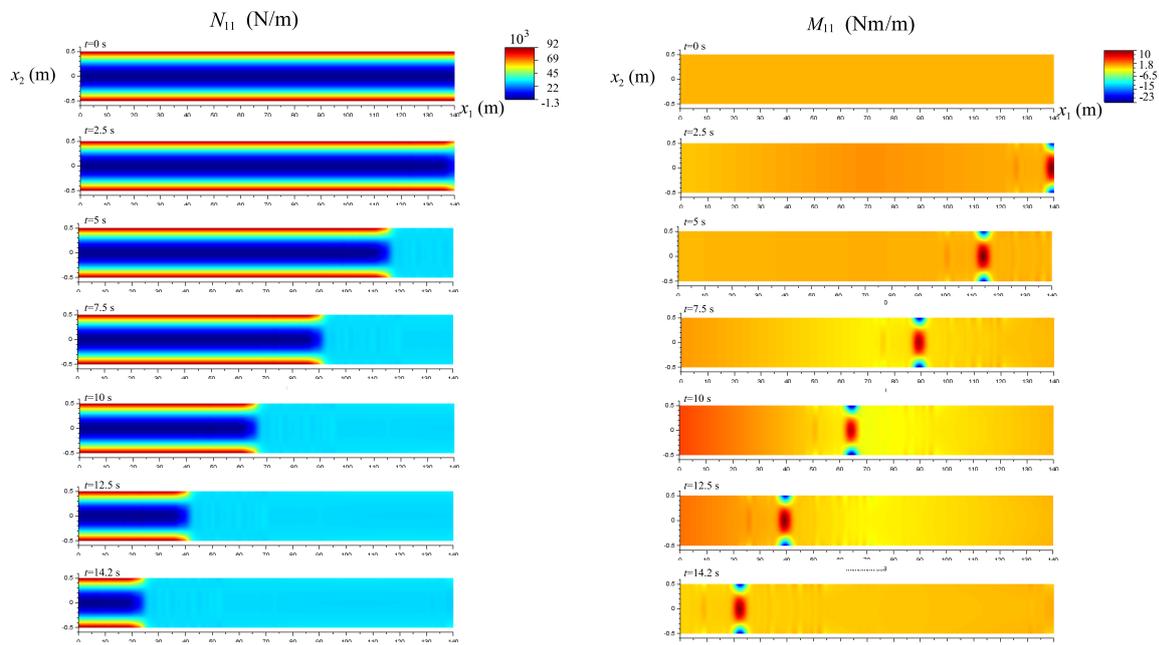


FIGURE 2.2 – Quelques composantes des contraintes généralisées pendant le passage dans la table de sortie.

Sur le plan académique, ce type de découplage entre la cinétique thermo-métallurgique et le calcul mé-

canique, permet de construire des modèles très économes sans perdre l'essentiel des phénomènes mis en jeu. L'intérêt est de rendre calculable des problèmes, qui abordés avec des couplages systématiques seraient trop coûteux pour présenter un réel intérêt. Ce modèle a du potentiel pour l'industrie sidérurgique dans la mesure où les microstructures complexes des nuances récentes nécessitent d'adapter le procédé pour éviter les défauts de planéité liés aux contraintes résiduelles. Par ailleurs, la stratégie de modélisation adoptée est également utile pour des procédés similaires tels que la trempe.

## 2.3 Bobinage

J'ai publié une série d'articles pour simuler le bobinage dans son ensemble : (i) l'**enroulement** de la tôle sur elle-même, (ii) le **refroidissement** où des changements de phase ont lieu, (iii) le calcul des **contraintes résiduelles** qui évoluent pendant le refroidissement et (iv) le possible **effondrement** de la bobine sur elle-même dans certains cas. Ces modèles sont cohérents entre eux et sont chaînés les uns avec les autres.

Le premier intérêt de ces travaux est l'utilisation d'approches hybrides entre des solutions analytiques et des optimisations numériques. L'idée est de gérer la non-linéarité des calculs par des optimisations numériques, en construisant la fonctionnelle avec des problèmes linéaires et solubles par des solutions analytiques. Cela permet de viser des coûts calculatoires réduits pour l'évaluation de la fonctionnelle et de son gradient et d'obtenir un modèle efficace pour simuler des situations complexes.

Le second intérêt de ces travaux tient à leur potentiel applicatif. Puisque l'ensemble de la chaîne du procédé est simulée, on peut répondre à des problématiques très limitantes pour le développement de nouvelles nuances. En effet, des nuances fortement alliée en bore ou en manganèse silicium, présentent la particularité nouvelle de retarder suffisamment les transitions de phase au cours du refroidissement, que l'essentiel de ces transformations se font dans la bobine. Et on observe en pratique des affaissements de bobine, qui limitent très fortement le développement de ces aciers. Les outils que j'ai développés permettent de comprendre et d'éviter ces phénomènes en ajustant les paramètres du procédé.

### 2.3.1 Enroulement

*Cette section est liée à [47–50].*

Un certain nombre de modèles numériques permettent de simuler des enroulements. Ces modèles s'appuient généralement sur une vision homogénéisée de l'enroulement, c'est-à-dire un cylindre creux dont la raideur radiale est d'autant plus faible que la bobine contient de spires, car chaque contact affaiblit la raideur radiale globale. L'ajout d'une nouvelle spire est traitée comme une structure à paroi mince dont le rayon de courbure est imposé [68–74]. Ces modèles sont relativement frustrés et ne permettent pas de déterminer la longueur de contact entre chaque spire, ni de considérer les déformations plastiques.

Pour développer un modèle d'enroulement plus complet, l'enjeu est de proposer un modèle élastoplastique en grandes transformations (les rotations peuvent être importantes) avec de très nombreux contacts, c'est-à-dire que la bobine n'est plus homogénéisée comme un cylindre creux, mais au contraire, on considère toutes les spires individuellement. Les calculs par éléments finis sont extrêmement coûteux et peu précis, il est exclu de simuler un enroulement de plus d'une dizaine de tours [75]. Cependant, les enroulements industriels peuvent faire plusieurs centaines de tours. Le modèle que j'ai proposé permet de simuler des enroulements avec un très grand nombre de spires dans un temps raisonnable, surtout dans sa version simplifiée.

La prédiction de la zone de contact entre chaque spire est une sortie majeure du modèle dans la mesure où les tôles ont un profil d'épaisseur hétérogène (plus épais au centre que sur les rives en général). Cela conduit à concentrer le contact au centre de la bobine (là où la tôle est la plus épaisse). Ce phénomène s'accroît au fur et à mesure que l'enroulement se poursuit. La forme finale de la bobine n'est donc pas cylindrique mais en forme de tonneau. Ce phénomène conduit à une concentration de contrainte, qui dépend fortement de la prédiction des efforts de contact et qui a pour conséquence de concentrer la traction appliquée par l'enrouleur au centre de la tôle, notamment sur les dernières spires de la bobine, le phénomène s'accroissant à chaque spire. Cela crée souvent un défaut de planéité due à des écoulements plastiques au centre. Par ailleurs, ce même phénomène de concentration des pressions de contact crée une surcompression au centre des premières spires (au contact du mandrin central), ce qui crée un défaut de planéité en rive (cf. figure 2.3a).

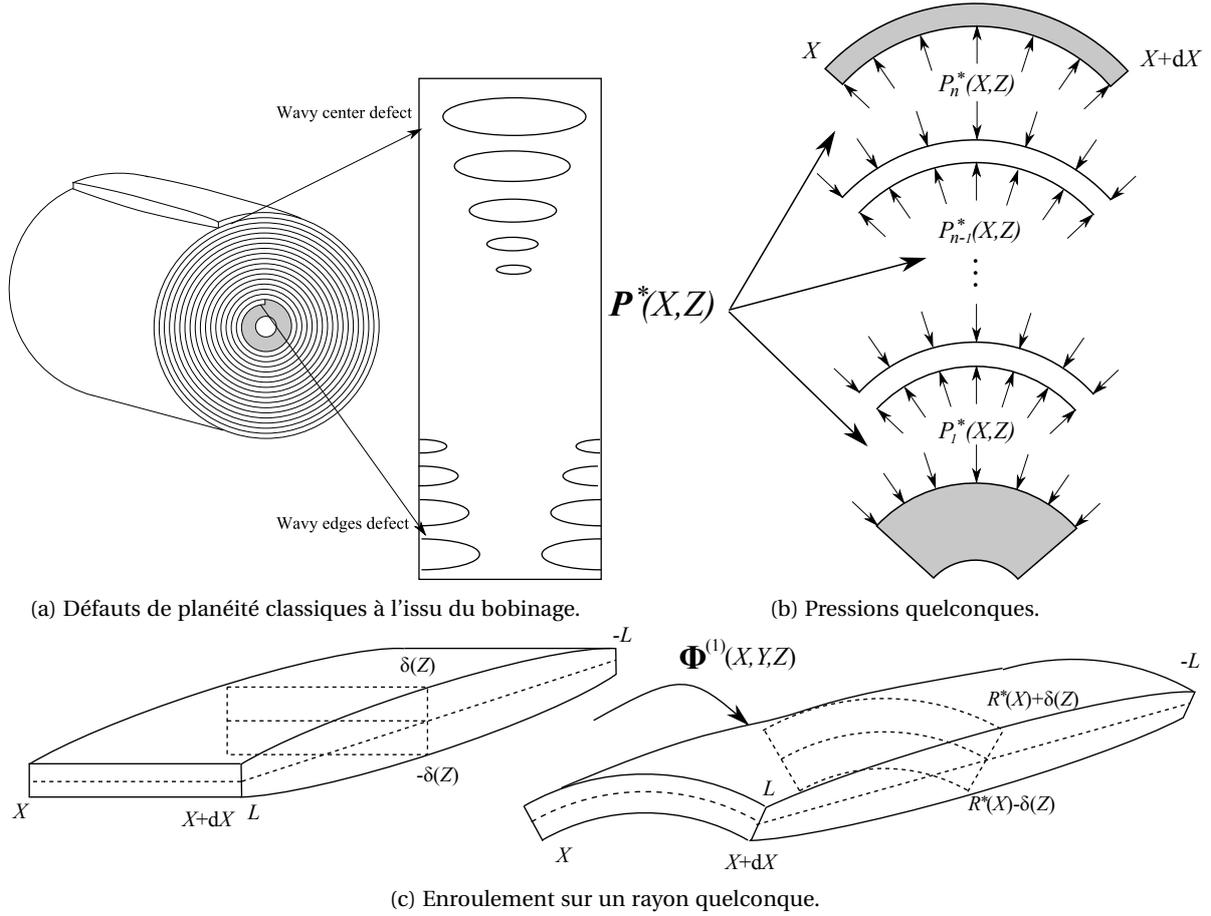


FIGURE 2.3 – Principe du modèle de bobinage.

La stratégie adoptée est de proposer une résolution en plusieurs étapes. La première consiste à proposer une solution analytique élasto-plastique en grandes transformations correspondant à l'enroulement d'un incrément de tôle (initialement plate) sur un cylindre de rayon arbitraire noté  $R^*(X)$  (cf. figure 2.3c). La transformation imposée notée  $\underline{\Phi}^{(1)}$  se lit dans un repère cylindrique :

$$\underline{\Phi}^{(1)}(X, Y, Z) = (R^*(X) + Y)\underline{e}_r + Z\underline{e}_z \quad (2.4)$$

Ainsi le gradient de la transformation se lit :

$$\underline{\underline{F}}(X, Y, Z) = \underline{\underline{\nabla}}\underline{\Phi}^{(1)}(X, Y, Z) = -\frac{R^*(X) + Y}{R^*(X)}\underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_X + \underline{e}_r \otimes \underline{e}_Y + \underline{e}_Z \otimes \underline{e}_Z \quad (2.5)$$

La solution analytique de cette première étape de courbure repose sur une décomposition multiplicative du gradient de la transformation en une partie élastique  $\underline{\underline{E}}$  et une partie plastique  $\underline{\underline{P}}$  :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{E}}\underline{\underline{P}} \quad (2.6)$$

Ensuite on applique un champ de pression de contact notée  $\underline{P}^*(X, Z)$ , et on propose une solution analytique complémentaire en petites transformations pour un problème élasto-plastique (cf. figure 2.3b). Cette seconde solution analytique est directe en écrivant l'équilibre et la contrainte équivalente de Tresca, qui est utilisée plutôt qu'un critère de von Mises pour faciliter les développements mathématiques.

Ces deux solutions sont ensuite combinées grâce à des problèmes d'optimisation. Pour un rayon de courbure  $R^*(X)$  donné on calcule les pressions de contact correspondantes, notées  $\underline{P}^*(X, Z)$ , grâce à une loi de contact incluant les effets de la rugosité. On détermine pour cela de manière stochastique des courbes d'Abbott composites permettant de calculer la pression de contact  $P_C$  en fonction de l'interpénétration des

surfaces nominales  $\llbracket r_C \rrbracket$ . La loi se lit donc  $P_C = f(\llbracket r_C \rrbracket)$ . Grâce à cette loi de contact, on détermine les pressions de contact dans la bobine par optimisation numérique du fait de la non-linéarité des problèmes de contact. En effet, pour un rayon de courbure  $R^*(X)$  donné, si on considère des pressions de contact arbitraires notées  $\underline{P}^*(X, Z)$  on peut calculer, grâce à la seconde solution analytique en petites transformations, les déplacements correspondants et donc l'interpénétration des surfaces nominales. Cette interpénétration correspond, grâce à la loi de contact, à une seconde évaluation des pressions de contact notées  $\tilde{\underline{P}}^*(X, Z)$ . L'optimisation numérique consiste donc à minimiser l'écart entre ces pressions de contact soit :

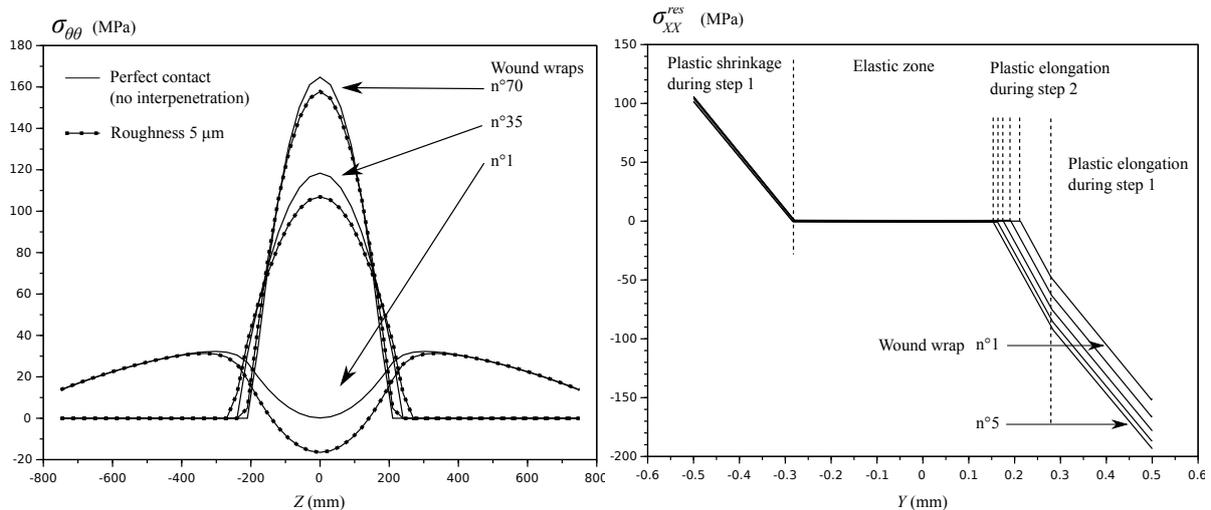
$$\forall R^*(X), \underline{P}^*(X, Z) = \underset{\underline{P}^*(X, Z) \geq 0}{\operatorname{argmin}} \left| \tilde{\underline{P}}^*(X, Z) - \underline{P}^*(X, Z) \right| \quad (2.7)$$

Jusqu'à présent la résolution se fait pour un rayon arbitraire  $R^*(X)$ . Le rayon de courbure solution pour l'incrément de tôle noté  $R(X)$  est déterminé en minimisant l'écart entre la résultante de traction issue du calcul des deux solutions analytiques et de la force résultante appliquée par l'enrouleur notée  $F_a(X)$ , soit :

$$\forall X, R(X) = \underset{R^*(X)}{\operatorname{argmin}} \left| \int_{-L}^L \int_{-\delta(Z)}^{\delta(Z)} \sigma_{\theta\theta}(X, Y, Z) dY dZ - F_a(X) \right| \quad (2.8)$$

Cela signifie qu'à chaque itération de cette minimisation, il est nécessaire de calculer les contraintes de contact dans la bobine par optimisation numérique.

En autres sorties de calcul comme l'état de contrainte (cf. figure 2.4a) ou de déformation, les déplacements, les pressions de contact etc., on peut noter les profils de contraintes résiduelles après déroulement de la bobine, c'est-à-dire en prenant une référence plate (cf. figure 2.4b). Cette estimation permet de quantifier l'effet du procédé d'enroulement sur l'évolution des défauts de planéité dans la chaîne de procédés de mise en forme des tôles.



(a) Contrainte orthoradiale dans la bobine après 70 spires en fonction de la position axiale. (b) Contrainte résiduelle dans la direction de laminage après déroulement selon l'épaisseur de la tôle.

FIGURE 2.4 – Sorties du modèle de bobinage.

L'impact de ces travaux est d'abord industriel dans la mesure où, à ma connaissance, il s'agit du modèle le plus complet (où les non-linéarités géométrique, de comportement et de contact ont été prises en compte) ayant été publié à ce jour. En outre, les temps de calcul sont compatibles avec une utilisation paramétrique intensive dans le but d'optimiser le procédé. Du point de vue scientifique, le développement de tels modèles peut présenter un intérêt, car des alternatives astucieuses aux éléments finis sont élaborées lorsque ces derniers échouent à fournir un résultat intéressant dans un temps acceptable. L'hybridation entre des solutions analytiques et des optimisations numériques semble donc intéressante pour traiter ce type de problèmes.

### 2.3.2 Refroidissement de bobine

Cette section est liée à [51].

Le problème de refroidissement de bobine est traité dans une optique similaire à celle du problème d'enroulement, c'est-à-dire en utilisant des solutions analytiques. Il s'agit d'un problème essentiellement axisymétrique comme le montre les mesures par caméra infrarouge dont on dispose (cf. figure 2.5a). Ce problème thermique est fortement couplé avec les transitions de phase, ce qui rend le problème non-linéaire. Par ailleurs, la situation est assez complexe dans la mesure où les interfaces entre les spires jouent l'effet de résistances thermiques. Ce phénomène est dû à la rugosité locale, qui contraint le flux de chaleur à passer entre les aspérités (cf. figure 2.5b). Du fait du très grand nombre d'interfaces et des résistances thermiques dépendant des pressions de contact, ce problème est relativement difficile à simuler efficacement avec les outils traditionnels (éléments finis thermiques ou différences finies par exemple). Par ailleurs, les changements de phase se poursuivent pendant le refroidissement des bobines, particulièrement pour les nuances récentes (par exemple les nuances à forte teneur en bore ou manganèse et silicium). Le problème est donc couplé entre la thermique et la métallurgie, ce qui conduit à un terme source qui dépend de la température.

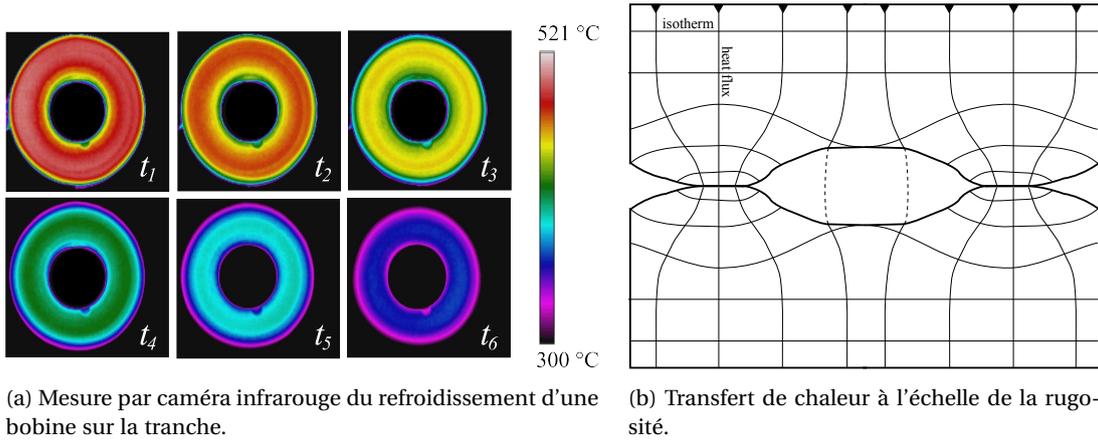


FIGURE 2.5 – Hypothèses du modèle thermique de bobine.

La stratégie de calcul consiste à modéliser la bobine comme un assemblage unidimensionnel multicouche (où chaque couche représente une spire), c'est-à-dire que non seulement le problème est axisymétrique, mais on néglige de plus les flux dans l'axe de la bobine. En effet, les transferts de chaleur dans l'épaisseur des spires ( $\sim 1$  mm) est bien plus aisé que dans l'axe ( $\sim 1$  m). Cette hypothèse quoique naturelle mérite d'être validée expérimentalement, ce qui est en cours de réalisation avec une campagne d'essais sur des bobines industrielles. On résout donc analytiquement l'équation de la chaleur (2.9) avec un terme source non-linéaire dû aux chaleurs latentes des différentes transitions de phase (austénite vers ferrite, perlite, bainite ou martensite).

$$\frac{\partial^2 T^{(i)}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r} - \frac{1}{D^{(i)}} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial t} = - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{\Delta H_p(T^{(i)})}{\lambda^{(i)}} \dot{X}_p^{(i)}(T^{(i)}) \quad (2.9)$$

Où  $(i)$  représente la  $i$ -ième spire, on compte  $n+1$  spires au total,  $T^{(i)}$  est la température dans la  $i$ -ième spire,  $D^{(i)}$  la diffusivité thermique,  $\lambda^{(i)}$  la conductivité thermique,  $N_p$  le nombre de phases,  $\Delta H_p$  le saut d'enthalpie du  $p$ -ième changement d'état (solide/solide), et  $\dot{X}_p^{(i)}$  le  $p$ -ième taux de proportion de phase.

L'introduction de résistances de contact dans le multicouche rend l'écriture des conditions de transfert entre les couches plus difficile que les conditions de continuité habituelles (continuité du flux de chaleur et des températures). Pour prendre en compte la discontinuité de température entre les spires, le plus simple revient à introduire une très fine couche isolante entre chaque spire. L'épaisseur de la couche isolante est calculée pour que le flux traversant l'interface soit identique au flux qui serait calculé grâce à la résistance thermique, qui dépend de la pression de contact évaluée grâce au modèle d'enroulement précédent. Déterminer la résistance thermique de contact en fonction de la pression de contact et de la rugosité des surfaces est un problème bien étudié par exemple [76] donne une revue de la littérature à ce sujet et présente un modèle, que nous avons utilisé. Les conditions aux limites tiennent à des conditions de convection sur les

surfaces externe et interne de la bobine et la continuité des flux et des températures entre spires, ainsi :

$$\forall i \in \{0, \dots, n-1\}, \quad \begin{cases} [0] & : \lambda^{(0)} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial r}(r^{(0)}, t) = H^{(0)} (T^{(0)}(r^{(0)}, t) - T_{int}) \\ [n] & : \lambda^{(n)} \frac{\partial T^{(n)}}{\partial r}(r^{(n+1)}, t) = -H^{(n+1)} (T^{(n)}(r^{(n+1)}, t) - T_{ext}) \\ [i]_T & : T^{(i)}(r^{(i+1)}, t) = T^{(i+1)}(r^{(i+1)}, t) \\ [i]_H & : \lambda^{(i)} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r}(r^{(i+1)}, t) = \lambda^{(i+1)} \frac{\partial T^{(i+1)}}{\partial r}(r^{(i+1)}, t) \end{cases} \quad (2.10)$$

Où  $r^{(i)}$  sont les positions des interfaces,  $H^{(0)}, H^{(n+1)}$  sont les coefficients de transfert thermique pour les surfaces intérieure et extérieure avec l'air ambiant de température noté respectivement  $T_{int}$  et  $T_{ext}$ .

Je me suis appuyé sur le développement d'une solution analytique pour ce problème. Plusieurs solutions existent pour des structures composites multicouches. Pour les problèmes unidimensionnels sans terme source, en coordonnées cartésiennes, cylindrique ou sphériques, on peut citer [77, 78], ce qui a été étendu en 2D en coordonnées cartésiennes [79]. Des termes source constants ont été pris en compte pour des composites cylindriques en 2D [80, 81] et des composites sphériques [82]. Cependant, ces solutions ne permettent pas de considérer des termes source qui dépendent du temps ou de la température. Par ailleurs, une solution analytique élégante a été proposée pour des composites multicouches avec des termes source qui dépendent du temps et de l'espace [83], mais cette solution n'est pas très adaptée pour des termes sources qui sont interpolés à partir de données numériques comme c'est le cas pour notre problème, où le terme source est obtenu en résolvant un problème de changement de phase grâce à des lois d'Avrami. J'ai donc développé une solution analytique spécifique pour traiter le refroidissement des bobines.

Pour gérer la non-linéarité due au fait que le terme source dépende de la solution en température, la résolution pratique se fait en deux temps. D'abord on résout l'équation de la chaleur pour le multicouche en supposant le second membre (terme source) connu. On obtient une première évaluation du champ de température dans la bobine sur toute la durée du calcul. Ensuite, ce champ de température est utilisé pour calculer les transitions de phase. Pour ce modèle, j'ai simplement utilisé des lois d'Avrami et de Koistinger (pour la transformation martensitique) calibrées expérimentalement sur une nuance d'acier DP980. À partir de ces évolutions de phase sur toute la durée de la simulation, il est aisé de recalculer le terme source de l'équation de la chaleur, qui est interpolé par une fonction pour permettre la résolution analytique du problème. On recalcule le champ de température en prenant pour second membre la nouvelle évaluation du terme source. Cette procédure est répétée jusqu'à convergence. En pratique quelques itérations suffisent.

La solution analytique s'appuie sur des développements en série de fonctions solutions de l'équation (2.9). Et l'on est ramené à identifier les coefficients de la série en inversant des matrices. Le contraste du problème, avec des spires très conductrices et relativement épaisses (de 1 à 10 mm) contre des couches très isolantes et très fines, peut rendre l'inversion des matrices difficile (mauvais conditionnement). On peut régulariser le problème en augmentant la conductivité thermique dans les couches isolantes et en augmentant leur épaisseur pour que le flux transmis reste le même.

Ces travaux permettent de calculer sur des durées assez importantes, c'est-à-dire des dizaines d'heures pour le refroidissement d'une bobine dans des conditions réalistes, l'état de la microstructure (proportions de phases) et des températures. On a accès au détail des champs dans chaque spire de la bobine (cf. figure 2.6 et figure 2.7), en considérant des hétérogénéités dans l'épaisseur de chaque spire.

Cette approche est très détaillée, dans la mesure où les champs sont calculés continuellement au cours du temps dans l'épaisseur de chaque spire, et à la fois très simplifiée du fait de l'hypothèse d'axisymétrie qui a permis de réduire la dimension du problème à traiter. On voit une fois encore avec cet exemple, comment une analyse spécifique du problème permet de construire une approche rapide, qui rend compte de l'essentiel des phénomènes à prendre en compte, dans un contexte où les méthodes généralistes sont mal adaptées. Cette solution de refroidissement des bobines contribue ainsi à la compréhension de la formation des microstructures de nuances récentes, et à l'optimisation du procédé pour permettre d'exploiter au mieux ces innovations métallurgiques, aujourd'hui limitées par les difficultés de mise en forme.

### 2.3.3 Contraintes résiduelles

*Cette section est liée à [52, 53].*

Les contraintes résiduelles dans les bobines ont peu été étudiées. Seules quelques tentatives assez frustrées ont été publiées [84, 85] dans la mesure où l'effet des contacts n'est pas pris en compte. Le calcul des

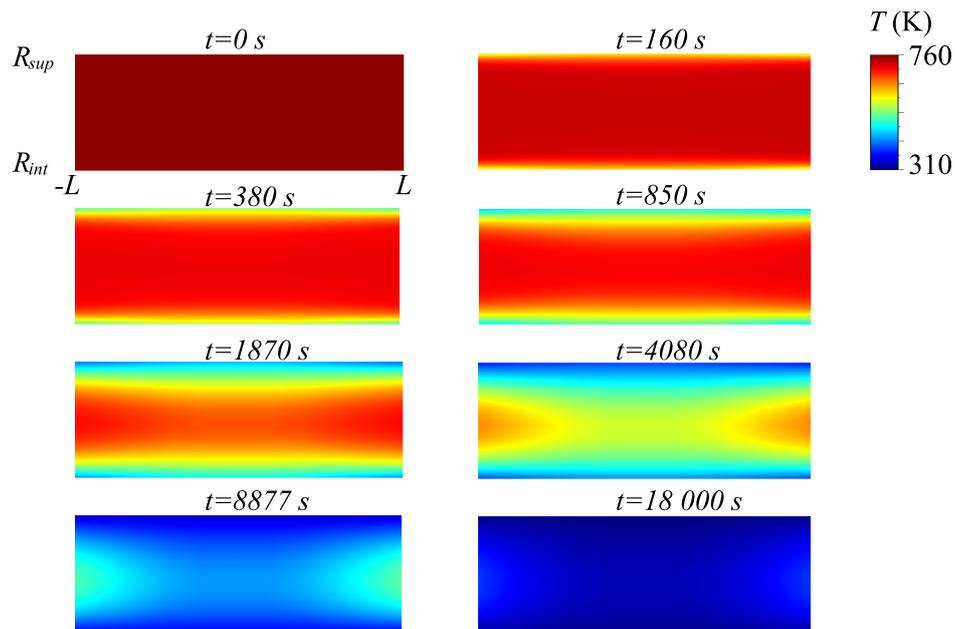


FIGURE 2.6 – Champ de température dans la bobine (axisymétrique) au cours du temps.

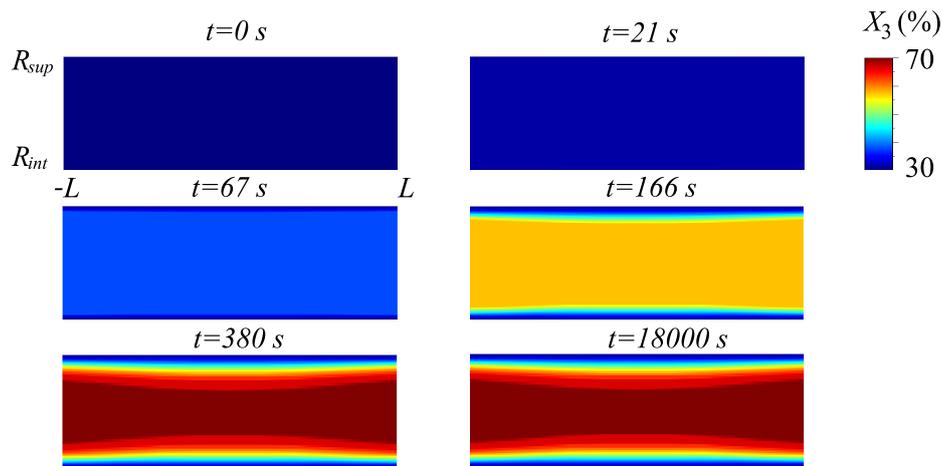


FIGURE 2.7 – Champ de phase (perlite) dans la bobine (axisymétrique) au cours du temps.

contraintes résiduelles pendant le refroidissement se fait en s'appuyant sur la solution thermique précédente. Il s'agit d'un calcul mécanique où des déformations libres dues à l'expansion thermique, à la variation de volume des transitions de phase et à la plasticité de transformation sont prises en compte. Un calcul incrémental est nécessaire du fait de la non-linéarité. En effet, les déformations libres à imposer dépendent de l'état de contrainte lui-même solution. Ainsi à chaque incrément de temps, les incréments de température et de proportion de phase provenant de la solution précédente (refroidissement de bobine par conduction thermique avec sources) sont utilisés pour calculer l'incrément de déformation libre à imposer. Comme pour les modèles précédents, chaque spire est traitée individuellement grâce à une solution analytique (cf. figure 2.8).

Cette solution s'appuie sur l'équation de Navier (2.11), qui fait apparaître l'incrément total de déforma-

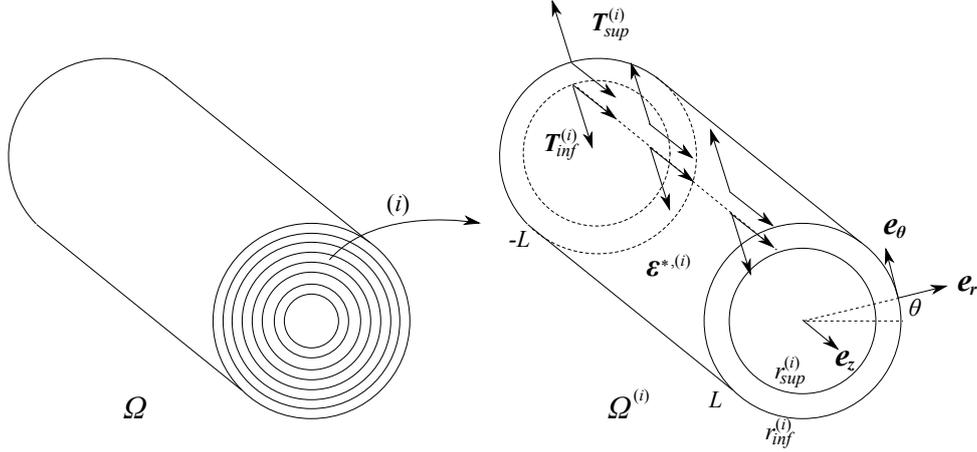


FIGURE 2.8 – Calcul des contraintes résiduelles dans chaque spire.

tion libre à imposer comme un second membre.

$$\mu^{(i)} \underline{\Delta} \underline{u}^{(i)} + (\lambda^{(i)} + \mu^{(i)}) \underline{\nabla} \text{div} \underline{u}^{(i)} = \underline{\text{div}} \left[ \lambda^{(i)} \text{tr} \left[ \underline{\underline{\varepsilon}}^{*,(i)} \right] \underline{\underline{1}} + 2\mu \underline{\underline{\varepsilon}}^{*,(i)} \right] \quad (2.11)$$

Où  $\lambda^{(i)}, \mu^{(i)}$  sont les coefficients de Lamé dans la  $i$ -ième spire,  $\underline{u}^{(i)}$  est le déplacement, et  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{*,(i)}$  est l'incrément de déformation libre, comprenant les déformations associées à la plasticité de transformation et les déformations volumiques associées aux variations de température et aux transitions de phase. On considère les conditions aux limites suivantes (cf. figure 2.8) :

$$\forall 1 \leq i \leq N, \quad \begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}^{(i)}(r_{sup}^{(i)}, z) \cdot \underline{n}(r_{sup}^{(i)}, z) = \underline{T}_{sup}^{(i)}(z) \\ \underline{\underline{\sigma}}^{(i)}(r_{inf}^{(i)}, z) \cdot \underline{n}(r_{inf}^{(i)}, z) = \underline{T}_{inf}^{(i)}(z) \\ \underline{\underline{\sigma}}^{(i)}(r, \pm L) \cdot \underline{n}(r, \pm L) = 0 \\ \underline{T}_{inf}^{(i+1)}(z) = -\underline{T}_{sup}^{(i)}(z) \\ \underline{T}_{sup}^{(N)}(z) = \underline{T}_{inf}^{(1)}(z) = 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

Où  $r_{inf}^{(i)}, r_{sup}^{(i)}$  sont les rayons interne et externe de la  $i$ -ième spire, les vecteurs contrainte  $\underline{T}_{sup}^{(i)}, \underline{T}_{inf}^{(i)}$  sont arbitraires, en vérifiant cependant la continuité aux interfaces, et seront identifiés ultérieurement grâce à un problème d'optimisation sur les contraintes de contact. Par ailleurs, les spires interne et externe sont libres de contrainte. En pratique, j'ai résolu ce problème sous hypothèse axisymétrique du fait que j'avais déjà fait cette hypothèse pour le refroidissement de bobine, grâce à des mesures par caméra infrarouge (cf. figure 2.5a). On est donc ramené à résoudre le problème de Navier suivant :

$$\begin{cases} (\lambda^{(i)} + 2\mu^{(i)}) \left( \frac{\partial^2 u_r^{(i)}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r^{(i)}}{\partial r} - \frac{u_r^{(i)}}{r^2} \right) + \mu^{(i)} \frac{\partial^2 u_r^{(i)}}{\partial z^2} + (\lambda^{(i)} + \mu^{(i)}) \frac{\partial^2 u_z^{(i)}}{\partial r \partial z} = f_r^{*,(i)}(r, z) \\ (\lambda^{(i)} + 2\mu^{(i)}) \frac{\partial^2 u_z^{(i)}}{\partial z^2} + \mu^{(i)} \left( \frac{\partial^2 u_z^{(i)}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z^{(i)}}{\partial r} \right) + (\lambda^{(i)} + \mu^{(i)}) \left( \frac{\partial^2 u_r^{(i)}}{\partial r \partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r^{(i)}}{\partial z} \right) = f_z^{*,(i)}(r, z) \end{cases} \quad (2.13)$$

Où l'on a posé :

$$\begin{cases} f_r^{*,(i)}(r, z) = (\lambda^{(i)} + 2\mu^{(i)}) \frac{\partial \varepsilon_{rr}^{*,(i)}}{\partial r} + \lambda^{(i)} \left( \frac{\partial \varepsilon_{\theta\theta}^{*,(i)}}{\partial r} + \frac{\partial \varepsilon_{zz}^{*,(i)}}{\partial r} \right) + 2\mu^{(i)} \left( \frac{\varepsilon_{rr}^{*,(i)}}{r} - \frac{\varepsilon_{\theta\theta}^{*,(i)}}{r} + \frac{\partial \varepsilon_{rz}^{*,(i)}}{\partial z} \right) \\ f_z^{*,(i)}(r, z) = (\lambda^{(i)} + 2\mu^{(i)}) \frac{\partial \varepsilon_{zz}^{*,(i)}}{\partial z} + \lambda^{(i)} \left( \frac{\partial \varepsilon_{rr}^{*,(i)}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{\theta\theta}^{*,(i)}}{\partial z} \right) + 2\mu^{(i)} \left( \frac{\partial \varepsilon_{rz}^{*,(i)}}{\partial r} + \frac{\varepsilon_{rz}^{*,(i)}}{r} \right) \end{cases} \quad (2.14)$$

Techniquement la solution analytique s'appuie sur des développements en séries de Bessel-Fourier modifiées (fonctions orthogonales entre elles selon un produit scalaire spécifique). J'ai introduit ces familles de fonctions car elles permettent de développer analytiquement l'incrément de déformation libre et de trouver

une solution particulière du système couplé (2.13) et d'identifier facilement les coefficients du développement par des calculs matriciels. Ainsi les calculs sont très opérants du point de vue calculatoire. Les pressions de contact sont évaluées à chaque incrément de temps par optimisation numérique, de la même manière que dans le modèle d'enroulement de bobine (cf. (2.7)). On obtient, en sortie du calcul, l'évolution de la pression de contact, et l'évolution des déformations irréversibles, responsables des contraintes résiduelles, qui sont calculées de manière hétérogène dans l'épaisseur de chaque spire. On peut en déduire un état de courbure résiduelle de la tôle une fois déroulée et mesurer ainsi l'effet des différents procédés sur les défauts de planéité en fin de ligne (cf. figure 2.9).

Ces travaux ouvrent des perspectives intéressantes, car ils permettent de boucler un cycle de modélisation du procédé de laminage, puis le refroidissement sur la table de sortie avec les changements de phase, puis le bobinage dans son ensemble, impliquant lui aussi des changements de phase. Ce cycle de modélisation a été chaîné dans un seul modèle global, pour permettre non seulement d'identifier et comprendre des mécanismes conduisant aux contraintes résiduelles et aux défauts de planéité qui y sont associés, mais encore de faire des études paramétriques et des optimisations numériques dans la mesure où la chaîne de calcul est relativement économe (une heure au total pour des bobines d'une centaine de spires). Ces codes pourraient être transposés dans un langage plus adapté et rapide, car ils sont écrits actuellement en Scilab. Cela permettrait d'envisager un transfert vers l'industrie plus efficace. En effet, dans le cadre du contrat de recherche que je dirigeais (2014-2017) avec ArcelorMittal, ces codes ont été transférés à l'industrie et sont déjà utilisés pour comprendre et optimiser les procédés, mais un déploiement plus large nécessiterait cependant une réécriture en C++ par exemple.

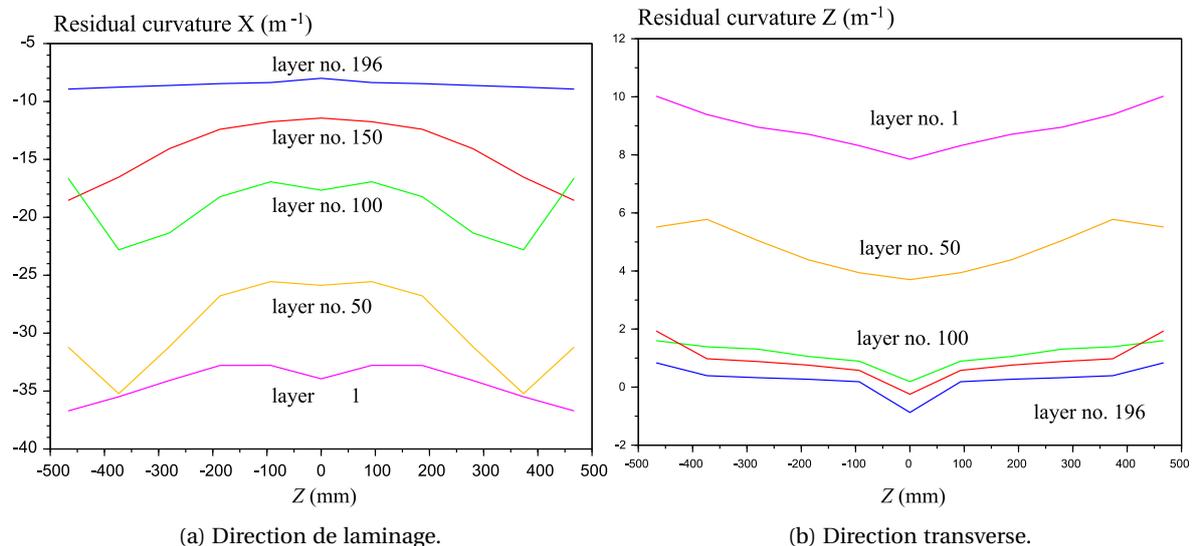


FIGURE 2.9 – Courbure résiduelle de la tôle déroulée prenant en compte les effets du refroidissement aux positions correspondant à différentes spires.

### 2.3.4 Effondrement de bobine

*Cette section est liée à [54].*

Enfin, un problème important pour certaines nuances, est l'affaissement (ou l'effondrement) des bobines (cf. figure 2.10). J'ai travaillé sur ce sujet en collaboration avec Maxime Gantier dont j'encadrais le stage de master 2. Ce problème est encore très peu ou pas étudié, et j'ai tenté d'apporter une analyse des principaux mécanismes de déformation en jeu pour comprendre les conditions, qui conduisent à ces affaissements. Outre la gravité, ce phénomène semble être lié aux transitions de phase du fait que les nuances, qui sont sujettes aux affaissements, ont la particularité de poursuivre significativement leurs transformations de phase pendant le bobinage. J'ai donc cherché à développer un modèle d'effondrement de bobine qui prenne en compte les déformations libres subies pendant les transitions de phase (thermique, variation de volume et plasticité de transformation).



(a) Effondrement complet.



(b) Effondrement partiel.

FIGURE 2.10 – Photographies de l'effondrement de bobines.

Il est très clair qu'un modèle axisymétrique comme celui décrit précédemment ne peut capturer le phénomène, qui semble au minimum orienté par la gravité. Il faut donc repenser les solutions précédentes pour inclure cette dimension. Cependant, les développements détaillés, où chaque spire est traitée indépendamment et connectée aux autres par un système de pressions de contact obtenues par optimisation numérique, est difficile à étendre à une situation non axisymétrique. Si les solutions analytiques sont transposables relativement facilement, la gestion des contacts est plus problématique. En effet, dans la situation axisymétrique, il est raisonnable de traiter les contacts comme un jeu de pression entre les spires. Cependant, l'effondrement de bobine implique des glissements tangentiels aux interfaces. Il s'agit même du principal moteur de l'effondrement. Ainsi, il aurait fallu inclure des lois de contact reliant la pression de contact à la friction tangentielle (loi de Coulomb par exemple) avec localement des pertes de contact, ce qui aurait compliqué grandement la détermination à la fois des pressions de contact et des glissements associés, et aurait probablement conduit à des coûts de calcul assez élevés.

C'est pourquoi j'ai tenté une approche homogénéisée bidimensionnelle (plan  $r, \theta$  en polaire), où la bobine est remplacée par un milieu continu "équivalent" (cf. figure 2.11). Ce choix simplifie grandement le problème, mais interdit de poser certaines questions au modèle. Par exemple, la perte locale de contact comme on peut l'observer figure 2.10 se traduit par une contrainte radiale en traction et on perd ainsi le détail. Les flambements locaux ou le déspirage interne ne sont pas accessibles non plus dans cette approche. En revanche, le phénomène majeur de glissement des spires conduisant à l'effondrement des bobines est capturé.

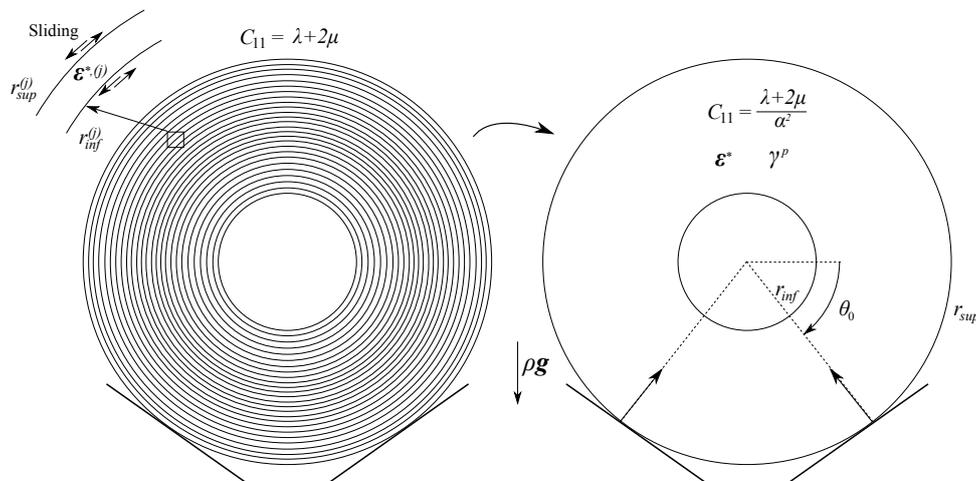


FIGURE 2.11 – Modèle complet et modèle homogénéisé orthotrope.

Pour modéliser les glissements entre les spires, on considère que le milieu équivalent est soumis à un champ de déformation irréversible en cisaillement noté  $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$ , qui simule les glissements entre spires. On note :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^p = \frac{\gamma^p}{2} (\underline{e}_r \otimes \underline{e}_\theta + \underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_r) \quad (2.15)$$

De plus, la raideur radiale globale de ce milieu équivalent est plus faible que la raideur tangentielle. C'est un fait connu et bien compris, la raideur de chaque contact affaiblit la raideur d'un empilement par rapport à la raideur du matériau constitutif. Le comportement se lit donc en notation de Voigt :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{r\theta} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{12} & C_{22} & 0 \\ 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr}^e \\ \varepsilon_{\theta\theta}^e \\ 2\varepsilon_{r\theta}^e \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

Où l'on a posé :

$$C_{11} = \frac{\lambda + 2\mu}{\alpha^2} \quad \left| \quad C_{22} = \lambda + 2\mu \quad \right| \quad C_{12} = \lambda \quad \left| \quad C_{66} = \mu \quad (2.17)$$

On traite donc le cas d'un cylindre équivalent orthotrope, chargé par un champ de déformation irréversible en cisaillement, qui simule les glissements entre les spires, et chargé par la gravité et les déformations libres liées aux transitions de phase et à la thermique :

$$\begin{cases} \underline{\text{div}}[\underline{\underline{\sigma}}] = \rho g \underline{e}_y & \text{(équilibre)} \\ \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e & \text{(comportement orthotrope)} \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\underline{\nabla}[\underline{u}] + \underline{\nabla}[\underline{u}]^T) & \text{(compatibilité)} \\ \underline{\underline{\varepsilon}}^e = \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}^p & \text{(tenseur élastique)} \end{cases} \quad (2.18)$$

Où  $\rho$  est la masse volumique et  $g$  l'accélération du champ de gravité. Les conditions aux limites sont constituées des réactions ponctuelles aux appuis, soit :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}}(r_{sup}, \theta) \cdot \underline{n} = \underline{T} = -\frac{\pi (r_{sup}^2 - r_{inf}^2) \rho g}{2 \sin(\theta_0) r_{sup}} (\delta_{\theta_0}(\theta) + \delta_{\pi-\theta_0}(\theta)) \underline{e}_r \\ \underline{\underline{\sigma}}(r_{inf}, \theta) \cdot \underline{n} = 0 \end{cases} \quad (2.19)$$

Où  $\theta_0$  est l'angle qui définit la positions des appuis,  $r_{inf}, r_{sup}$  sont les rayons interne et externe du milieu équivalent, et  $\delta_{\theta_0}$  représente une distribution de Dirac centrée en  $\theta_0$ .

En pratique on se place en coordonnées polaires et on résout l'équation de Navier (c'est-à-dire l'équation d'équilibre écrite sur les déplacements) pour faire apparaître au second membre, les déformations libres imposées et les déformations de cisaillement (représentant le glissement entre les spires) notées  $\gamma^p$  et encore inconnues à ce stade. On est ramené à résoudre pour tout  $\gamma^p$ , le système couplé suivant :

$$\begin{cases} (\lambda + 2\mu) \left( \frac{1}{\alpha^2} \left( \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) - \frac{u_r}{r^2} \right) + \mu \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + (\lambda + \mu) \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial r \partial \theta} - (\lambda + 3\mu) \frac{1}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} = \mu (f_r^* + f_r^p) + \rho g \sin(\theta) \\ \mu \left( \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r^2} \right) + (\lambda + 2\mu) \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + (\lambda + \mu) \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u_r}{\partial r \partial \theta} + (\lambda + 3\mu) \frac{1}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} = \mu (f_\theta^p + f_\theta^*) + \rho g \cos(\theta) \end{cases} \quad (2.20)$$

Où l'on a posé :

$$\begin{cases} f_r^*(r, \theta) = \frac{\lambda + 2\mu}{\alpha^2 \mu} \frac{\partial \varepsilon_{rr}^*}{\partial r} + \frac{\lambda}{\mu} \frac{\partial \varepsilon_{\theta\theta}^*}{\partial r} + 2 \left( \frac{\varepsilon_{rr}^* - \varepsilon_{\theta\theta}^*}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varepsilon_{r\theta}^*}{\partial \theta} \right) + \frac{\lambda + 2\mu}{\mu} \frac{(1 - \alpha^2)}{\alpha^2} \frac{\varepsilon_{rr}^*}{r} \\ f_\theta^*(r, \theta) = \frac{\lambda}{\mu r} \frac{\partial \varepsilon_{rr}^*}{\partial \theta} + \frac{\lambda + 2\mu}{\mu r} \frac{\partial \varepsilon_{\theta\theta}^*}{\partial \theta} + 2 \left( \frac{\partial \varepsilon_{r\theta}^*}{\partial r} + \frac{2\varepsilon_{r\theta}^*}{r} \right) \end{cases} \quad (2.21)$$

$$\begin{cases} f_r^p(r, \theta) = \frac{1}{r} \frac{\partial \gamma^p}{\partial \theta} \\ f_\theta^p(r, \theta) = \frac{\partial \gamma^p}{\partial r} + \frac{2\gamma^p}{r} \end{cases} \quad (2.22)$$

Là encore, la méthode de résolution est hybride entre des solutions analytiques et une optimisation énergétique. Le problème est non-linéaire dans la mesure où le champ de déformation irréversible de cisaillement  $\gamma^p$ , au second membre de l'équation de Navier, dépend lui-même de la solution en déplacement (on peut voir ce champ comme une déformation plastique de cisaillement). Les solutions analytiques reposent en général sur des développements en série nécessitant la linéarité des équations. La méthode utilisée revient donc à résoudre le problème analytiquement pour un champ de déformation de glissement imposé  $\gamma^p$  arbitraire. Ainsi, l'équation de Navier devient linéaire. Pour n'importe quel champ de glissement, on est capable de calculer les déplacements et contraintes solutions du problème mécanique associé (avec les déformations libres et la gravité). Le champ de glissement solution est ensuite déterminé par minimisation d'une énergie totale. En effet, les glissements permettent de relaxer les contraintes mécaniques et donc de diminuer l'énergie élastique stockée, cependant cela ne se fait pas sans un coût en terme de dissipation, car les glissements dissipent de l'énergie en fonction de la pression de contact et d'un coefficient de frottement. Il s'agit donc de minimiser une fonctionnelle d'énergie totale, qui prend pour argument le champ de glissement, composée de l'énergie élastique stockée moins le travail des forces extérieures plus l'énergie dissipée dans le glissement entre les spires. En pratique, on décompose le champ de glissement  $\gamma^p$  sur la base de fonctions utilisée dans la résolution analytique. On décrit donc ce champ par un certain nombre de coefficients notés  $\underline{P}^* \in \mathcal{P}$  où  $\mathcal{P}$  est l'ensemble des coefficients possibles. L'énergie élastique stockée  $E[\underline{P}^*]$ , le travail des efforts extérieurs  $W[\underline{P}^*]$  et l'énergie dissipée dans le glissement  $D[\underline{P}^*]$ , se lisent :

$$\left\{ \begin{array}{l} E[\underline{P}^*] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \underline{\sigma}[\underline{P}^*] : \underline{\varepsilon}[\underline{P}^*] d\Omega \\ W[\underline{P}^*] = \int_{\Omega} \underline{T} \cdot \underline{u}[\underline{P}^*] dS - \int_{\Omega} \rho g \underline{e}_y \cdot \underline{u}[\underline{P}^*] d\Omega \\ D[\underline{P}^*] = \int_{\Omega} \mu_C P_C |\gamma^p[\underline{P}^*]| d\Omega \end{array} \right. \quad (2.23)$$

Où  $\mu_C$  est un coefficient de friction, qui dépend de la rugosité et des conditions de lubrification, et  $P_C$  est la pression de contact. On détermine donc le glissement solution  $\gamma^p$  entièrement décrit par les coefficients  $\underline{P}$ , en résolvant le problème de minimisation suivant :

$$\underline{P} = \underset{\underline{P}^* \in \mathcal{P}}{\operatorname{argmin}} (E[\underline{P}^*] - W[\underline{P}^*] + D[\underline{P}^*]) \quad (2.24)$$

Comme les contributions sont analytiques, on peut calculer le gradient de la fonctionnelle analytiquement sans avoir besoin de formuler un état adjoint. En pratique, cette minimisation se fait assez rapidement grâce à un algorithme quasi-Newtonien. Le modèle proposé donne des résultats (cf. figure 2.12) très proches des effondrements observés (cf. figure 2.10) et semble donc capter l'essentiel pour comprendre ce phénomène, même si les détails de certains déspirages ne sont pas accessibles avec cette approche homogénéisée. Une analyse sur plusieurs conditions d'essais montre que les transitions de phase ne sont pas directement responsables des glissements observés conduisant à l'effondrement des bobines, comme on le pensait initialement. Il semble que le mécanisme majeur soit une diminution des pressions de contact au cours du refroidissement conduisant à un faible coût dissipatif. Cela crée une condition très favorable au glissement entre les spires dans la mesure où le prix énergétique à payer pour glisser est faible devant la relaxation élastique que constitue le glissement. Le rôle des transitions de phase dans ce mécanisme est donc d'être responsables d'une diminution des pressions de contact favorisant l'effondrement des bobines.

L'hybridation entre des solutions analytiques et des méthodes énergétiques est prometteuse, non seulement car la fonctionnelle à minimiser provient d'une solution analytique peu coûteuse, mais aussi parce que les gradients peuvent être calculés efficacement et précisément, ce qui facilite la convergence des algorithmes d'optimisation. Par ailleurs, il est intéressant de noter que la non-linéarité des équations tient à ce qu'un terme dans l'équation au second membre (glissements entre les spires) dépend de la solution. J'ai pu montrer à travers cet exemple, qu'il peut être intéressant de reporter la non-linéarité dans une boucle d'optimisation après avoir résolu les équations de manière parfaitement linéaire en supposant que ce terme est arbitraire. La valeur solution de ce terme au second membre étant déterminée par minimisation énergétique, l'ensemble de la non-linéarité est reportée dans ce problème de minimisation.

Sur le plan applicatif, ce travail a un fort potentiel dans la mesure où des nuances récentes ont tendance à produire des effondrements de bobine, ce qui les rend inexploitable et extrêmement difficile à manipuler

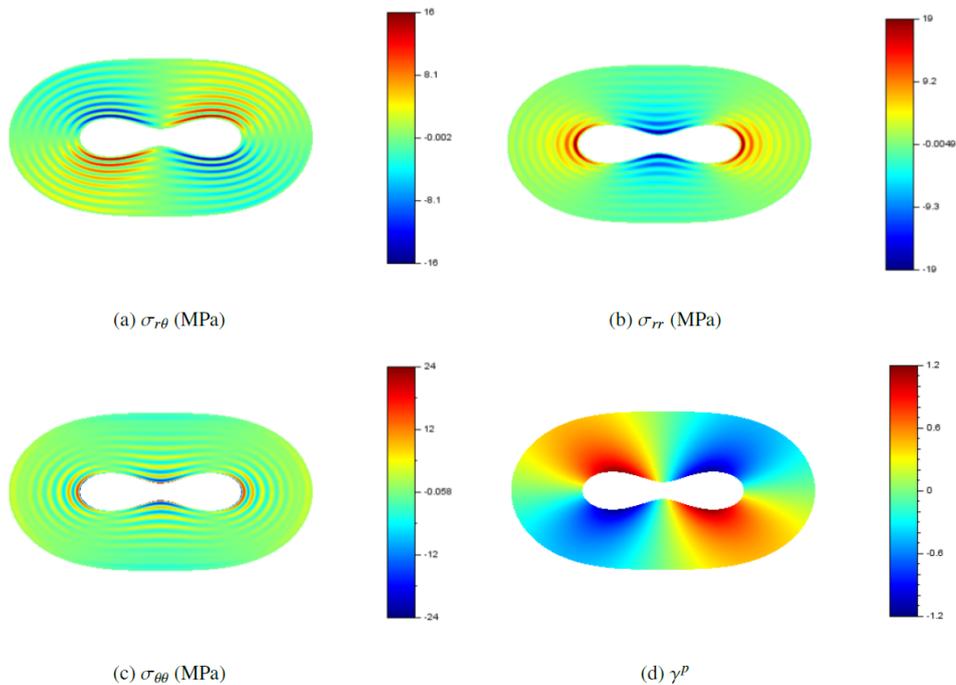


FIGURE 2.12 – Contraintes et déformation de glissement dans une bobine effondrée.

car on ne peut plus insérer de mandrin au centre. Le développement métallurgique de ces nuances nouvelles, comme certains aciers à très haute limite d'élasticité, est fortement limité par ces difficultés de mise en forme, ce qui prive les ingénieurs de matériaux intéressants pour l'allègement des structures par exemple. Le modèle que j'ai proposé permet de simuler rapidement les conditions dans lesquelles il faut bobiner ces alliages pour éviter l'effondrement des bobines, ce qui contribue à l'essor de ces nuances intéressantes.

## 2.4 Fabrication additive

En 2018 le LMS a eu l'opportunité de s'équiper d'une machine Beam<sup>TM</sup> de fabrication additive métallique. Parmi les différentes technologies, nous avons opté pour un procédé de dépôt de matière sous énergie concentrée (*directed energy deposition* (DED)). Les enjeux autour de ce type de procédés sont considérables. En effet, ces procédés ont un fort potentiel applicatif et malgré un très fort intérêt des chercheurs pour améliorer et mieux maîtriser ces procédés, il reste des difficultés pour contrôler la microstructure et les contraintes résiduelles. Je me suis donc attaché à simuler le procédé DED et ces travaux s'adaptent aussi pour d'autres technologies telles que les procédés par soudure par arc électrique (*wire arc additive manufacturing* (WAAM)). Par ailleurs, des mesures in-situ de cinétique thermique par pyrométrie laser (réalisées par Sylvain Durbecq, qui était ingénieur au LMS) ont permis de valider les approches développées. Plus récemment, nous disposons également de mesures in-situ de champ de température et de déplacement réalisés par Pierre Margerit dans le cadre de son post-doctorat que j'ai co-encadré avec Andrei Constantinescu (LMS, École Polytechnique).

### 2.4.1 Thermique du procédé DED

*Cette section est liée à [55–57].*

Concernant la simulation des procédés de fabrication additive, l'approche la plus courante est de construire des simulations très locales et détaillées à l'échelle mésoscopique [86–97] (incluant la dispersion de la poudre la fusion de cette dernière, les aspects hydrodynamiques dans le bain de fusion, la cristallisation du liquide et l'évolution de la microstructure). Ces approches fournissent une information très riche permettant entre autre de quantifier précisément les gradients thermiques dans le bain de fusion, la solidification et l'évolution de la microstructure, ainsi que les contraintes résiduelles. La principale limitation de ces approches est

leur coût calculatoire très important. En effet, ce dernier est si élevé qu'il n'est souvent possible de simuler qu'un unique cordon sur quelques centimètres. Ce poids calculatoire proscrit les études paramétriques, permettant de lier les paramètres du procédé et les microstructures finales, ainsi que les contraintes résiduelles sur l'ensemble de la pièce fabriquée. Pourtant, un nombre significatif d'études s'appliquent à lier les paramètres du procédé et les contraintes résiduelles [98–103], mais sans explorer significativement l'espace possible des paramètres machine. J'ai donc développé des approches simplifiées rapides, qui permettent de tenir compte de l'effet de la plupart des paramètres du procédé avec des coûts calculatoires qui autorisent les études paramétriques ou les optimisations numériques. Il est clair dans ce type de procédé que les aspects thermiques conditionnent tous les autres phénomènes qu'ils soient microstructuraux ou mécaniques. Je me suis donc attelé en premier lieu au développement d'un modèle de thermique rapide pour le procédé DED.

J'ai ainsi développé un modèle de thermique couplé avec des transitions de phases, qui agissent comme un terme source dans l'équation de la chaleur. On considère en premier lieu la solidification (liquide/solide) mais également des transitions de phase solide/solide si l'on a un acier multiphasique (austénite, ferrite, perlite, bainite et martensite). Le modèle repose sur une approche assez similaire au problème de refroidissement de bobine (cf. section 2.3) avec des solutions analytiques de l'équation de la chaleur et des lois d'Avrami pour les transitions de phase. La non-linéarité est traitée comme précédemment, avec un algorithme qui alterne entre la résolution de l'équation de la chaleur avec un terme source connu, puis le calcul des transitions de phase grâce aux températures obtenues, puis en interpolant les champs de phase obtenus pour les réinjecter dans le second membre de l'équation de la chaleur pour réévaluer la température. En pratique quelques itérations de cet algorithme alterné suffisent.

Ce modèle de thermique et de changement de phase est adapté aux structures à parois minces de type mono-cordon. On peut l'adapter pour des structures multi-cordons mais cela nécessite des développements supplémentaires. Pour ces structures particulières, le modèle que j'ai proposé repose principalement sur l'hypothèse que les flux de chaleurs sont majoritairement orientés dans la direction verticale et que l'on peut négliger les flux horizontaux. Cette hypothèse est peu crédible dans la zone du bain de fusion, mais s'avère pertinente pour le reste de la structure (cf. figure 2.13). On obtient donc un modèle bidimensionnel (dans le plan composé de la direction verticale et de la direction de l'épaisseur du cordon). Bien sûr cette hypothèse crée un biais dans l'estimation des gradients thermiques notamment dans la zone du bain de fusion, mais la comparaison avec des mesures montre qu'on saisit l'essentiel du phénomène. Par ailleurs, on peut tout de même évaluer des gradients de température avec une composante horizontale *a posteriori* du calcul sur l'ensemble de la pièce en cours de fabrication.

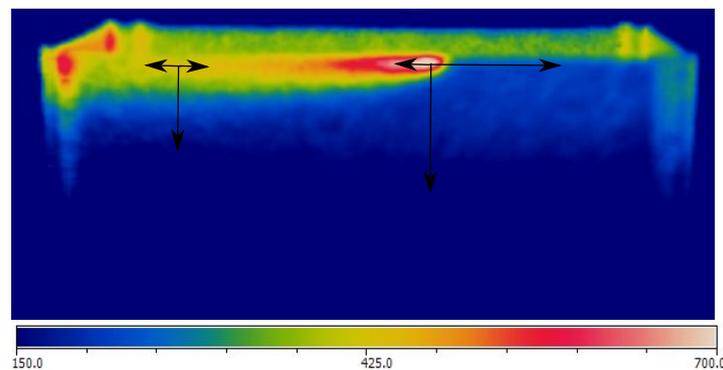


FIGURE 2.13 – Vue infrarouge des températures en degrés Celsius pour justifier la pertinence de négliger les flux horizontaux (désignés qualitativement par des flèches).

On considère une géométrie constituée d'une courbe  $\chi$  dans le plan, qui est ensuite extrudée dans la direction verticale (cf. figure 2.14a). Le modèle prend en compte la chaleur apportée par le laser, la chaleur extraite par le gaz qui transporte la poudre métallique, et bien sûr le flux de chaleur vers le substrat et la platine sur laquelle ce dernier est fixé (cf. figure 2.14a). L'hypothèse consistant à négliger les flux de chaleur dans l'axe horizontal nous permet de discrétiser la courbe  $\chi$  en différents points de calcul indépendants les uns des autres. Pour chaque point de calcul on est ramené à résoudre un problème de multicouches dans un repère en coordonnées cylindriques  $(r, z)$  pour tenir compte du rayon de courbure local au niveau du point



Où l'exposant  $(i)$  indique la  $i$ -ème couche (avec  $1 \leq i \leq n$ ),  $T^{(i)}$  est la température,  $D^{(i)}$  la diffusivité thermique,  $\lambda^{(i)}$  la conductivité thermique, et où :

$$Q^{(i)}(t) = \sum_{\phi=1}^{N_{\phi}} \Delta H_{\phi} \dot{X}_{\phi}^{(i)} - \frac{2\sigma\epsilon}{h_r} \left( [T^{(i)}]^4 - T_{\text{ext}}^4 \right) + Q_{\text{beam}}^{(i)}(t) - Q_{\text{gas}}^{(i)}(t) \quad (2.26)$$

Où  $\dot{X}_{\phi}^{(i)}$  sont les taux de proportion de phase,  $\Delta H_{\phi}$  le saut d'enthalpie de changement de phase,  $\sigma$  la constante de Boltzmann,  $\epsilon$  l'émissivité intervenant dans le terme radiatif, et  $Q_{\text{beam}}^{(i)}$  est la chaleur par unité de volume apportée par le laser. En utilisant un modèle de laser Gaussien on obtient :

$$Q_{\text{beam}}^{(i)}(t) = \begin{cases} \frac{2\eta_{\text{beam}} P_{\text{beam}}}{\pi h_z R_{\text{beam}}^2} \exp\left(-2V_{\text{beam}}^2 \frac{(t-t_n)^2}{R_{\text{beam}}^2}\right) & i = n-1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.27)$$

Où  $P_{\text{beam}}$  est la puissance du laser,  $V_{\text{beam}}$  est la vitesse du laser et  $R_{\text{beam}}$  est le rayon du spot. Par ailleurs, la chaleur extraite par le flux de gaz transportant la poudre est notée  $Q_{\text{gas}}^{(i)}(t)$  et correspond à une condition de convection. On utilise une fonction Gaussienne similaire à (2.27) pour le coefficient de transfert thermique entre le gaz et le métal, d'où :

$$Q_{\text{gas}}^{(i)}(t) = 2 \frac{H_{\text{gas}}}{h_r} (T^{(i)} - T_{\text{ext}}) \exp\left(-2V_{\text{beam}}^2 \frac{(t-t_n)^2}{R_{\text{gas}}^2}\right) \quad (2.28)$$

Où  $H_{\text{gas}}$  est le maximum du coefficient de transfert thermique, et  $R_{\text{gas}}$  caractérise l'aire affectée par le flux de gaz.

Les conditions aux limites sont des conditions de convection sur les faces interne  $r = R_{\text{inf}}$  et externe  $r = R_{\text{sup}}$  du multicouche et sur la face supérieure  $z = Z^{(n)}$  et entre le multicouche et le substrat  $z = Z^{(0)}$ . On ajoute une condition de continuité des températures et des flux entre les couches. Ainsi les conditions aux limites, pour chaque point de calcul (même position sur la courbe  $\chi$ ), se lisent :

$$(a) : \begin{cases} \hat{\lambda} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r} = H(T^{(i)} - T_{\text{ext}}) & r = R_{\text{inf}} \quad (1 \leq i \leq n) \\ \hat{\lambda} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r} = -H(T^{(i)} - T_{\text{ext}}) & r = R_{\text{sup}} \quad (1 \leq i \leq n) \end{cases} \quad (2.29)$$

$$(b) : \begin{cases} \lambda^{(1)} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial z} = H_{\text{pla}}(T^{(1)} - T_{\text{pla},n}) & z = Z^{(0)} \\ \lambda^{(n)} \frac{\partial T^{(n)}}{\partial z} = -H(T^{(n)} - T_{\text{ext}}) & z = Z^{(n)} \end{cases}$$

$$(c) : \begin{cases} T^{(i)} = T^{(i+1)} & z = Z^{(i)} \quad (1 \leq i \leq n-1) \\ \lambda^{(i)} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial z} = \lambda^{(i+1)} \frac{\partial T^{(i+1)}}{\partial z} & z = Z^{(i)} \quad (1 \leq i \leq n-1) \end{cases}$$

Où  $H$  est le coefficient de transfert thermique entre le multicouche et l'extérieur, dont la température est  $T_{\text{ext}}$ . Pour faciliter la solution analytique on a remplacé, dans la condition de convection radiale (a), la conductivité thermique de chaque couche  $\lambda^{(i)}$  par une valeur moyenne notée  $\hat{\lambda}$ . Par ailleurs  $H_{\text{pla}}$  est le coefficient de transfert thermique entre le multicouche et le substrat, dont la température est constante pour chaque problème à  $n$  couches et notée  $T_{\text{pla},n}$ . Bien sûr cette température est mise à jour pour le problème suivant à  $n+1$  couches. En effet, un aspect important, pour que le modèle prédise correctement la cinétique thermique globale, est la montée en température du substrat et de la platine sur laquelle ce dernier est fixé. Pour cela, un modèle unidimensionnel très simple avec une résistance thermique entre chaque élément est introduit et intégré à la résolution globale. Cela permet de simuler des essais longs sans observer de dérive des températures calculées par rapport aux températures mesurées.

La solution analytique de ces problèmes successifs repose sur des développements en séries de Fourier-Bessel et l'inversion de matrices, qui permettent de déterminer les coefficients des séries, pour assurer les conditions aux limites, et de continuité de la température et du flux entre les différentes couches. La condition initiale fait intervenir des produits scalaires spécifiques pour lesquels les fonctions utilisées sont orthogonales. Par ailleurs, cette solution analytique s'appuie sur des caractéristiques thermiques constantes pour chaque couche pendant l'intervalle de temps qui sépare deux ajouts successifs de matière au même point

de calcul. Ces caractéristiques sont bien sûr mises à jour en fonction de la température à chaque ajout de matière.

Cette approche très simplifiée, notamment en réduisant la dimension du problème tridimensionnel à une succession de problèmes bidimensionnels, permet d'atteindre des temps de calcul relativement courts, de quelques minutes pour un point de calcul avec 200 couches environ. De plus, on peut prendre en compte facilement les temps de pause entre les couches, les différentes stratégies de trajet pour la source d'énergie (laser pour le DED ou arc électrique dans le cas du procédé WAAM), la chaleur extraite par le gaz qui transporte la poudre métallique, la puissance du laser, l'épaisseur du substrat etc. On peut également imaginer des systèmes de contrôle de la température du substrat pour mieux piloter les cycles thermiques dans la pièce et aboutir à une microstructure visée, notamment en évitant des refroidissements trop brutaux qui conduisent pour les aciers multiphasiques à ne produire que de la martensite. Cet outil permet donc des études paramétriques en vue d'une optimisation du procédé pour obtenir des cycles thermiques et des mixtures de phase ciblées.

Pour valider expérimentalement ce modèle de cinétique thermique pour le procédé DED, nous avons réalisé avec Sylvain Durbecq (ingénieur au LMS) des cylindres de différents diamètres en acier 316L. Cet alliage est majoritairement austénitique et nous n'avons donc pas pu tester la partie multiphasique du modèle, qui ne tient principalement qu'à caler des lois d'Avrami sur des courbes de dilatométrie pour la nuance souhaitée. La température en un point du cylindre est mesurée par pyrométrie laser monochromatique. Deux pyromètres différents ont été utilisés et l'émissivité de la surface a été calibrée indépendamment sur une pièce fabriquée dans les mêmes conditions et chauffées à différentes températures connues. La comparaison des cycles thermiques mesurés et simulés est présentée pour une condition expérimentale à la figure 2.16 pour le premier pyromètre et à la figure 2.17 pour le second pyromètre. La dynamique du second pyromètre étant meilleure, on peut observer à chaque passage de la buse le refroidissement associé au gaz qui transporte la poudre métallique. Pour toutes les conditions expérimentales testées, la cinétique cyclique aussi bien que la tendance globale (échauffement du substrat) sont plutôt bien captées par le modèle, ce qui permet d'en faire un outil satisfaisant pour des projets de recherche plus avancées sur la microstructure des pièces ou les contraintes résiduelles générées pendant la fabrication. Les sorties du modèle ne sont pas

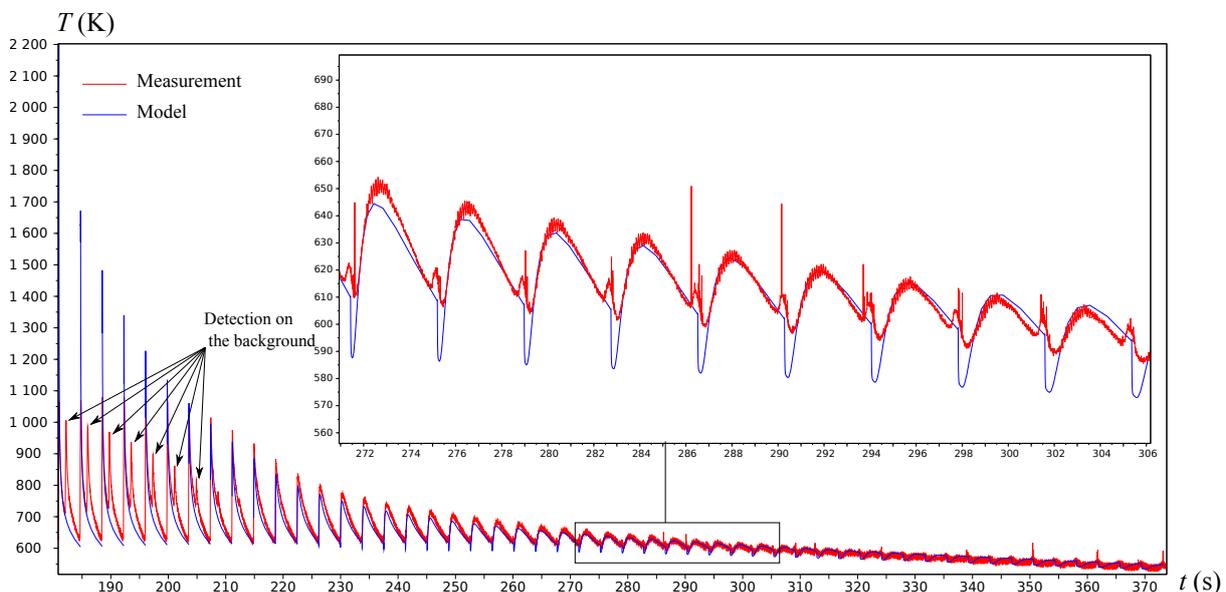


FIGURE 2.16 – Comparaison du modèle avec des mesures par pyrométrie (pyromètre 1).

limitées à l'histoire de la température en un point de la structure. Par exemple, la carte de température à différents instants pendant la fabrication est donnée pour une condition particulière à la figure 2.18 pour une géométrie cylindrique simple et à la figure 2.19 pour une géométrie plus complexe correspondant à une cellule élémentaire d'une structure avec un coefficient de Poisson négatif.

Par ailleurs, même si l'échelle du calcul permet de reconstruire les cartes de température dans toute la pièce, il est également possible d'extraire du calcul les cartes de température et des gradients à l'échelle du bain de fusion (cf. figure 2.20). La zone de solidification se situe entre les isothermes  $T_{sol}$  et  $T_{liq}$  où l'étude

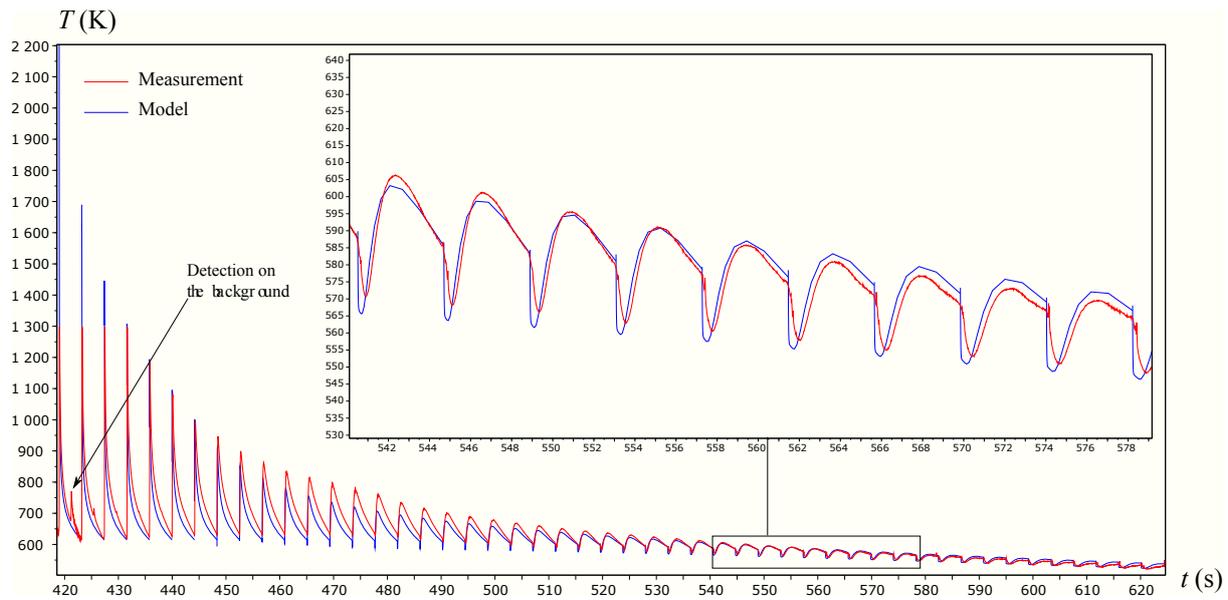


FIGURE 2.17 – Comparaison du modèle avec des mesures par pyrométrie (pyromètre 2).

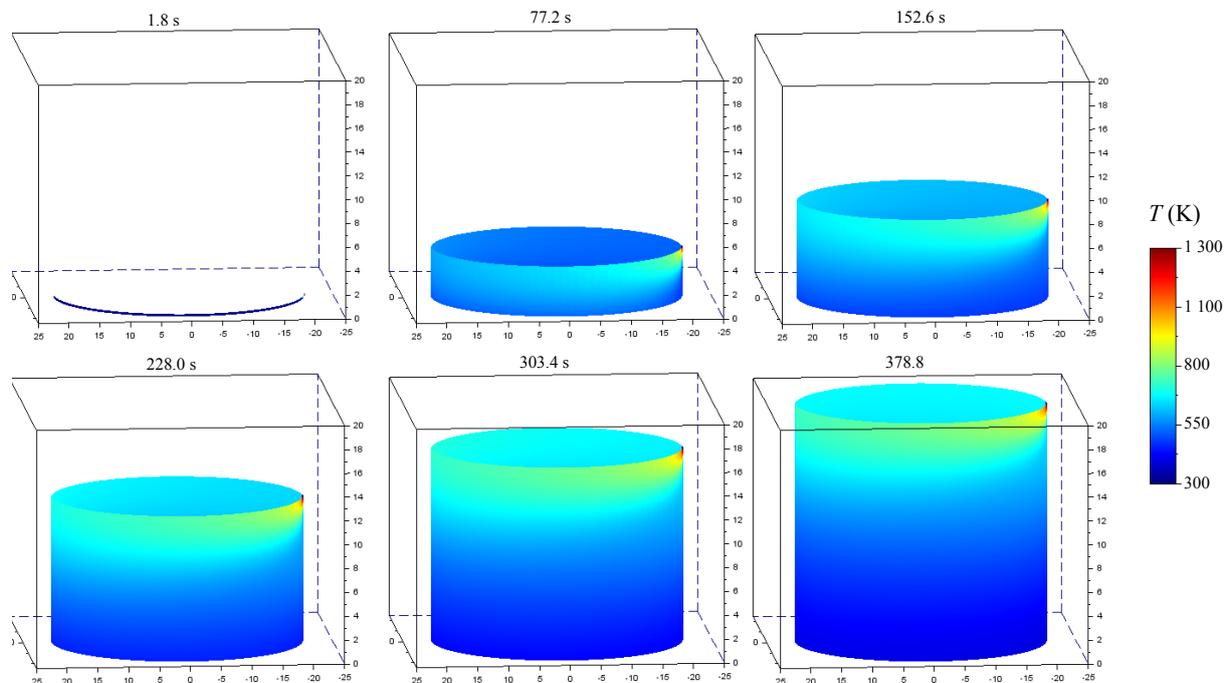


FIGURE 2.18 – Champ de température en fonction du temps pour une géométrie simple.

des gradients thermiques permet de prédire la structure cristalline.

Un aspect intéressant, qui n'a cependant pas fait l'objet d'une validation expérimentale, est la prédiction des mélanges de phase. Pour un acier multiphasique, les cinétiques de refroidissement sont telles que l'on produit exclusivement de la martensite (transitions de phase rapide qui apparaît lors des trempes car le carbone n'a pas le temps de diffuser). Cependant si l'on contrôle la température du substrat par un système de chauffage on peut stabiliser la structure suffisamment longtemps dans une gamme de température, qui permette la création d'une phase nécessitant que le carbone ait le temps de diffuser (par exemple la ferrite, la perlite ou la bainite). En contrôlant finement la température du substrat au cours du temps on peut viser une mixture de phases précise comme on le montre à la figure 2.21.

Ces travaux ouvrent des perspectives intéressantes pour un procédé nouveau comme la fabrication ad-

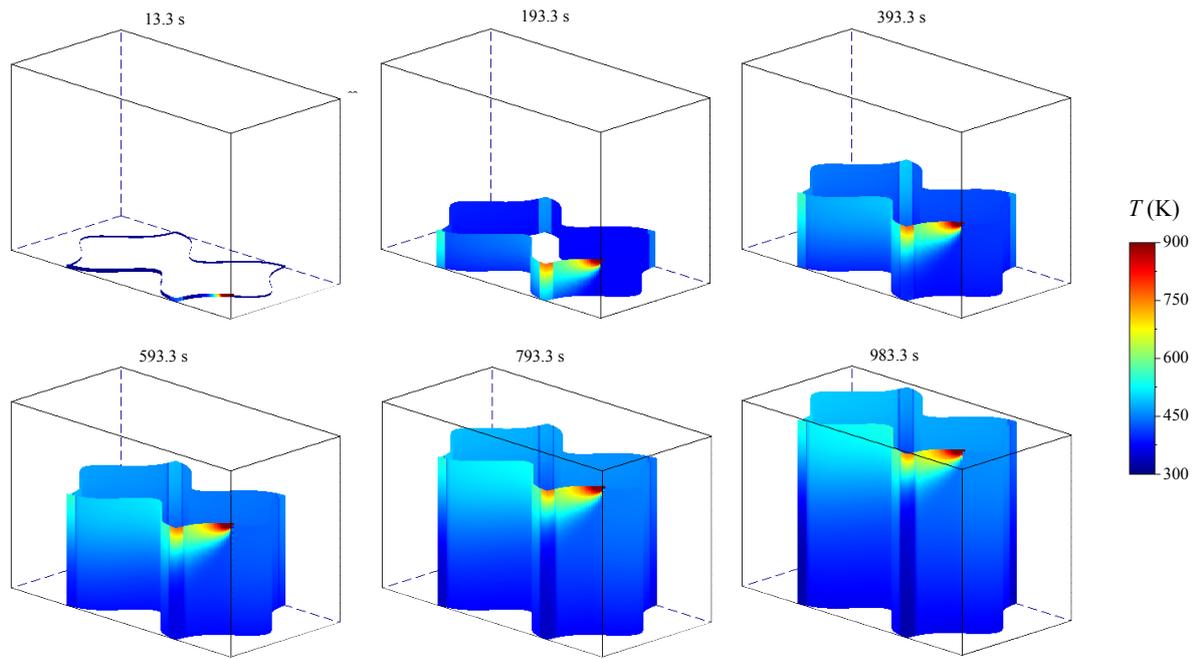


FIGURE 2.19 – Champ de température en fonction du temps pour une géométrie plus complexe.

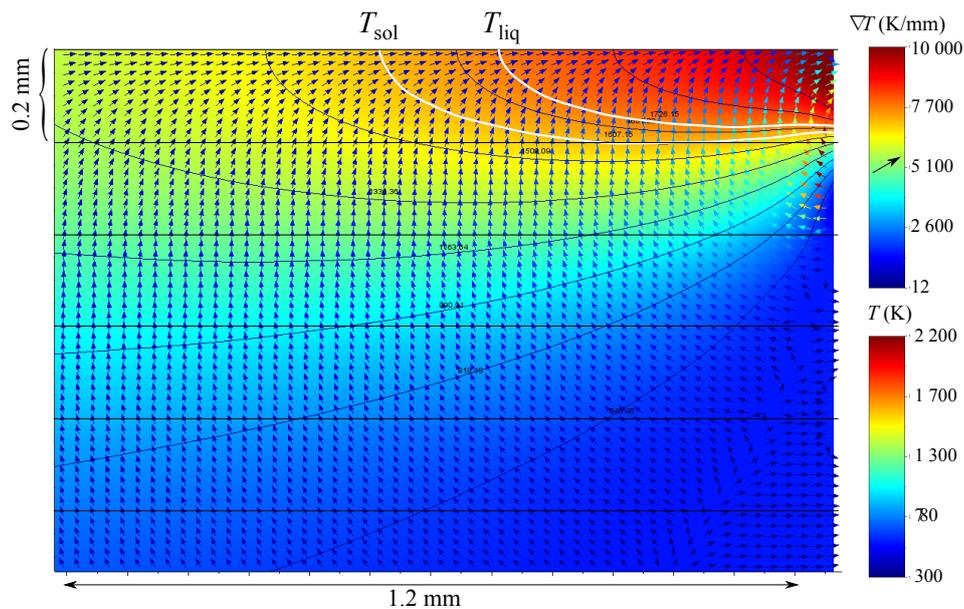


FIGURE 2.20 – Champ de température et gradients autour de la zone de fusion.

ditive DED, ayant un potentiel d'impact majeur sur la société. En effet, la simulation rapide de tels procédés est un enjeu significatif pour ces procédés, pour lesquels on subit plus qu'on ne contrôle tant les microstructures que la formation des contraintes résiduelles. Ces travaux ont donc pour principal intérêt de permettre des investigations sur le contrôle par optimisation des microstructures et des contraintes résiduelles qui se forment au cours du procédé. C'est d'ailleurs l'un des axes de recherche sur lequel je suis investi pour les années à venir. Sur le plan académique, ces travaux montrent ainsi que la tendance actuelle, consistant à proposer systématiquement des simulations extrêmement détaillées, nécessitant des puissances de calculs très importantes, n'est pas l'unique voie pour investiguer les phénomènes. Des approches d'avantage centrées sur la calculabilité à grande échelle, et non sur la représentativité quantitative aux fines échelles, permettent

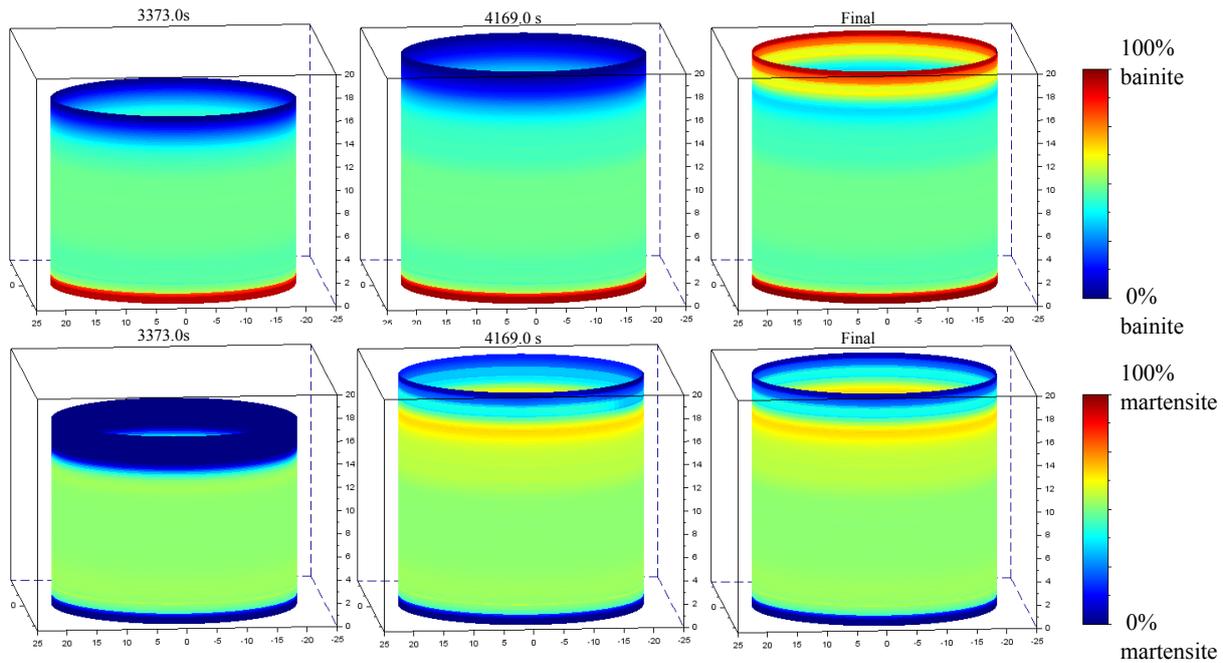


FIGURE 2.21 – Exemple d'évolution des champs de phase.

également de faire évoluer positivement les connaissances sur ces sujets.

## 2.4.2 Effet du procédé sur les caractéristiques à rupture

*Cette section est liée à [58].*

Un autre aspect important pour les procédés de fabrication additive est la caractérisation expérimentale des matériaux obtenus en fonction des paramètres du procédé. Je me suis associé à Pierre Margerit dans le cadre de son post-doctorat que j'ai co-encadré avec Andrei Constantinescu (LMS, École Polytechnique) et Krishnaswamy Ravi-Chandar (University of Texas at Austin). Le procédé DED, comme beaucoup d'autres technologies du même type, conduit à des pièces dont l'état de surface est marqué par des ondulations qui suivent l'accumulation des couches. Nous avons tenté de caractériser les propriétés à rupture de ce type de matériaux sans polissage des surfaces, dans différents sens de sollicitation et de comprendre les mécanismes locaux qui conduisent à la rupture.

Par exemple, des études ont montré que des aciers, comme le 316L par exemple, obtenus par fabrication additive sur lit de poudre (*selective laser melting* (SLM)) avaient une limite d'élasticité et une résistance ultime à la traction plus élevée que la même nuance obtenue par d'autres procédés, tandis que l'élongation à rupture et la ténacité étaient plus faibles [104]. Par ailleurs, les effets d'orientation de la sollicitation par rapport au sens des couches sur les propriétés en fatigue ont été étudiés [105]. On attribue très souvent à la microstructure très anisotrope, classiquement obtenue avec les procédés de fabrication additive, l'anisotropie apparente des éprouvettes [106]. Cependant, ces études s'appuient sur des échantillons polis, ce qui a pour effet de masquer les effets de variation d'épaisseur due à l'empilement des couches et l'effet important des particules non fondues qui agissent comme des défauts dispersés au sein de la surface de la structure. Ainsi, pour utiliser les structures directement en sortie de fabrication, sans procédé supplémentaire de polissage, on doit caractériser les matériaux non polis. Nous avons pu montrer que pour ce type d'éprouvettes non polies, les effets d'anisotropie apparente du comportement élasto-plastique peuvent s'expliquer par la variation d'épaisseur de l'éprouvette, et l'isotropie apparente des caractéristiques à rupture peut s'expliquer par la présence de ce réseau de particules non fondues à la surface des éprouvettes.

L'ensemble des aspects expérimentaux de ce travail a été réalisé par Pierre Margerit. Des éprouvettes de type *dog-bone* ont été extraites d'un tube pour caractériser le comportement élasto-plastique du matériau (cf. figure 2.22). On observe une anisotropie apparente sur les courbes macroscopiques de contrainte déformation. Cette anisotropie est souvent associée à l'anisotropie de la microstructure (cf. figure 2.23), cependant

j'ai pu montrer grâce à un modèle simple que le profil d'épaisseur variable (échantillons non polis) suffit à expliquer les différences observées dans les courbes de contrainte déformation entre les différentes orientations d'éprouvette. Il s'agirait donc d'avantage d'un effet de structure et non d'un effet purement matériau.

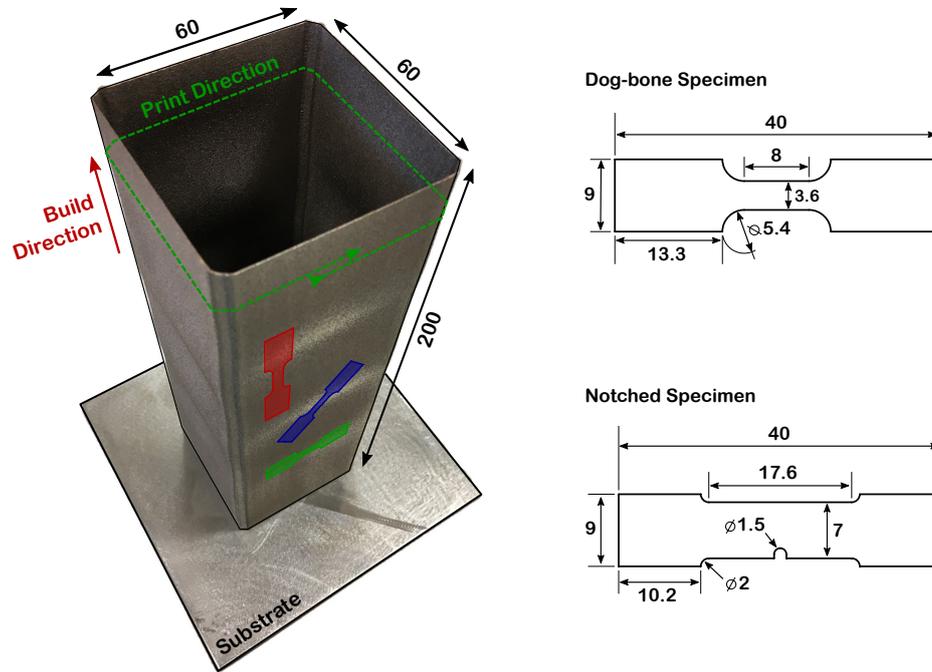


FIGURE 2.22 – Géométrie des spécimens et de la pièce dont ils sont extraits.

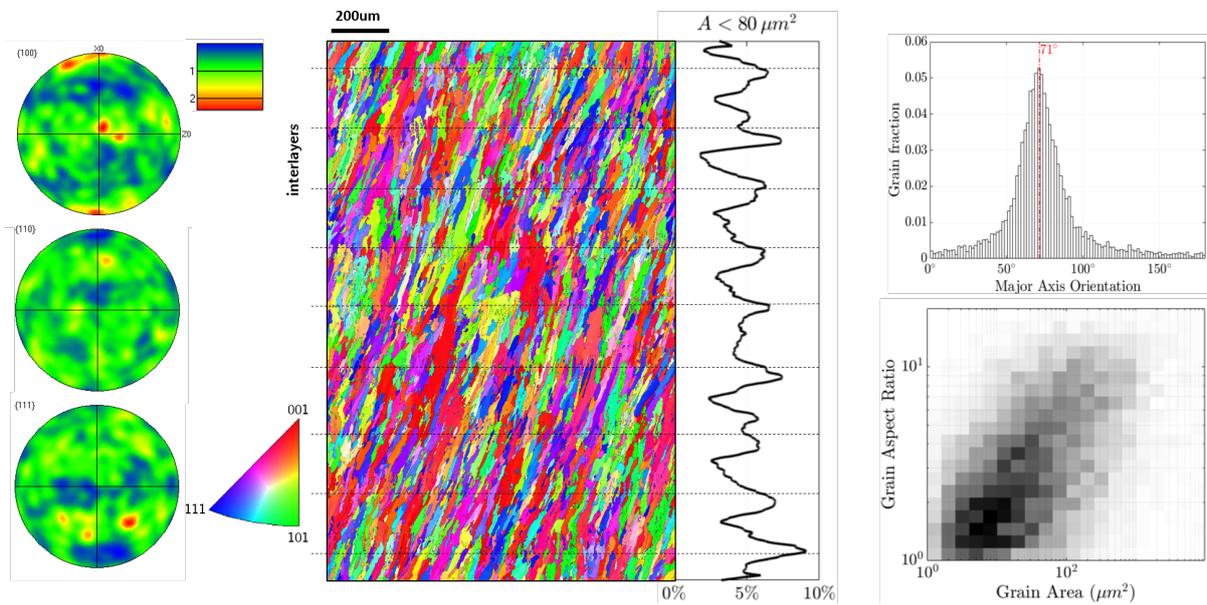


FIGURE 2.23 – Figure de pôle et figure de pôle inversée de la microstructure obtenue par fabrication additive (DED).

Par ailleurs, des éprouvettes avec un *notch* (cf. figure 2.22) ont été extraites dans différentes orientations pour caractériser les propriétés à rupture en mesurant le champ de déplacement sous microscope par corrélation digitale d'images (*digital image correlation* (DIC)). Je me suis attelé à régulariser le problème, pour

l'identification des déformations plastiques et élastiques, ainsi que des contraintes. En effet, on connaît le comportement grâce aux essais préalables, et un algorithme simple de prédicteur élastique correcteur plastique permet d'estimer la part des déformations attribuable à la plasticité et celle attribuable à l'élasticité, ce qui permet de calculer les contraintes. On utilise pour cela un comportement élasto-plastique de von Mises avec une hypothèse d'incompressibilité, car les variations de volume sont négligeables. Cette hypothèse d'incompressibilité conduit à un tenseur de contrainte, dont la partie isotrope (proportionnelle à l'identité) n'est pas déterminée par le comportement.

Les incertitudes de mesure condamnent cette méthode à violer l'équation d'équilibre en contrainte comme on le voit figure 2.24 à gauche. En effet, les lèvres de la fissure doivent être déchargées et il est clair que cela n'est pas vérifié. Il convient donc de régulariser le problème en cherchant un nouveau champ de déformation élastique noté  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$  (où  $C$  signifie corrigé), ce qui revient à calculer les contraintes  $\underline{\underline{\sigma}}^C$  grâce au comportement. La partie isotrope de ce tenseur de contrainte n'est pas déterminée par le comportement, du fait de l'hypothèse d'incompressibilité. Cependant, puisque les conditions aux limites sont libres à la frontière  $\partial\Omega$  du domaine noté  $\Omega$ , cette partie isotrope est nulle. Ainsi, l'hypothèse de contraintes planes se lit  $\underline{\underline{\sigma}}^C = 2\mu(\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \varepsilon_{33}^C \underline{\underline{1}})$  où  $\mu$  est le coefficient de cisaillement. Ce nouveau champ de déformation élastique  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$  doit être le plus proche possible du champ déjà estimé, noté  $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ , mais sous la contrainte que l'équation d'équilibre soit vérifiée et de l'hypothèse de contraintes planes. Le problème de minimisation est donc :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\varepsilon}}^C = \operatorname{argmin}_{\underline{\underline{\varepsilon}}^C} \left[ (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^e) : (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^e) \right] \\ \text{sous contrainte : } \operatorname{div} \left[ 2\mu (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \varepsilon_{33}^C \underline{\underline{1}}) \right] = 0 \end{cases} \quad (2.30)$$

On considère donc le Lagrangien suivant pour la minimisation :

$$\mathcal{L}(\underline{\underline{\varepsilon}}^C, \lambda) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^e) : (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \underline{\underline{\varepsilon}}^e) \, d\Omega + \int_{\Omega} \lambda \cdot \operatorname{div} (\underline{\underline{\varepsilon}}^C - \varepsilon_{33}^C \underline{\underline{1}}) \, d\Omega \quad (2.31)$$

Où  $\lambda(x)$  est le multiplicateur de Lagrange. La détermination de ce champ  $\lambda(x)$  permet d'identifier  $\underline{\underline{\varepsilon}}^C$  la solution du problème de minimisation (2.30). Des calculs analytiques permettent de poser le problème permettant d'identifier le multiplicateur de Lagrange  $\lambda(x)$  :

$$\begin{cases} x \in \Omega, & \Delta \lambda(x) + 3 \operatorname{div} (\nabla \lambda(x)) = -2 \operatorname{div} (\underline{\underline{\varepsilon}}^e(x) - \varepsilon_{33}^e(x) \underline{\underline{1}}) \\ x \in \partial\Omega, & \lambda(x) = 0 \end{cases} \quad (2.32)$$

Où le second membre de l'équation est connu car il s'agit de la première évaluation du tenseur de déformation élastique. On est donc conduit à la résolution d'un problème aux éléments finis pour identifier le multiplicateur de Lagrange, dont la formulation variationnelle se lit :

$$\forall \lambda^*, \int_{\Omega} \nabla \lambda^* : [\nabla \lambda + 3 \nabla \lambda^T] \, d\Omega = -2 \int_{\Omega} \nabla \lambda^* : (\underline{\underline{\varepsilon}}^e - \varepsilon_{33}^e \underline{\underline{1}}) \, d\Omega \quad (2.33)$$

On obtient finalement le multiplicateur de Lagrange (cf. figure 2.24 centre) et donc le champ de contrainte régularisé qui vérifie l'équilibre (cf. figure 2.24 droite) et on observe une surtension au niveau du trou (le *notch*), ce qui correspond à la solution classique d'une plaque trouée, alors que les lèvres de la fissure sont bien libres de contrainte.

Cet aspect de régularisation pourrait paraître anecdotique, mais il est en fait crucial pour estimer, à partir de ces mesures de champ, la zone d'élaboration dans laquelle les mécanismes dissipatifs ont lieu au cours de la fissuration (cf. figure 2.25). C'est grâce à la régularisation, que l'on peut quantifier correctement la *J-integral* [107] au moment de la rupture, ce qui permet de donner une première caractérisation des propriétés à rupture du matériau :

$$\mathcal{J} = \int_{\Gamma} \left[ \rho \Psi \underline{n} - \underline{T} \cdot \nabla u \right] \cdot \underline{e}_d \, d\Gamma \quad (2.34)$$

Où  $\Gamma$  est un contour fermé englobant la tête de fissure,  $\underline{e}_d$  est la direction de propagation de la fissure,  $\rho$  la masse volumique,  $\Psi$  l'énergie libre par unité de masse,  $\underline{n}$  la normale sortante unitaire au contour,  $\underline{T} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n}$

le vecteur contrainte, et  $u$  le déplacement. Cette intégrale de contour classique permet de quantifier le taux de relaxation d'énergie critique, qui est un critère énergétique (cf. figure 2.26) permettant de déterminer si une fissure se propage. On remarque que cette grandeur ne dépend pas significativement de l'orientation des éprouvettes. Cela s'explique par des essais sous microscope électronique à balayage, qui montrent qu'un réseau de particules non-fondues concentre les contraintes. Ces particules permettent donc, quelle que soit la direction de l'éprouvette, de propager la fissure le long des lignes de concentration de contraintes (cf. figure 2.27), d'où la relative anisotropie du taux de relaxation d'énergie critique.

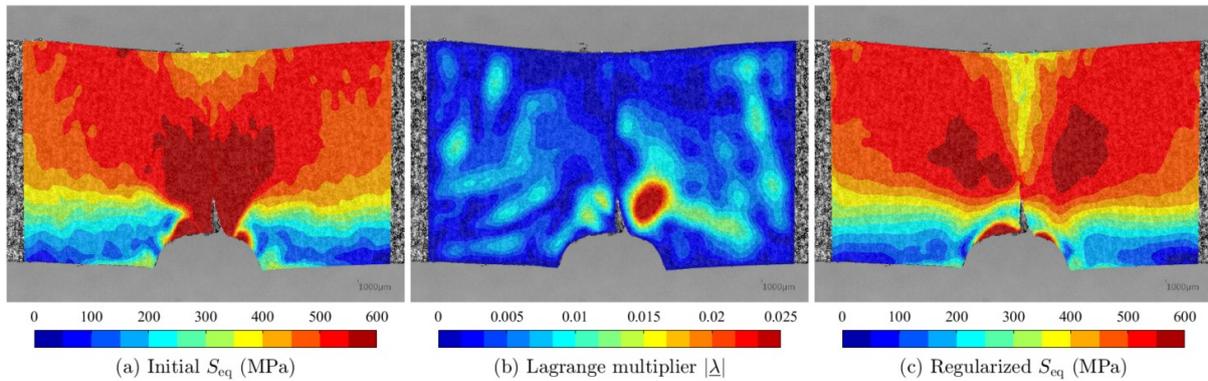


FIGURE 2.24 – Mesure des contraintes et régularisation pour vérifier l'équilibre et l'hypothèse de contraintes planes.

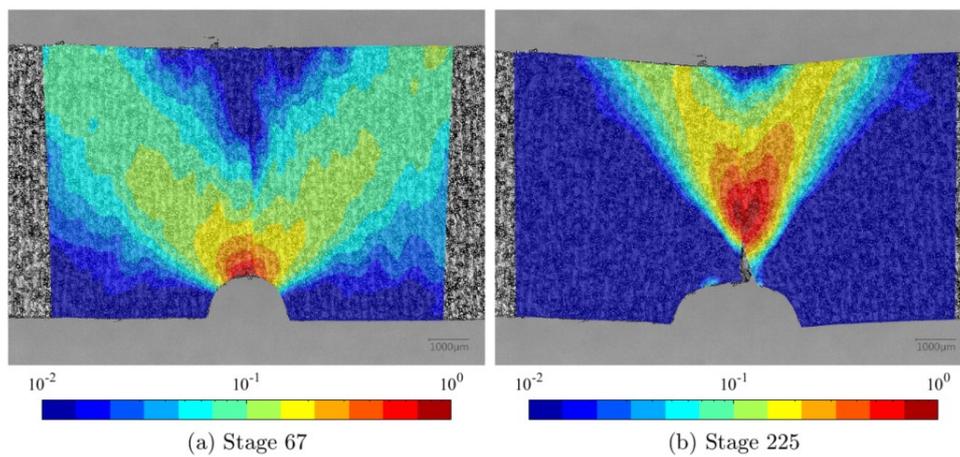


FIGURE 2.25 – Dissipation dans la zone de concentration de contraintes avant fissuration et dans la zone d'élaboration pendant la fissuration.

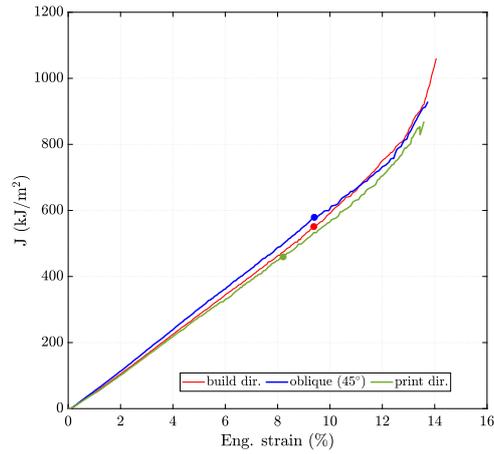


FIGURE 2.26 – J-integrals pour les différentes orientations. Les marqueurs symbolisent le début de la fissuration.

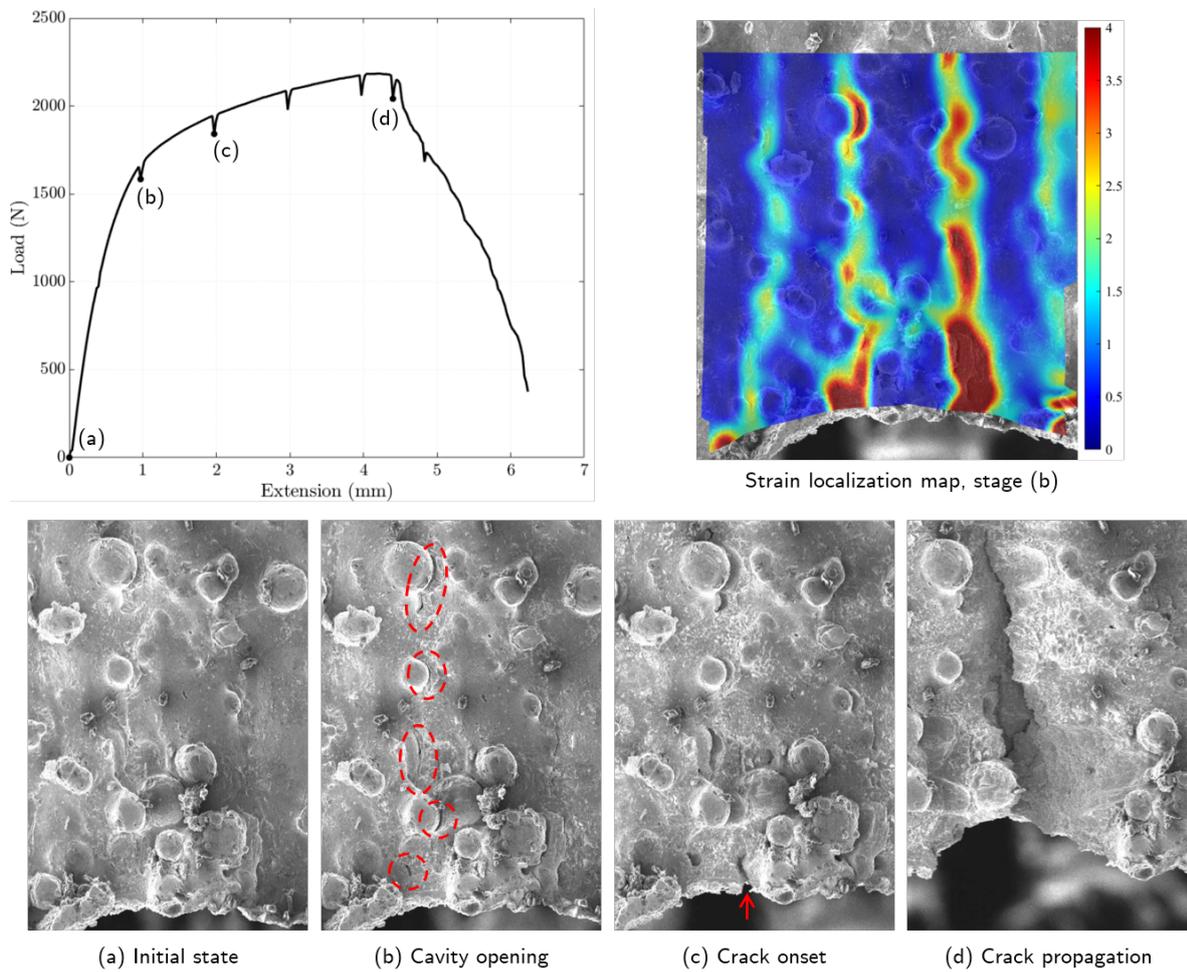


FIGURE 2.27 – Réseau de particules non-fondues et concentration de contraintes.

## Publications de l'axe 2

- [46] Daniel Weisz-Patrault and Thomas Koedinger. Residual stress on the run out table accounting for multiphase transitions and transformation induced plasticity. *Applied Mathematical Modelling*, 60 :18–33, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2018.02.026>.

- [47] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlicher, Nicolas Legrand, and Eliette Mathey. Non-linear numerical simulation of coiling by elastic finite strain model. In Key Engineering Materials, volume 651, pages 1060–1065. Trans Tech Publ, 2015. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.651-653.1060>.
- [48] Daniel **Weisz-Patrault** and Alain Ehrlicher. Curvature of an elasto-plastic strip at finite strains : application to fast simulation of coils. In Congrès Français de Mécanique, 2015.
- [49] Daniel **Weisz-Patrault**, Alain Ehrlicher, and Nicolas Legrand. Non-linear simulation of coiling accounting for roughness of contacts and multiplicative elastic-plastic behavior. International Journal of Solids and Structures, 94 :1–20, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.05.012>.
- [50] Daniel **Weisz-Patrault** and Alain Ehrlicher. Imposed curvature of an elastic-plastic strip : application to simulation of coils. Mechanics & Industry, 18(2) :218, 2017. <https://doi.org/10.1051/meca/2016038>.
- [51] Daniel **Weisz-Patrault**. Coupled heat conduction and multiphase change problem accounting for thermal contact resistance. International Journal of Heat and Mass Transfer, 104 :595–606, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.091>.
- [52] Daniel **Weisz-Patrault**. Energetic approach coupled with analytic solutions for the evaluation of residual stress. In Congrès Français de Mécanique, 2017.
- [53] Daniel **Weisz-Patrault**. Nonlinear and multiphysics evaluation of residual stresses in coils. Applied Mathematical Modelling, 61 :141–166, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2018.03.042>.
- [54] Daniel **Weisz-Patrault**, Maxime Gantier, and Alain Ehrlicher. Mixed analytic/energetic approach for a sliding orthotropic hollow cylinder. Application to coil sagging. International Journal of Solids and Structures, 165 :75–92, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.01.029>.
- [55] Daniel **Weisz-Patrault**. Fast simulation of temperature and phase transitions in directed energy deposition additive manufacturing. Additive Manufacturing, 31 :100990, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2019.100990>.
- [56] Daniel **Weisz-Patrault**. Residual strains in directed energy deposition additive manufacturing. In AIP Conference Proceedings, volume 2293, page 020007. AIP Publishing LLC, 2020. <https://doi.org/10.1063/5.0026504>.
- [57] Daniel **Weisz-Patrault**. Fast macroscopic thermal analysis for laser metal deposition. Application to multiphase steels. In Sim-AM 2019 : II International Conference on Simulation for Additive Manufacturing, pages 60–71. CIMNE, 2019.
- [58] Pierre Margerit, Daniel **Weisz-Patrault**, Krishnaswamy Ravi-Chandar, and Andrei Constantinescu. Ten-sile and ductile fracture properties of as-printed 316l stainless steel thin walls obtained by directed energy deposition. Additive Manufacturing, 37 :101664, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101664>.

## Références de l'axe 2

- [59] Xiaodong Wang, Quan Yang, and Anrui He. Calculation of thermal stress affecting strip flatness change during run-out table cooling in hot steel strip rolling. Journal of materials processing technology, 207 (1) :130–146, 2008.
- [60] Xiaodong Wang, Fei Li, Quan Yang, and Anrui He. Fem analysis for residual stress prediction in hot rolled steel strip during the run-out table cooling. Applied Mathematical Modelling, 37(1) :586–609, 2013.
- [61] Hoon-Hwe Cho, Yi-Gil Cho, Dong-Wan Kim, Se-Jong Kim, Won-Beom Lee, and Heung Nam Han. Finite element investigation for edge wave prediction in hot rolled steel during run out table cooling. ISIJ international, 54(7) :1646–1652, 2014.

- [62] Heung Nam Han, Jae Kon Lee, Hong Joon Kim, and Young-Sool Jin. A model for deformation, temperature and phase transformation behavior of steels on run-out table in hot strip mill. Journal of Materials Processing Technology, 128(1) :216–225, 2002.
- [63] Zhongqing Zhou, Peter F Thomson, YeeCheong Lam, and Daniel DW Yuen. Numerical analysis of residual stress in hot-rolled steel strip on the run-out table. Journal of Materials Processing Technology, 132(1) :184–197, 2003.
- [64] T Iung, M Kandel, D Quidort, and Y De Lassat. Physical modelling of phase transformations in high strength steels. Revue de Métallurgie–International Journal of Metallurgy, 100(2) :173–181, 2003.
- [65] A Perlade, D Grandemange, and T Iung. Application of microstructural modelling for quality control and process improvement in hot rolled steels. Ironmaking & steelmaking, 32(4) :299–302, 2005.
- [66] Didier Huin, Daniel Grandemange, Philippe Maugis, and Gwenola Herman. Microstructural modelling for nbti micro-alloying adjustment on hot rolled hsla steels. In International Conference on Thermomechanical Processing of Steels–TMP, pages 1–12, 2008.
- [67] CEA. Cast3m, 2011. Commissariat a l’Energie Atomique, <http://www-cast3m.cea.fr/>.
- [68] WJ Edwards and G Boulton. The mystery of coil winding. In 2001 Iron and Steel Exposition and AISE Annual Convention, pages 2001–2017, 2001.
- [69] RB Sims and JA Place. The stresses in the reels of cold reduction mills. British Journal of Applied Physics, 4(7) :213, 1953.
- [70] H Wilkening. Determination of the radial coiler loading during the coiling of strip. PhD thesis, Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen University, 1965.
- [71] Heinz C Altmann. Formulas for computing stresses in center-wound rolls. Tappi, 51(4) :176, 1968.
- [72] AW Wadsley and WJ Edwards. Coil winding stresses. J. Australas. Inst. Met., 22(1) :17–27, 1977.
- [73] JM Hudzia, F Ferrauto, and P Gevers. Stress calculation applied to a coil, and optimization of coiling tension. Cah. Inf. Tech. Rev. Metall., 91(6) :937–943, 1994.
- [74] DM Kedl. using a two dimensional winding model to predict wound roll stresses that occur due to circumferential steps in core diameter or to cross-web caliper variation. In Proceedings of the Second International Conference on Web Handling, pages 99–112, 1992.
- [75] Kilwa Ärölä and R von Herten. Two-dimensional axisymmetric winding model for finite deformation. Computational Mechanics, 40(6) :933–947, 2007.
- [76] Guy Kaza. Contribution à l’étude de la résistance thermique de contact et à sa modélisation à travers l’écrasement de l’interface tôle/outil dans la mise en forme à chaud de tôles d’acier. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2010.
- [77] F De Monte. Transient heat conduction in one-dimensional composite slab. a naturalanalytic approach. International Journal of Heat and Mass Transfer, 43(19) :3607–3619, 2000.
- [78] F De Monte. An analytic approach to the unsteady heat conduction processes in one-dimensional composite media. International Journal of Heat and Mass Transfer, 45(6) :1333–1343, 2002.
- [79] F De Monte. Unsteady heat conduction in two-dimensional two slab-shaped regions. exact closed-form solution and results. International journal of heat and mass transfer, 46(8) :1455–1469, 2003.
- [80] Suneet Singh, Prashant K Jain, et al. Analytical solution to transient heat conduction in polar coordinates with multiple layers in radial direction. International journal of thermal Sciences, 47(3) :261–273, 2008.
- [81] Prashant K Jain, Suneet Singh, et al. Analytical solution to transient asymmetric heat conduction in a multilayer annulus. Journal of Heat Transfer, 131(1) :011304, 2009.

- [82] Prashant K Jain, Suneet Singh, et al. An exact analytical solution for two-dimensional, unsteady, multilayer heat conduction in spherical coordinates. International Journal of Heat and Mass Transfer, 53 (9) :2133–2142, 2010.
- [83] M Necati Özışık. Boundary value problems of heat conduction. Dover, 1968. 3rd edition (2002).
- [84] WM Quach, JG Teng, and KF Chung. Residual stresses in steel sheets due to coiling and uncoiling : a closed-form analytical solution. Engineering structures, 26(9) :1249–1259, 2004.
- [85] WM Quach, JG Teng, and KF Chung. Residual stresses in press-braked stainless steel sections, ii : Press-braking operations. Journal of Constructional Steel Research, 65(8) :1816–1826, 2009.
- [86] Xiaoming Zhao, Jing Chen, Xin Lin, and Weidong Huang. Study on microstructure and mechanical properties of laser rapid forming inconel 718. Materials Science and Engineering : A, 478(1-2) :119–124, 2008.
- [87] V Manvatkar, A De, and Tarasankar DebRoy. Heat transfer and material flow during laser assisted multi-layer additive manufacturing. Journal of Applied Physics, 116(12) :124905, 2014.
- [88] William J Sames, FA List, Sreekanth Pannala, Ryan R Dehoff, and Sudarsanam Suresh Babu. The metallurgy and processing science of metal additive manufacturing. International Materials Reviews, 61 (5) :315–360, 2016.
- [89] Denis Carron, Philippe Le Masson, and Rémy Fabbro. 2d longitudinal modeling of heat transfer and fluid flow during multilayered direct laser metal deposition process. JOURNAL (OF LASER APPLICATIONS), 24(3), 2012.
- [90] Aref Yadollahi, Nima Shamsaei, Scott M Thompson, and Denver W Seely. Effects of process time interval and heat treatment on the mechanical and microstructural properties of direct laser deposited 316l stainless steel. Materials Science and Engineering : A, 644 :171–183, 2015.
- [91] V Manvatkar, A De, and Tarasankar DebRoy. Spatial variation of melt pool geometry, peak temperature and solidification parameters during laser assisted additive manufacturing process. Materials Science and Technology, 31(8) :924–930, 2015.
- [92] Mustafa Megahed, Hans-Wilfried Mindt, Narcisse NDri, Hongzhi Duan, and Olivier Desmaison. Metal additive-manufacturing process and residual stress modeling. Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 5(1) :61–93, 2016.
- [93] Erdem Kundakcioglu, Ismail Lazoglu, and Suraj Rawal. Transient thermal modeling of laser-based additive manufacturing for 3d freeform structures. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 85(1-4) :493–501, 2016.
- [94] Yanping Lian, Stephen Lin, Wentao Yan, Wing Kam Liu, and Gregory J Wagner. A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing. Computational Mechanics, 61(5) :543–558, 2018.
- [95] HL Wei, GL Knapp, T Mukherjee, and Tarasankar DebRoy. Three-dimensional grain growth during multi-layer printing of a nickel-based alloy inconel 718. Additive Manufacturing, 25 :448–459, 2019.
- [96] Chamara Kumara, Andreas Segerstark, Fabian Hanning, Nikhil Dixit, Shrikant Joshi, Johan Moverare, and Per Nylén. Microstructure modelling of laser metal powder directed energy deposition of alloy 718. Additive Manufacturing, 25 :357–364, 2019.
- [97] Wentao Yan, Stephen Lin, Orion L Kafka, Yanping Lian, Cheng Yu, Zeliang Liu, Jinhui Yan, Sarah Wolff, Hao Wu, Ebot Ndip-Agbor, et al. Data-driven multi-scale multi-physics models to derive process-structure-property relationships for additive manufacturing. Computational Mechanics, 61(5) :521–541, 2018.
- [98] Erik R Denlinger, Jarred C Heigel, Pan Michaleris, and TA Palmer. Effect of inter-layer dwell time on distortion and residual stress in additive manufacturing of titanium and nickel alloys. Journal of Materials Processing Technology, 215 :123–131, 2015.

- [99] Erik R Denlinger and Pan Michaleris. Effect of stress relaxation on distortion in additive manufacturing process modeling. Additive Manufacturing, 12 :51–59, 2016.
- [100] Zhuqing Wang, Todd A Palmer, and Allison M Beese. Effect of processing parameters on microstructure and tensile properties of austenitic stainless steel 304l made by directed energy deposition additive manufacturing. Acta Materialia, 110 :226–235, 2016.
- [101] Blanka A Szost, Sofiane Terzi, Filomeno Martina, Didier Boisselier, Anastasiia Prytuliak, Thilo Pirling, Michael Hofmann, and David J Jarvis. A comparative study of additive manufacturing techniques : Residual stress and microstructural analysis of clad and waam printed ti-6al-4v components. Materials & Design, 89 :559–567, 2016.
- [102] M Biegler, B Graf, and Michael Rethmeier. In-situ distortions in lmd additive manufacturing walls can be measured with digital image correlation and predicted using numerical simulations. Additive Manufacturing, 20 :101–110, 2018.
- [103] Xufei Lu, Xin Lin, Michele Chiumenti, Miguel Cervera, Yunlong Hu, Xianglin Ji, Liang Ma, Haiou Yang, and Weidong Huang. Residual stress and distortion of rectangular and s-shaped ti-6al-4v parts by directed energy deposition : modelling and experimental calibration. Additive Manufacturing, 26 : 166–179, 2019.
- [104] Jyoti Suryawanshi, K. G. Prashanth, and U. Ramamurty. Mechanical behavior of selective laser melted 316L stainless steel. Materials Science and Engineering A, 696 :113–121, jun 2017.
- [105] Rakish Shrestha, Jutima Simsiriwong, and Nima Shamsaei. Fatigue behavior of additive manufactured 316L stainless steel parts : Effects of layer orientation and surface roughness. Additive Manufacturing, 28 :23–38, aug 2019.
- [106] Y. Kok, X.P. Tan, P. Wang, M.L.S. Nai, N.H. Loh, E. Liu, and S.B. Tor. Anisotropy and heterogeneity of microstructure and mechanical properties in metal additive manufacturing : A critical review. Materials & Design, 139 :565–586, feb 2018.
- [107] James R Rice. Mathematical analysis in the mechanics of fracture. Fracture : an advanced treatise, 2 : 191–311, 1968.



## Axe 3

# Modèles macroscopiques à mésostructure

### Contents

---

<b>3.1 Introduction</b> . . . . .	<b>48</b>
<b>3.2 Inclusion glissante pour la nucléation de phase</b> . . . . .	<b>48</b>
<b>3.3 Plasticité de transformation</b> . . . . .	<b>50</b>
<b>3.4 Modèle multiéchelle de croissance de grain</b> . . . . .	<b>54</b>
3.4.1 Modèle rapide de croissance de grain mésoscopique . . . . .	55
3.4.2 Modèle stochastique macroscopique de croissance de grain . . . . .	61
3.4.3 Application à la fabrication additive . . . . .	65

---

### 3.1 Introduction

Le souci de proposer des calculs relativement rapides à l'échelle d'une structure macroscopique complexe, alors même que des phénomènes à l'échelle atomique et polycristalline sont à l'oeuvre, m'a conduit à considérer des développements théoriques, permettant de conserver, à l'échelle macroscopique et de manière économique, des informations issues des échelles inférieures.

J'ai principalement initié ces recherches par une étude simplifiée sur la nucléation de phase, et sur les transitions de phase et leurs effets sur la plasticité à l'échelle macroscopique avec les phénomènes de plasticité de transformation. Je me suis par ailleurs investi dans le développement d'un modèle de croissance de grain macroscopique stochastique qui permet de quantifier différentes statistiques de la structure polycristalline de manière très économe, et qui peut donc être utilisé dans un calcul de structure à grande échelle.

### 3.2 Inclusion glissante pour la nucléation de phase

*Cette section est liée à [108].*

Cette étude a été menée dans le cadre du stage de master 2 de Joffrey Bluthé, que j'ai co-encadré avec Alain Ehlacher (Laboratoire Navier, École des Ponts ParisTech). L'idée principale était de revisiter, dans un cadre énergétique, des résultats anciens portant sur les inclusions d'Eshelby [118, 119] et la possibilité de glissement d'une inclusion dans une matrice [120–123]. Ce problème avait pour but de quantifier les dissipations par glissement de l'inclusion dans un contexte de nucléation de phase, les inclusions d'Eshelby ayant été largement exploitées pour les problèmes de transition de phase [124–127].

L'approche que nous avons développée se distingue par le fait qu'il n'y a pas d'hypothèse sur les efforts de cisaillement à l'interface inclusion/matrice, et pas de relation a priori entre la discontinuité de déplacements tangentiels et les efforts normaux. On traite un problème plan d'inclusion circulaire dans une matrice infinie sans chargement mécanique appliqué. L'inclusion est soumise à une déformation libre homogène, qui représente typiquement une transformation de phase avec un déviateur important. On note ce tenseur  $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \varepsilon_{xx}\underline{e}_x \otimes \underline{e}_x + \varepsilon_{yy}\underline{e}_y \otimes \underline{e}_y$ , où le repère Cartésien coïncide avec les directions principales de la déformation libre. De plus, on considère un glissement arbitraire noté  $g(\theta)$  à l'interface entre l'inclusion et la matrice, où  $(r, \theta)$  sont les coordonnées polaires pour l'inclusion. La solution dépend donc explicitement de ce glissement imposé  $g(\theta)$ . On vérifie la continuité du vecteur contrainte et du déplacement normal à l'interface, mais bien entendu, le glissement se traduit par une discontinuité du déplacement tangentiel. Ce glissement imposé est arbitraire à ce stade, on le détermine en dernier lieu par optimisation énergétique. En effet, des observations montrent que l'on peut assimiler les glissements à de la plasticité localisée à l'interface [120]. Ainsi, l'énergie dissipée dans le glissement peut être estimée par des mécanismes plastiques en introduisant une limite d'élasticité de glissement. On minimise donc, pour déterminer les glissements solutions du problème, l'énergie potentielle (c'est-à-dire l'énergie élastique stockée dans la structure à laquelle on retranche le potentiel des efforts extérieurs) et le coût énergétique en terme de dissipation pour opérer un glissement [128, 129]. Le glissement solution du problème noté  $\theta \mapsto g^S(\theta)$  se lit donc :

$$g^S(\theta) = \underset{g(\theta)}{\operatorname{argmin}} E[g(\theta)] - W[g(\theta)] + D[g(\theta)] \quad (3.1)$$

Où  $E[g(\theta)]$  est l'énergie élastique stockée par unité de profondeur,  $W[g(\theta)]$  le potentiel des efforts extérieurs (nul dans ce cas, car il n'y a pas de chargement mécanique à l'infini), et  $D[g(\theta)]$  est l'énergie dissipée par unité de profondeur dans un glissement  $g(\theta)$ . L'énergie élastique dans toute la structure s'écrit :

$$E[g(\theta)] = \frac{1}{2} \int_{\Omega_I} \underline{\underline{\sigma}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^I d\Omega_I + \frac{1}{2} \int_{\Omega_M} \underline{\underline{\sigma}}^M : \underline{\underline{\varepsilon}}^M d\Omega_M \quad (3.2)$$

Où  $\Omega_I, \Omega_M$  sont les domaines occupés par l'inclusion et la matrice respectivement,  $\underline{\underline{\sigma}}^I, \underline{\underline{\sigma}}^M$  sont les contraintes de Cauchy et  $\underline{\underline{\varepsilon}}^I, \underline{\underline{\varepsilon}}^M$  les déformations dans chacun des deux domaines. Cela se réécrit grâce au principe des puissances virtuelles comme une intégrale sur l'interface entre l'inclusion et la matrice uniquement :

$$E[g(\theta)] = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \left( (\underline{\underline{\sigma}}^I \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u}^I - (\underline{\underline{\sigma}}^M \cdot \underline{n}) \cdot \underline{u}^M \right) d\Gamma \quad (3.3)$$

Où  $\Gamma = \partial\Omega_I$  est l'interface,  $\underline{u}^I, \underline{u}^M$  sont les déplacements dans l'inclusion et la matrice respectivement, et  $\underline{n}$  le vecteur normal à l'interface sortant vers l'extérieur de l'inclusion. Par ailleurs, on peut écrire l'énergie dissipée par unité de profondeur dans un glissement  $g(\theta)$  comme suit :

$$D[g(\theta)] = R^2 S_y \int_0^{2\pi} |g(\theta)| d\theta \quad (3.4)$$

Où  $R$  est le rayon de l'inclusion et  $S_y$  est une contrainte de limite d'élasticité en cisaillement. Cette approche énergétique est similaire dans son principe à celle développée pour le problème d'affaissement de bobine (cf. section 2.3.4).

Du point de vue technique, on résout le problème d'inclusion et de la matrice avec glissement imposé, grâce au formalisme dans le corps des complexes proposé par Muskhelishvili [130]. Comme on l'a vu, on détermine ensuite le glissement par optimisation numérique. On a vérifié notre solution analytique en comparant à un calcul aux éléments finis pour une situation simple où le glissement ne dissipe pas d'énergie, c'est-à-dire que la limite d'élasticité de glissement est fixée à zéro (cf. figure 3.1).

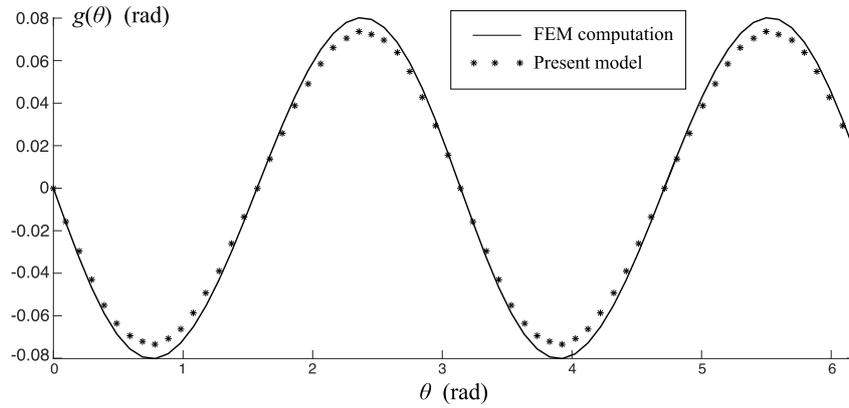


FIGURE 3.1 – Comparaison du glissement sans dissipation obtenu par simulation aux éléments finis et le modèle analytique.

En fixant une valeur non nulle pour la limite d'élasticité de glissement, nous avons imposé une déformation libre de type Bain, c'est-à-dire qu'on a considéré la partie déviatorique d'une déformation imposée diagonale. Un facteur d'amplification est appliqué pour estimer l'effet de l'intensité de la déformation libre sur les glissements de l'inclusion. Les résultats montrent que les contraintes de cisaillement sont bien saturées par la limite d'élasticité lors du glissement et sont plus faibles lorsque le glissement ne se produit pas (cf. figure 3.2). Par ailleurs, on retrouve que lorsque la déformation libre imposée est trop faible, il n'y a pas de glissement du fait que le gain d'énergie à glisser ne compense pas le coût énergétique pour glisser. En revanche, si la déformation libre est suffisante, des glissements se produisent localement (c'est-à-dire pas sur toute la circonférence de l'inclusion, cf. figure 3.2), et si l'on augmente encore la déformation libre, on observe un glissement sur toute l'interface de l'inclusion (cf. figure 3.3).

La solution que nous avons proposée avait pour but d'être exploitée dans un calcul de nucléation de phase simplifié, en quantifiant certaines contributions énergétiques qui conduisent à l'apparition d'une nouvelle phase dans un système. Il s'agit ici de l'énergie stockée du fait de la partie déviatorique de la transition de phase et des glissements, qui peuvent se produire en dissipant de l'énergie. Ce travail peut aussi et surtout être intégré comme une contribution possible dans un modèle analytique de plasticité de transformation, où l'on considère généralement une inclusion sphérique soumise à une variation de volume due à la transformation de phase. Mais on considère rarement la contribution due à la partie déviatorique, qui peut induire comme nous l'avons vu des glissements. J'ai développé un tel modèle de plasticité de transformation, qui intègre la partie déviatorique de la transformation de phase sans toutefois intégrer la partie glissement, qui reste à être ajoutée au modèle, que je présente dans la section suivante.

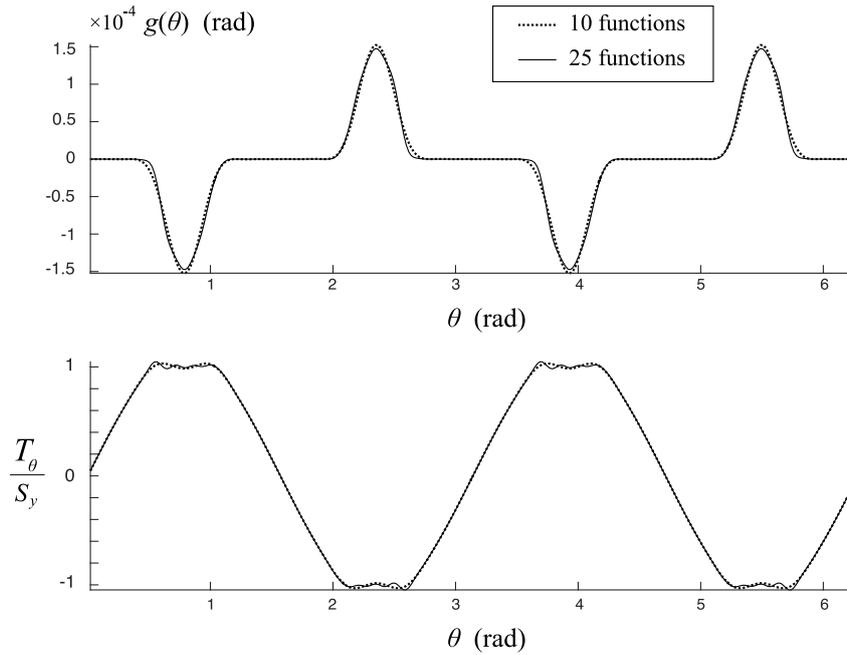


FIGURE 3.2 – Glissement local partiel pour une déformation libre modérée.

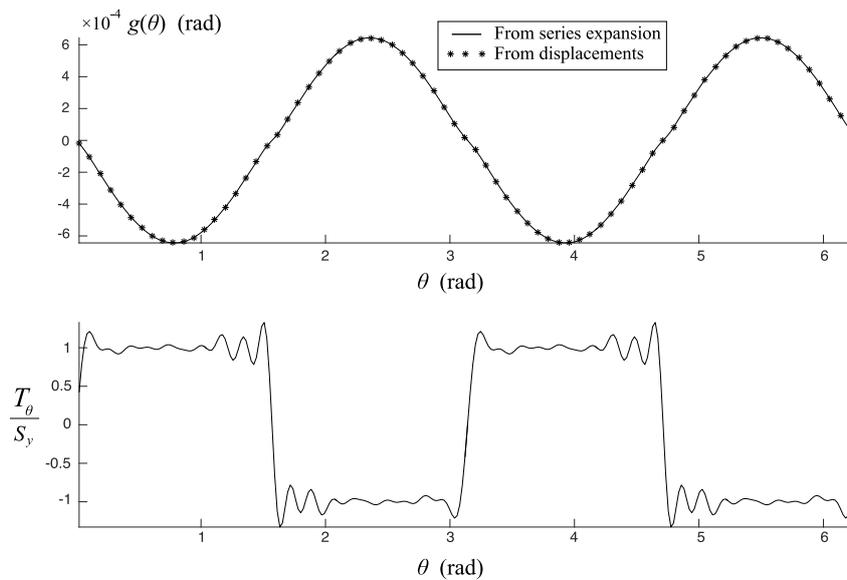


FIGURE 3.3 – Glissement sur l'ensemble de l'interface pour une déformation libre plus significative.

### 3.3 Plasticité de transformation

*Cette section est liée à [109, 110].*

Quand des transitions de phase se produisent sous chargement mécanique, même bien inférieur à la limite d'élasticité, on observe des déformations plastiques macroscopiques (cf. figure 3.4). Ce phénomène, appelé plasticité induite par la transformation, ou plasticité de transformation, a été très étudié en raison de ses enjeux théoriques et pratiques, notamment pour les problèmes de soudure. Le modèle que j'ai proposé est issu d'une homogénéisation analytique simplifiée d'une microstructure multiphasique. Ce travail théorique a été confronté à des mesures de dilatométrie avec un accord satisfaisant. Ces travaux ont été directement utilisés dans les simulations de procédés de l'axe 2, ces contributions étant en effet essentielles pour les procédés de mise en forme, que j'ai étudiés.

Le projet pour ce modèle était d'étendre la validité des résultats d'un modèle plus ancien proposé par Leblond *et al.* [131–134], qui repose sur une microstructure idéalisée extrêmement simple (inclusion sphérique dans une matrice) et se présente sous une forme analytique élégante. Du fait de ses bases physiques solides et de sa simplicité, ce modèle est très utilisé pour diverses applications [135–139], il est donc intéressant d'étendre son domaine de validité tout en conservant une formulation analytique relativement simple. Bien entendu, de nombreuses contributions visant à établir des modèles de plasticité de transformation exploitant diverses hypothèses et reposant sur diverses méthodes méritent d'être citées [140–151]. Par ailleurs, parmi les études expérimentales, qui ont également permis de mieux comprendre ce phénomène, j'ai particulièrement exploité [152–155] pour valider mon approche. Cette dernière est applicable pour des contraintes relativement faibles (c'est-à-dire inférieures à la limite d'élasticité globale). On observe expérimentalement une relation non-linéaire entre les contraintes appliquées et le taux de déformation plastique induit par les transitions de phase [156], alors que la relation obtenue dans ce travail n'est que linéaire, et donc limitée à des contraintes relativement faibles.

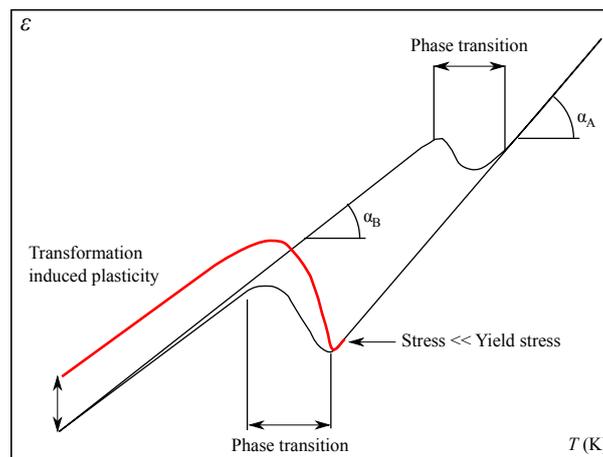


FIGURE 3.4 – Test de dilatométrie schématique sous charge et sans charge.

Le fer pur a deux phases, l'austénite (cubique face centrée) et la ferrite (cubique centré). L'acier étant un alliage de fer et de carbone (avec d'autres éléments d'alliage) on distingue d'autres phases (perlite, bainite et martensite) en fonction de la morphologie de disposition du carbone. La déformation du réseau cristallin lorsque le matériau subit une transformation austénite/ferrite est très significative (cf. figure 3.5). Cette déformation imposée pendant le changement de phase a deux composantes, une partie déviatorique (très intense) et une partie sphérique correspondant à la variation de volume pendant la transformation. À l'échelle locale, cette transformation est responsable de déformations plastiques dont la moyenne macroscopique est généralement nulle si aucun chargement mécanique n'est imposé.

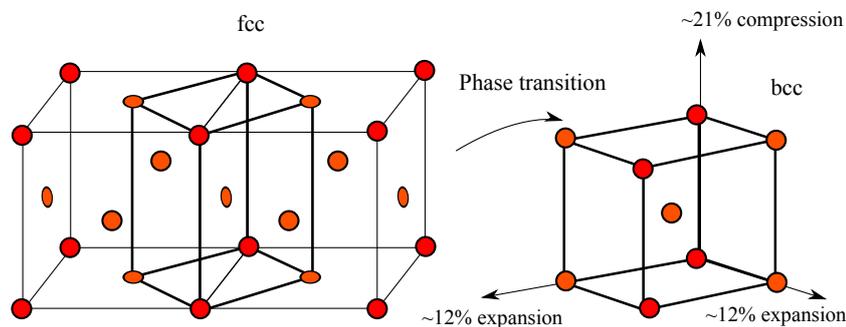


FIGURE 3.5 – Transformation de phase austénite ferrite pour le fer pur.

Ainsi, un essai de dilatométrie sans charge ne présente pas de déformation macroscopique résiduelle après un cycle (cf. figure 3.5). En revanche, lorsqu'un chargement même faible est appliqué, l'écoulement plastique (dû à la variation de volume à l'échelle locale) est orienté et la moyenne macroscopique devient

non-nulle, produisant le phénomène de plasticité de transformation (mécanisme de Greenwood & Johnson [157]). Par ailleurs, les contraintes peuvent également sélectionner préférentiellement un variant de la transformation de phase de sorte que le déviateur de la transformation n'est plus distribué dans toutes les directions et n'est donc plus de moyenne nulle (mécanisme de Magee [158]).

L'enjeu de l'approche que j'ai proposée est d'avoir à disposition un modèle simple qui permette cependant de capturer l'essentiel du phénomène pour des aciers multiphasiques (alors que le modèle de Leblond *et al.* était adapté à une seule transition de phase). Par ailleurs, on s'affranchit d'un certain nombre d'hypothèses par rapport au travail initial de Leblond *et al.* En reprenant et en adaptant les raisonnements de Leblond *et al.* [131, 132] pour homogénéiser un composite multiphasique, on obtient des expressions relativement simples pour les taux de déformations plastiques macroscopiques notés  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{tp}$ ,  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{cp}$ ,  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{cp}$  respectivement associés à une variation des proportions de phase  $\dot{X}_m$  ( $1 \leq m \leq N$  avec  $N$  le nombre de phases), à une variation de température  $\dot{T}$  et une variation de contrainte ( $\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$ ) :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\dot{E}}}^{cp} = \sum_{k=1}^N \frac{3X_k}{2\sigma_k^Y} S_{\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}} \left\langle \frac{\delta\varepsilon_k^{eq}}{\delta\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}} \right\rangle_{V_k} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} \\ \underline{\underline{\dot{E}}}^{cp} = \sum_{k=1}^N \frac{3X_k}{2\sigma_k^Y} S_{\underline{\underline{\dot{T}}}} \left\langle \frac{\delta\varepsilon_k^{eq}}{\delta T} \right\rangle_{V_k} \dot{T} \\ \underline{\underline{\dot{E}}}^{tp} = \sum_{k=1}^N \sum_{m=2}^N \frac{3X_k S_{\underline{\underline{\dot{X}_m}}}}{2\sigma_k^Y} \left\langle \frac{\delta\varepsilon_k^{eq}}{\delta X_m} \right\rangle_{V_k} \dot{X}_m \end{cases} \quad (3.5)$$

Où chaque phase  $k$  occupe un volume noté  $V_k$ , le symbole  $\langle \cdot \rangle_{V_k}$  représente la moyenne volumique sur  $V_k$ ,  $\sigma_k^Y$  est la limite d'élasticité de chaque phase  $k$ ,  $S_{\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}}$  la moyenne du déviateur des contraintes dans la phase  $k$ , et  $\delta\varepsilon_k^{eq}$  l'incrément de déformation plastique cumulée dans la phase  $k$ . Les termes dominants sont le plus souvent le terme de plasticité de transformation  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{tp}$ , et le terme de plasticité classique pour une variation de température  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{cp}$ .

À partir de (3.5), on remarque que les moyennes volumiques de l'incrément de déformation plastique cumulée  $\delta\varepsilon_k^{eq}$ , pour des incréments de proportions de phase et de température, permettent de caractériser le terme de plasticité de transformation  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{tp}$  et le terme de plasticité classique  $\underline{\underline{\dot{E}}}^{cp}$ . Le calcul de ces moyennes volumiques nécessite d'être capable de calculer localement les déformations plastiques associées à une transition de phase ou une variation de température. Ainsi, pour calculer ces moyennes volumiques, on s'oriente vers des calculs analytiques simplifiés sur une microstructure idéalisée, qui permet d'obtenir des formules explicites, ne faisant intervenir que des quantités calculées à l'échelle macroscopique. Le modèle que j'ai proposé inclut les deux contributions de la transformation de phase, la partie isotrope (variation de volume) et la partie déviatorique (de trace nulle).

Pour développer ce modèle, on s'appuie sur des microstructures idéalisées, qui permettent de mener des calculs explicites. Deux problèmes distincts sont considérés, le premier fait référence à la partie déviatorique de la transformation de phase. Si l'on imagine les phases ferritiques ou la phase martensitique en formation dans une matrice d'austénite, le déviateur de la transformation de phase est accommodé dans l'inclusion par une déformation plastique, elle-même déviatorique. Il est important de noter que le déviateur de la transformation de phase dépend de l'orientation cristalline de chaque inclusion, et donc la déformation plastique dans chaque inclusion dépend également de l'orientation cristalline. Lorsqu'il n'y a pas de contraintes appliquées, la moyenne macroscopique de ces déformations plastiques est nulle, car on suppose que les inclusions ont des orientations cristallographiques équitablement réparties dans toutes les directions, c'est-à-dire que les déformations plastiques se compensent entre les différentes inclusions (cf. figure 3.6a gauche). Cependant lorsqu'une contrainte est appliquée, on considère dans ce modèle simple, que cela oriente les déformations plastiques dans la direction de la contrainte appliquée. On utilise pour quantifier la moyenne macroscopique de la déformation plastique un modèle d'Eshelby où toutes les inclusions sont rassemblées en une seule, de telle sorte que la fraction de phase est conservée (cf. figure 3.6a droite).

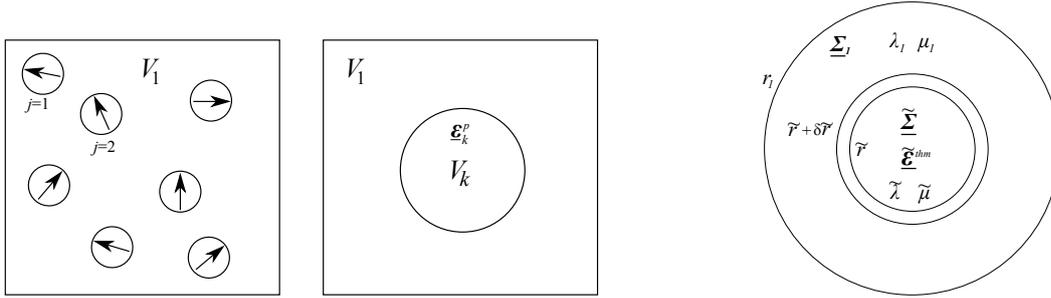
Le second problème consiste à considérer la variation de volume de la transformation de phase. Ce terme, même s'il est beaucoup plus faible que la partie déviatorique est responsable de l'essentiel du phénomène de plasticité de transformation. Cette variation de volume a pour effet de plastifier la matrice d'austénite dont la limite élastique est beaucoup plus faible que les phases ferritiques ou martensitique. La microstructure idéalisée consiste en une inclusion sphérique (la phase en formation) dans une sphère (la matrice)

(cf. figure 3.6). J'ai développé un calcul analytique élasto-plastique (pour la matrice comme pour l'inclusion) pour traiter ce problème.

À l'issue de ces deux problèmes analytiques, on est capable d'écrire le taux de déformation plastique cumulée, en fonction de grandeurs macroscopiques :

$$\underline{\dot{E}}^{tp} = \sum_{k=2}^N \frac{S_k}{\sigma_k^Y} \frac{\sigma_k^Y - \Sigma_k^{eq}}{\mu_k \xi_k} \dot{X}_k + \begin{cases} 0 & \text{si } 1 < \frac{\Delta\sigma^Y}{\zeta |\tilde{\varepsilon}^{thm}|} \\ -\frac{3 |\tilde{\varepsilon}^{thm}| S_1}{\sigma_1^Y} \ln\left(\frac{\Delta\sigma^Y}{|\tilde{\varepsilon}^{thm}| \zeta}\right) \left(\sum_{\substack{m=2 \\ \dot{X}_m > 0}}^N \dot{X}_m\right) & \text{si } \tilde{X} \leq \frac{\Delta\sigma^Y}{\zeta |\tilde{\varepsilon}^{thm}|} \leq 1 \\ -\frac{3 |\tilde{\varepsilon}^{thm}| S_1}{\sigma_1^Y} \ln(\tilde{X}) \left(\sum_{\substack{m=2 \\ \dot{X}_m > 0}}^N \dot{X}_m\right) & \text{si } \tilde{X} > \frac{\Delta\sigma^Y}{\zeta |\tilde{\varepsilon}^{thm}|} \end{cases} \quad (3.6)$$

Où la matrice austénitique est représentée par  $k = 1$ , et les phases ferritiques et martensitiques sont représentées par  $k \geq 2$ . Par ailleurs,  $\Sigma_k^{eq}$  est la contrainte de von Mises dans la phase  $k$ ,  $\Delta\sigma^Y = \sqrt{(\sigma_1^Y)^2 - (\Sigma_1^{eq})^2}$ ,  $\xi_k$ ,  $\xi_k$  et  $\zeta$  se calculent à partir des coefficients de Lamé  $\mu_k$ ,  $\lambda_k$  de la phase  $k$ , et  $\tilde{\varepsilon}^{thm}$  se calcule grâce aux coefficients de dilatation thermique des différentes phases. Enfin,  $\tilde{X}$  est la somme de proportions de phase en formation (autres que la matrice austénitique). Le premier terme de (3.6) tient à la partie déviatorique de la transition de phase, et le second terme à la variation de volume. On remarque que la singularité classique du modèle de Leblond, due au logarithme faisant intervenir les proportions de phase en formation, est résorbée par un seuil qui apparaît naturellement dans le calcul analytique. Une expression similaire est obtenue pour le taux de déformation plastique associé à une variation de température.



(a) Contribution due au déviateur de la transformation de phase. (b) Contribution due à la variation de volume de la transformation de phase.

FIGURE 3.6 – Morphologies idéalisées pour le calcul.

L'une des principales raisons de développer un tel modèle est son utilisation aisée dans un problème macroscopique de grande taille (cf. les problèmes de mise en forme de l'axe 2), car l'incrément de plasticité de transformation est facilement calculable et ne nécessite pas de calculs supplémentaires aux échelles inférieures pendant le calcul macroscopique. Ce modèle de plasticité de transformation macroscopique est élégant et facile à utiliser, mais il convient d'en tester la validité. En effet, les hypothèses que l'on a dû consentir pour obtenir une formulation analytique rendent le modèle assez frustré. J'ai donc mis à l'épreuve le modèle en le comparant à un certain nombre de mesures sur un acier de cuve de centrale nucléaire en utilisant notamment les tests de Coret *et al.* [154]. L'accord entre les calculs prédictifs et les mesures est satisfaisant (cf. figure 3.7). J'ai poursuivi cette investigation sur d'autres nuances (aciers à très haute limite d'élasticité) en partenariat avec Nicolas Legrand (R&D ArcelorMittal) et Takayuki Otsuka (R&D NipponSteel). Les résultats sont satisfaisants dans le cas classique des contraintes appliquées faibles. En revanche, l'approche que j'ai développée ne permet pas de restituer la non-linéarité classique des déformations plastiques de transformation en fonction de la contrainte appliquée pour les contraintes importantes. Ce sujet nécessite une modélisation de la microstructure beaucoup plus fine, comme récemment proposé dans [159]. Cela fait l'objet de développements nouveaux dans le cadre d'une thèse CIFRE avec ArcelorMittal, que je co-encadre avec Benoit Appollaire et Sabine Denis (Institut Jean Lamour, Nancy) et que je développe plus en détails en conclusion de ce mémoire.

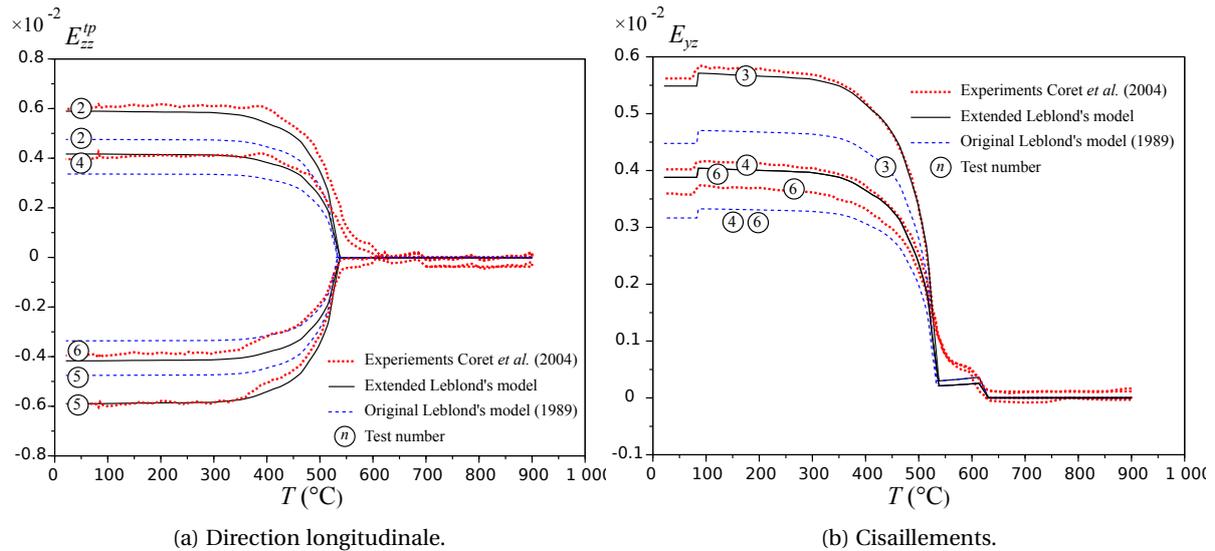


FIGURE 3.7 – Plasticité de transformation mesurée et calculée.

### 3.4 Modèle multiéchelle de croissance de grain

J'ai initié dans le cadre de la thèse de [Sofia Sakout](#), que j'ai co-encadrée avec [Alain Ehrlicher](#) (Laboratoire Navier, École des Ponts ParisTech), la construction d'un modèle macroscopique et stochastique de croissance de grain qui permet de suivre l'évolution statistique des microstructures en fonction de la température. L'idée est de construire un modèle macroscopique dont les variables d'état contiennent en chaque point matériel (en plus de la température, la déformation etc.), des descripteurs statistiques de la microstructure, par exemple la distribution de désorientation cristalline, la distribution de taille et forme des grains etc. Bien sûr, ces distributions statistiques sont trop détaillées pour être utilisées à l'échelle macroscopique en chaque point matériel, mais on peut les résumer par une moyenne et un écart type par exemple. Cette ambition vient du peu d'informations traitées habituellement à l'échelle macroscopique sur l'état de la microstructure (on ne conserve en général que les proportions de phase ou la taille moyenne des grains). L'état de la microstructure est très complexe et les phénomènes locaux qui permettent de la faire évoluer également (orientations cristallines, forme et taille des grains, répartition et diffusion des éléments d'alliage, phénomènes de ségrégation aux joints de grain etc.). On s'est donc limité dans un premier temps au phénomène de croissance de grain dans un métal polycristallin pur. Ce cas idéalisé par rapport à un métal réel, a permis de développer une méthodologie et un formalisme nouveaux adaptés pour ce type d'ambition.

Nous avons proposé une stratégie énergétique de changement d'échelle pour construire un modèle macroscopique, qui permette de suivre des indicateurs statistiques des distributions classiques représentant la microstructure. Par exemple, la *grain boundary character distribution* (GBCD), qui est la distribution des longueurs relatives de joints de grain en fonction de la désorientation<sup>1</sup>. L'idée de cette stratégie de changement d'échelle est de s'appuyer sur des concepts énergétiques, qui ont le même sens à toutes les échelles et que l'on peut simplement sommer. Les phénomènes qui sous-tendent la croissance de grain se produisent à différentes échelles (cf. figure 3.8) : (i) atomique (arrangement cristallin, potentiel d'interaction interatomique), (ii) microscopique (joints de grain, énergie de désorientation), (iii) mésoscopique (polycristal) et (iv) macroscopique (chaque point de matière représente une mésostructure avec quelques centaines de grains). Nous avons développé un premier modèle rapide à l'échelle mésoscopique, qui prend en compte les contributions énergétiques des échelles plus fines. Ce modèle mésoscopique repose sur des tessellations de Voronoi-Laguerre, dont on met à jour, à chaque pas de temps, certains paramètres (les poids). Sur cette base nous avons massivement utilisé ce modèle pour créer une base de données de calculs mésoscopiques, qui ont permis de définir des variables d'état macroscopiques, qui synthétisent statistiquement l'information de la mésostructure. Des équations d'évolution macroscopiques propres ont été démontrées pour ces variables d'état, ce qui nécessite l'introduction d'un cadre probabiliste pour identifier certains tenseurs, qui interviennent dans les équations d'évolution. En effet, la perte d'information dans le passage entre l'échelle

1. ce qui revient à la distribution des désorientations avec une mesure de probabilité fondée sur la proportion de longueur

mésoscopique et l'échelle macroscopique introduit une incertitude épistémique (c'est-à-dire liée au manque d'information et non à une indétermination fondamentale). Le caractère stochastique du modèle macroscopique obtenu représente l'ensemble des évolutions possibles à partir d'un état macroscopique donné. En effet, une multitude d'états mésoscopiques détaillés correspondent à un unique état macroscopique initial donné, et ces états mésoscopiques évoluent de manière différenciée. Grâce au cadre probabiliste (par inférence Bayésienne) le modèle macroscopique capte les différentes évolutions, qui peuvent être issues de l'état macroscopique initial.

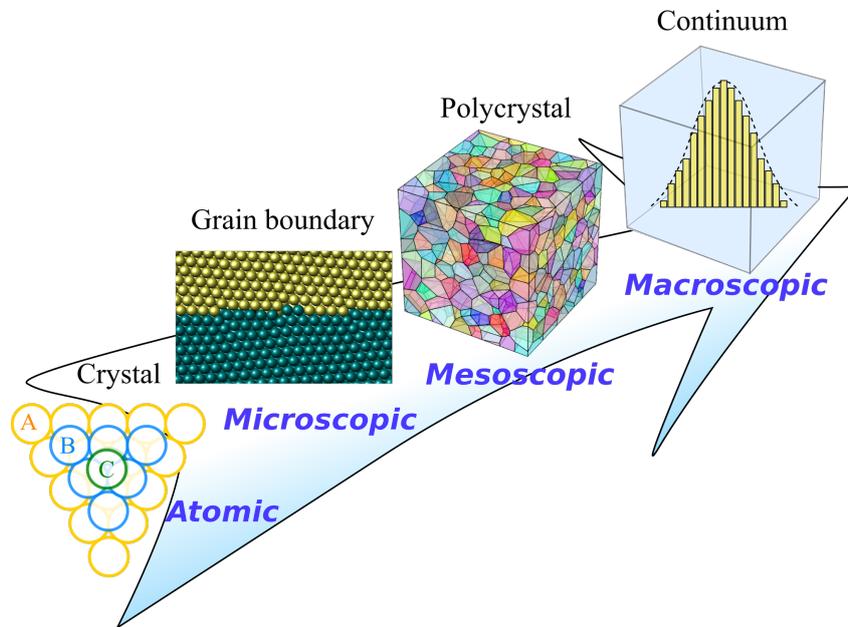


FIGURE 3.8 – Différentes échelles considérées dans la stratégie de changement d'échelle pour la croissance de grain.

Je présente en premier lieu le modèle de croissance de grain rapide à l'échelle mésoscopique, puis je détaillerai dans un second temps la construction du modèle macroscopique associé à la base de données que nous avons construite.

### 3.4.1 Modèle rapide de croissance de grain mésoscopique

Cette section est liée à [111–114].

Nous devons utiliser un modèle de croissance grains à l'échelle mésoscopique de manière intensive pour générer la base de données. Un grand nombre de méthodes ont été proposées, on peut citer par exemple les modèles fondés sur des automates cellulaires et des techniques de Monte Carlo [160–164], des méthodes par éléments finis mobiles [165, 166], des méthodes par fonctions de niveau [167–170], des méthodes en champ de phase [171–177], des méthodes par dynamique moléculaire [178–180], ou encore des méthodes par déplacement de sommets [181–184]. Nous avons préféré utiliser le modèle, que nous avons développé à l'échelle mésoscopique (cf. section 3.4), qui repose sur une mise à jour de tessellations orientées (*orientated tessellation updating method* (OTUM)) du fait du temps de calcul très réduit et de la bonne connaissance des équations d'évolution qui régissent le système. Il faut noter que ce principe de modèle par tessellations avait déjà été introduit partiellement [185, 186]. L'ambition du modèle que nous proposons est que le temps de calcul soit suffisamment faible pour permettre un grand nombre de calculs qui alimenteront la base de données.

L'idée principale du modèle mésoscopique de croissance de grain que nous avons proposé est d'utiliser une succession de tessellations de Voronoi-Laguerre pour approximer l'évolution de la mésostructure au cours du temps. En effet, générer des tessellations de Voronoi-Laguerre est très peu coûteux en temps. Le principe du modèle est de formuler les lois d'évolution du système directement sur les paramètres qui définissent la tessellation. Une tessellation de  $N$  grains est définie par  $N$  graines ou *seeds* et  $N$  poids scalaires, qui permettent de faire varier la taille des grains. Nous ajoutons des orientations cristallines. Pour s'affranchir des effets de bord et que chaque joint de grain ait effectivement une désorientation, on sélectionne un

volume élémentaire représentatif (VER) comme un sous-ensemble de  $n$  grains dans la tessellation orientée (avec  $n \leq N$ ). On note  $\underline{\alpha} = (\underline{x}, \underline{y}, \underline{w}, \underline{\theta})$  l'ensemble des paramètres du VER, où  $\underline{x}, \underline{y}$  sont les  $n$  coordonnées des *seeds*,  $\underline{w}$  les poids et  $\underline{\theta}$  les orientations cristallines. Le modèle que nous avons construit permet de mettre à jour les poids d'une tessellation initiale au cours du temps en fonction de la température.

Les mésostructures sont générées avec le logiciel libre de tessellation de Voronoi-Laguerre (NEPER développé par Romain Quey, [187]), qui permet de contrôler statistiquement les distributions de taille des grains et des sphéricités. Par ailleurs, il convient de contrôler les distributions des désorientations initiales, puisque cette information intervient de manière explicite dans le calcul de l'énergie de joint de grain. Imposer une distribution d'orientation dans un polycristal est trivial et en déduire la distribution de désorientation aussi. En revanche, si l'on souhaite sonder l'espace des tessellations orientées de manière assez systématique, imposer au hasard des distributions d'orientation ne suffit pas, car certaines distributions de désorientation ne se produisent pas facilement par hasard. Il est donc souhaitable d'imposer la distribution de désorientation et non les orientations. Cependant ce problème est beaucoup moins simple, car il convient de trouver les orientations cristallines conduisant statistiquement à une certaine distribution de désorientation voulue. Il s'agit d'un problème déjà connu, et la solution habituelle consiste à optimiser numériquement les orientations jusqu'à ce que la distribution de désorientation soit conforme aux attentes. Nous avons opté pour une approche alternative, pour éviter cette optimisation numérique coûteuse en temps de calcul, compte tenu de l'objectif d'explorer un grand nombre de mésostructures. Nous avons simplement tiré au hasard les orientations cristallines de proche en proche selon une loi de désorientation voulue, en tenant compte grâce à des probabilités conditionnelles des incompatibilités géométriques. Quoiqu'assez approximative, cette méthode permet d'obtenir des statistiques de désorientation suffisamment proches de la distribution voulue (cf. figure 3.9), sans faire aucune optimisation et donc sans coût de calcul important.

Pour tester si cette voie de recherche assez exploratoire est viable, nous avons débuté sur des mésostructures bidimensionnelles. Cela permet de simplifier l'expression de l'énergie aux joints de grain et de la puissance dissipée lorsqu'un joint de grain est mobile. Nous avons considéré un cristal hexagonal plan avec trois directions cristallines de glissement, c'est-à-dire un cristal cubique faces centrées vu dans un plan de normal  $\langle 1, 1, 1 \rangle$ . Ainsi la désorientation qui est caractérisée par cinq paramètres en 3D n'est plus caractérisée que par deux paramètres en 2D (angle de désorientation et angle du joint de grain). Nous avons de plus négligé l'influence de l'angle du joint de grain et il ne reste donc dans l'analyse que l'angle de désorientation cristallographique. L'énergie portée par un joint de grain dépend de la désorientation cristallographique.

Pour écrire proprement la loi d'évolution de la tessellation orientée, nous avons défini un potentiel d'énergie libre et un potentiel de dissipation. Dans le cas simplifié, que nous avons traité jusqu'à présent, on ne s'intéresse pour modéliser la croissance des grains, qu'à 1) l'énergie libre des joints de grain notée  $\gamma(T, \Delta\theta)$  (où  $T$  est la température et  $\Delta\theta$  la désorientation du joint) et 2) le mécanisme de dissipation permettant de rendre mobile le joint de grain. Ainsi la puissance dissipée dans un mouvement virtuel du joint de vitesse  $v^*$  est notée  $D(T, \Delta\theta, v^*)$ . Ces deux "ingrédients" locaux suffisent à construire le modèle de croissance mésoscopique. Des calculs de statique moléculaire (échelles atomique et microscopique) ont permis d'obtenir une courbe d'énergie de joint en fonction de la désorientation, qui est interpolée par une fonction analytique reprise des travaux de Wolf [188] (cf. figure 3.10a) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma(0, \Delta\theta) = \gamma_1 \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_1}\right) \left[ 1 - a_1 \ln\left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_1}\right)\right) \right] \\ (0 \leq \Delta\theta \leq \Delta\theta_1) \\ \\ \gamma(0, \Delta\theta) = \gamma_2 + (\gamma_1 - \gamma_2) \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{\Delta\theta - \frac{\pi}{3}}{\Delta\theta_1 - \frac{\pi}{3}}\right) \left[ 1 - a_2 \ln\left(\sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{\Delta\theta - \frac{\pi}{3}}{\Delta\theta_1 - \frac{\pi}{3}}\right)\right) \right] \\ \left(\Delta\theta_1 \leq \Delta\theta \leq \frac{\pi}{3}\right) \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Où l'on identifie les coefficients  $\gamma_1, \gamma_2, a_1, a_2$  et  $\Delta\theta_1$  grâce aux calculs de statique moléculaire à  $T = 0$  K. Pour prendre en compte la dépendance en température on postule que  $\gamma(T, \Delta\theta) = \frac{G(T)}{G(0)} \gamma(0, \Delta\theta)$  où  $G$  est le coefficient de cisaillement (on utilise  $G$  et non  $\mu$  car cette notation est utilisée pour un autre usage par la suite). Par ailleurs, différents mécanismes de dissipation aux échelles atomique et microscopique sont connus lorsqu'un joint de grain est mobile. Cela se traduit par une fonction de mobilité de joint de grain fonction de la désorientation notée  $m_{CD}(T, \Delta\theta)$ . La puissance dissipée dans un mouvement virtuel de vitesse  $v^*$  du joint

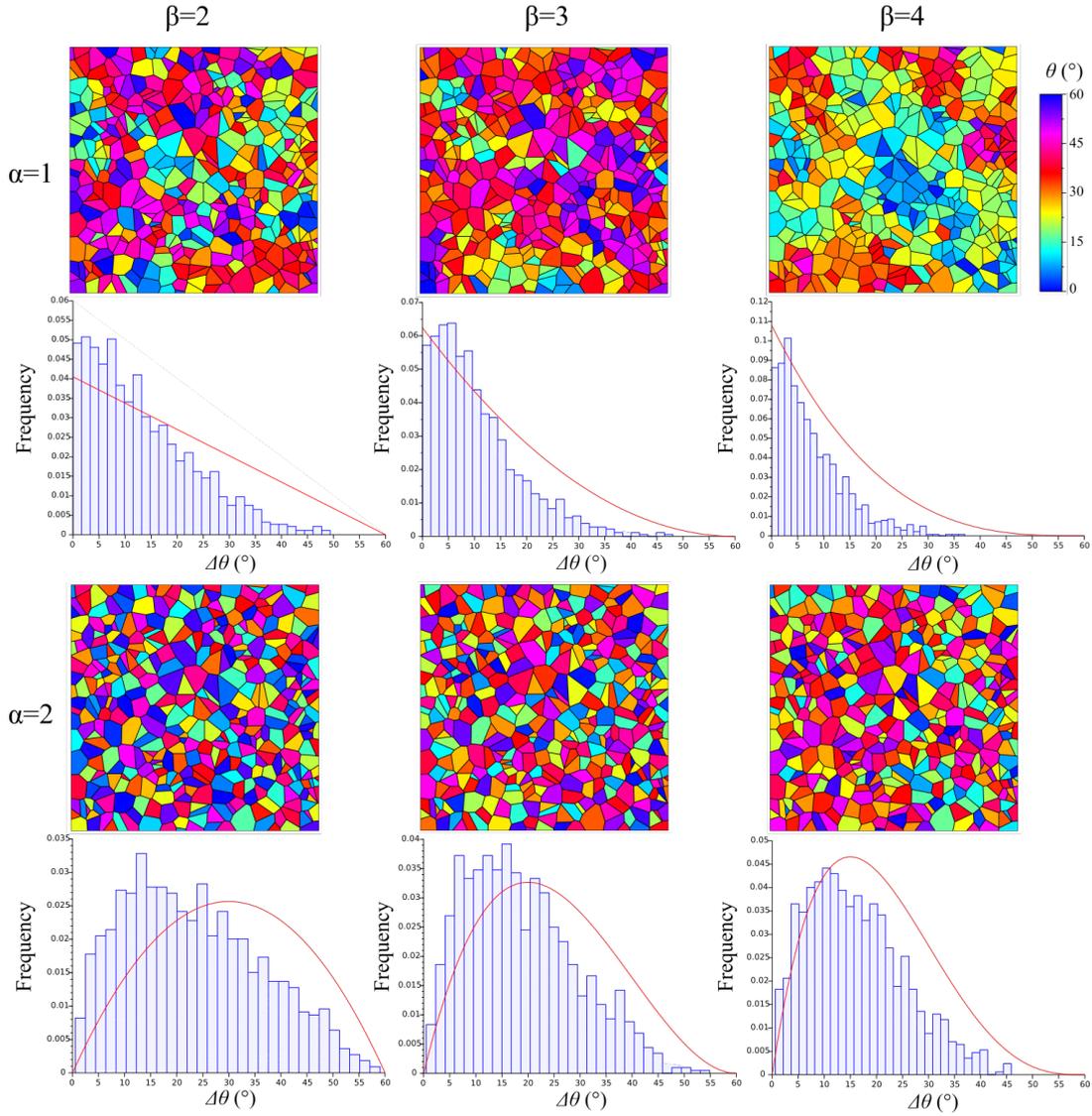


FIGURE 3.9 – Exemple de distributions de désorientation et mésostructure correspondantes.

ayant une désorientation  $\Delta\theta$  se lit :

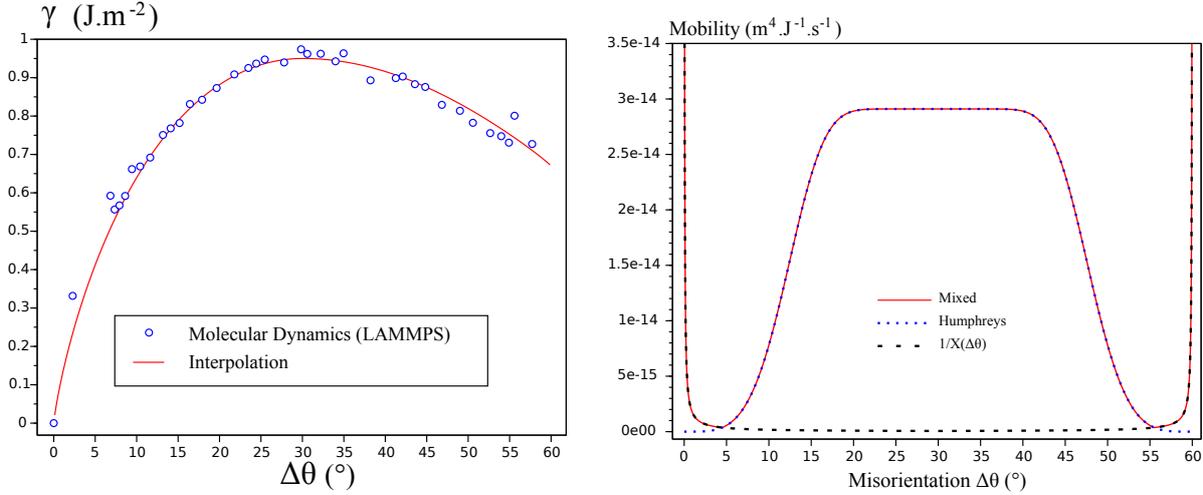
$$D(T, \Delta\theta, v^*) = \frac{[v^*]^2}{m_{CD}(T, \Delta\theta)} \quad (3.8)$$

Pour la mobilité, il existe une fonction classique [189] limitée aux désorientations, qui ne tendent pas vers zéro, car dans ce cas cette fonction de mobilité classique est inconsistante du fait que la puissance dissipée devient infinie. Nous avons adapté cette fonction pour les très faibles désorientations, sur la base de calculs analytiques de plasticité cristalline avec un joint de grain mobile [190, 191]. Dans la version que nous avons proposée (cf. figure 3.10b), les désorientations qui tendent vers zéro (c'est-à-dire qu'il n'y a pas de joints de grain) correspondent à une mobilité infinie, c'est-à-dire à une puissance dissipée nulle, ce qui correspond à un mécanisme de plasticité cristalline et est intuitivement plus correct. Nous avons donc opté pour l'expression suivante :

$$m_{CD}(T, \Delta\theta) = \begin{cases} \frac{m(T)}{\frac{6}{\pi} \left( \frac{\pi}{3} + 2\sqrt{3} \ln \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right) \min \left\{ \Delta\theta, \frac{\pi}{3} - \Delta\theta \right\}} & \text{si } \min \left\{ \Delta\theta, \frac{\pi}{3} - \Delta\theta \right\} \leq \Delta\theta_0 \quad [190, 191] \\ m_{\max}(T) \left( 1 - \exp \left[ -K \left( \frac{\Delta\theta}{\Delta\theta_2} \right)^p \right] \right) & \text{si } \min \left\{ \Delta\theta, \frac{\pi}{3} - \Delta\theta \right\} \geq \Delta\theta_0 \quad [189] \end{cases} \quad (3.9)$$

Où les coefficients  $K$ ,  $p$ ,  $\Delta\theta_0$  et  $\Delta\theta_2$ , ainsi que la fonction  $m_{\max}(T)$  doivent être identifiés à partir d'essais.

Par ailleurs, le facteur de mobilité  $m(T)$  est lié à  $m_{\max}(T)$  pour assurer la continuité entre les deux régimes, dont le seuil est  $\Delta\theta_0$ .



(a) Énergie de joint de grain en fonction de la désorientation.

(b) Mobilité en fonction de la désorientation.

FIGURE 3.10 – Énergie et mobilité de joint de grain en fonction de la désorientation.

Sur la base de ces deux “ingrédients” énergétiques formulés à l’échelle de chaque joint de grain, on peut faire la somme de toutes les contributions dans le VER et définir une énergie totale  $\mathcal{E}(T, \underline{\alpha})$  et une puissance dissipée totale  $\mathcal{D}(T, \underline{\alpha}, \underline{v}^*)$  :

$$\begin{cases} \mathcal{E}(T, \underline{\alpha}) = L_0 \sum_{(i,j) \in I_{\text{RVE}}} l_{ij} \gamma_{ij} \\ \mathcal{D}(T, \underline{\alpha}, \underline{v}^*) = L_0 \sum_{(i,j) \in I_{\text{RVE}}} l_{ij} D_{ij}^* \end{cases} \quad (3.10)$$

Où  $I_{\text{RVE}}$  représente l’ensemble des joints du VER,  $l_{ij}$  sont les longueurs adimensionnelles du joint  $ij$  (entre le grain  $i$  et le grain  $j$ ),  $\gamma_{ij}$  l’énergie du joint (calculée grâce à (3.7)),  $D_{ij}^*$  la puissance dissipée dans le mouvement virtuel du joint (calculée grâce à (3.8)), et  $L_0$  la longueur physique de la tessellation. On a posé  $\underline{v}^*$  l’ensemble des vitesses virtuelles des joints dans le VER. La définition des tessellation de Voronoi-Laguerre permet d’écrire un lien géométrique entre  $\underline{v}^*$  et l’évolution des poids  $\underline{w}$ .

Ces énergie et dissipation totales permettent de formuler une loi d’évolution des paramètres de la tessellation orientée, pour laquelle on ne fait varier que les poids des grains. Cette loi d’évolution repose sur la maximisation de la dissipation totale  $\mathcal{D}$ , sous contrainte de vérifier l’équation de bilan thermodynamique  $\mathcal{D}(T, \underline{\alpha}, \underline{w}) + \dot{\mathcal{E}}(T, \underline{\alpha}) = 0$ , ainsi que la conservation de la masse notée  $M$ . Cette optimisation sous contrainte se lit :

$$\underline{\dot{w}}_{\text{meso}} = \begin{cases} \text{argmax}_{\underline{w} \in \mathbb{R}^n} \mathcal{D}(T, \underline{\alpha}, \underline{w}) \\ \text{sous contrainte : } \mathcal{D}(T, \underline{\alpha}, \underline{w}) + \dot{\mathcal{E}}(T, \underline{\alpha}) = 0 \\ \frac{\partial M}{\partial \underline{w}} \cdot \underline{\dot{w}} = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

On résout ce problème de manière formelle analytiquement et l’on aboutit à une loi d’évolution simple donnant la dérivée temporelle des poids en fonction des paramètres actuels de la tessellation orientée et de la température :

$$\underline{\dot{w}}_{\text{meso}} = -\frac{m(T)}{L_0^3} \underline{M}_{\text{meso}}(\underline{\alpha}) \cdot \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{meso}}(T, \underline{\alpha})}{\partial \underline{w}} \quad (3.12)$$

Où la force thermodynamique  $\partial \mathcal{E}_{\text{meso}}(T, \underline{\alpha}) / \partial \underline{w}$  et la matrice  $\underline{M}_{\text{meso}}(\underline{\alpha})$  de taille  $n \times n$  se calculent simplement grâce aux paramètres de la tessellation orientée  $\underline{\alpha}$ . On remarque un effet de taille avec la longueur physique  $L_0$  qui apparaît explicitement dans la loi d’évolution.

Le modèle que nous avons construit est très économique en temps de calcul. Les résultats typiques sont les tessellations orientées à chaque incrément de temps (cf. figure 3.11). Ce modèle mésoscopique a été comparé à des modèles classiques donnant certaines statistiques de la structure granulaire. Notamment nous avons comparé les résultats du modèle avec l'équation de von Neuman-Mullins [192–194] et les distributions de taille de grain de Hillert et de Rayleigh [195–197] et un bon accord a été obtenu (cf. figure 3.12).

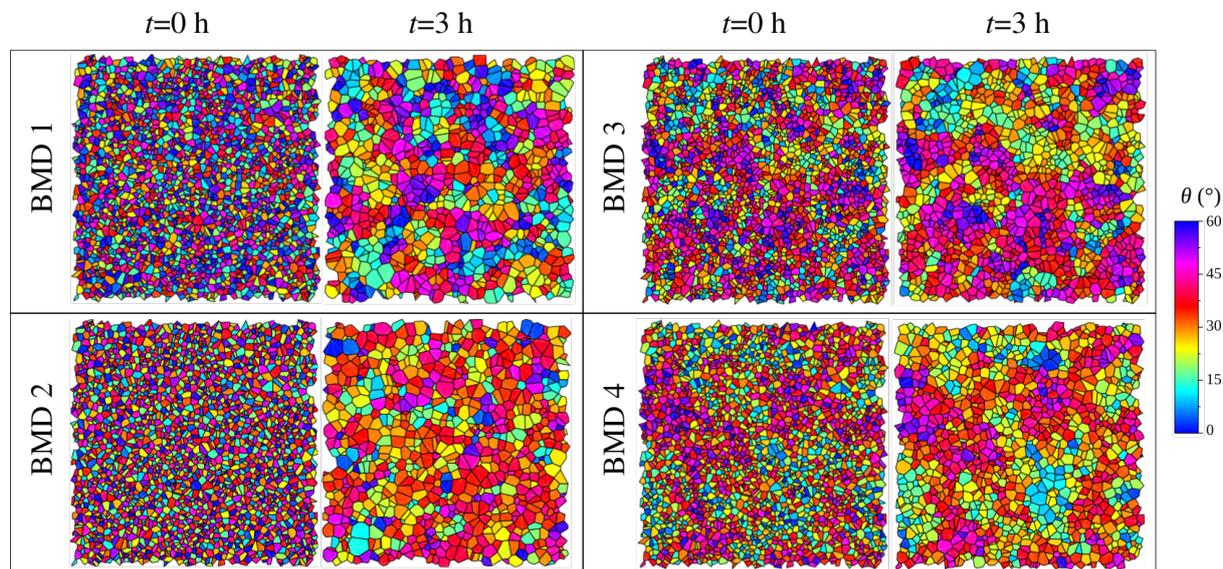
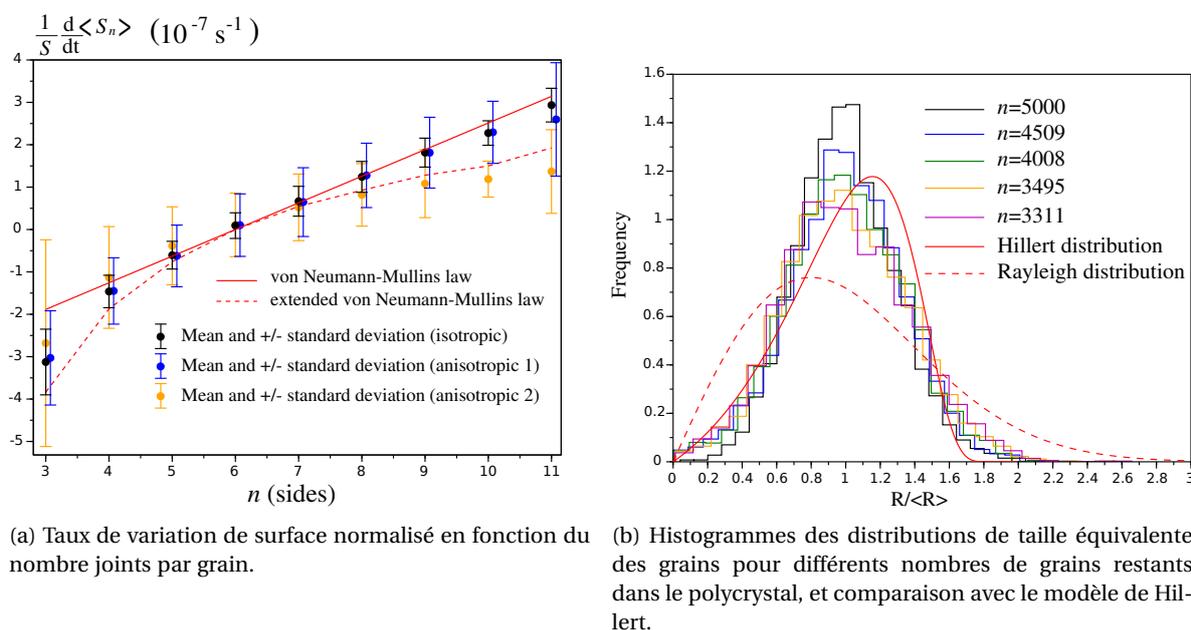


FIGURE 3.11 – Exemples d'évolution de mésostructure.



(a) Taux de variation de surface normalisé en fonction du nombre joints par grain.

(b) Histogrammes des distributions de taille équivalente des grains pour différents nombres de grains restants dans le polycrystal, et comparaison avec le modèle de Hillert.

FIGURE 3.12 – Validation des statistiques de grain.

Par ailleurs, le modèle a été comparé de manière assez grossière à une expérience relativement récente sur du fer pur [198], qui présente l'intérêt de fournir les angles de désorientation entre les grains. La tessellation orientée initiale n'est pas optimisée pour être la plus proche possible de l'image issue de l'expérience, mais on observe tout de même une bonne similarité entre le calcul et les résultats expérimentaux (cf. figure 3.13). Par ailleurs la taille de grain moyenne a été comparée et un bon accord est observé (cf. fi-

gure 3.14). Si cette comparaison expérimentale est encourageante, elle ne doit cependant pas masquer le fait que la comparaison se fait sur une durée relativement courte et que des comparaisons doivent toujours être menées avec des expériences plus longues conduisant à une croissance de grain plus importante.

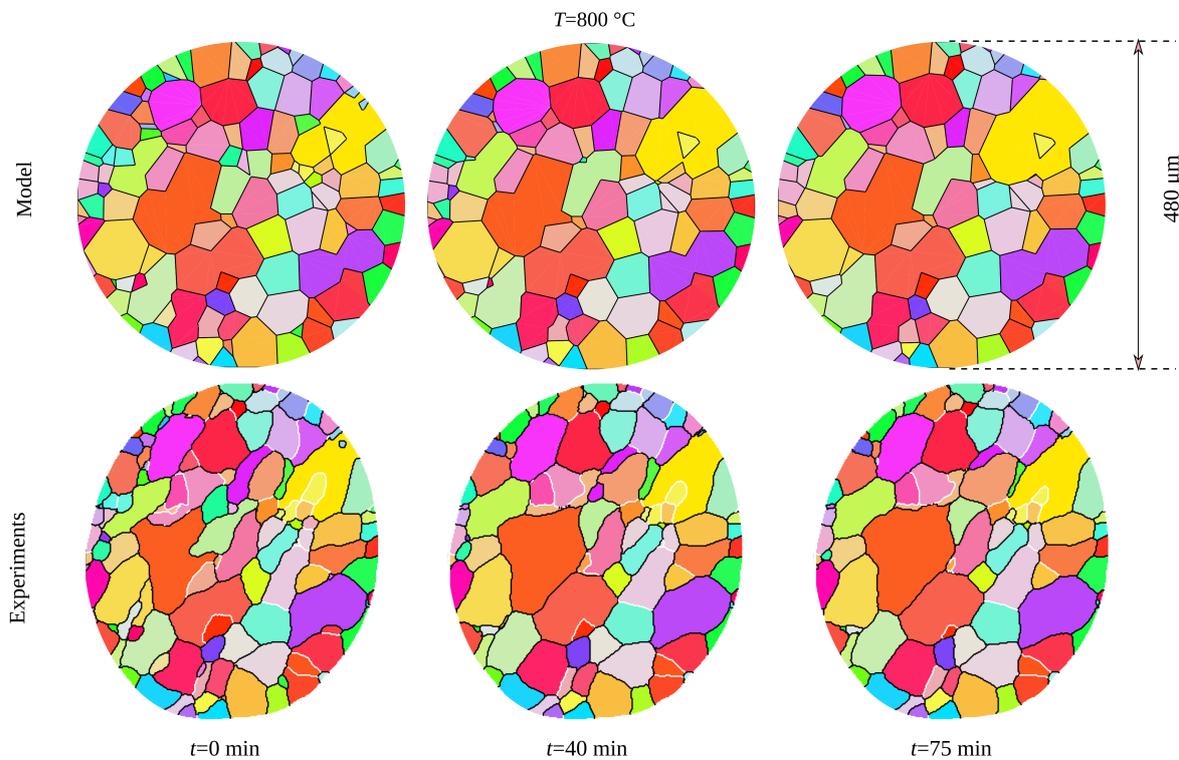


FIGURE 3.13 – Comparaison entre le modèle (haut) et l'expérience (bas).

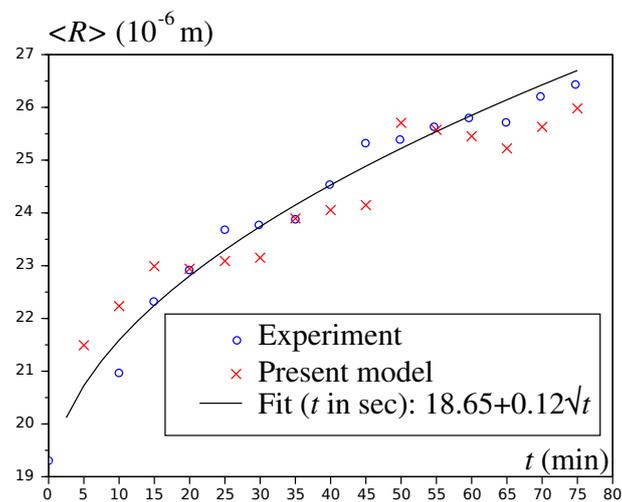


FIGURE 3.14 – Rayon équivalent moyen des grains  $\langle R \rangle$ .

Le principal avantage de ce modèle mésoscopique de croissance de grain est son coût calculatoire réduit, alors que les aspects morphologiques de la structure granulaire sont bien pris en compte et le fait qu'il repose sur des contributions énergétiques à différentes échelles. Ce modèle est massivement utilisé pour construire une large base de données qui permet de formuler une version macroscopique du modèle.

### 3.4.2 Modèle stochastique macroscopique de croissance de grain

Cette section est liée à [115, 116].

Il existe des modèles macroscopiques, qui par exemple s'attachent à simuler directement des distributions statistiques de taille de grains. Dans le contexte de la croissance de grain, les approches en champ moyen ont été développées continuellement depuis plusieurs décennies, de sorte à affiner les lois d'évolution de la taille moyenne des grains. Les approches en champ moyen consistent traditionnellement à considérer une mésostructure idéalisée, faisant généralement intervenir des grains sphériques qui représentent des familles de grains dans la structure polycristalline, qui partagent les mêmes propriétés de taille, d'énergie de joint de grain et de mobilité. Cependant, dans les polycristaux, des propriétés fondamentales, telles que la distribution de désorientation cristalline, dépendent de la connectivité entre les grains, c'est-à-dire de leurs positions relatives les uns par rapport aux autres. Cet aspect est négligé dans les approches en champ moyen classiques, qui ne prennent en compte que des relations entre classes de grains. Par exemple, on peut citer les travaux pionniers [199, 200], qui établissent une équation d'évolution pour la taille moyenne des grains en s'appuyant sur une vitesse d'évolution des joints de grain proportionnelle à leur courbure, ainsi que sur une énergie de joint de grain et une mobilité toutes deux indépendantes de la désorientation. On peut mentionner aussi l'équation classique de von Neumann-Mullins [192–194], qui relie le nombre de côtés et le taux de variation de surface de chaque famille de grain. Par ailleurs, parmi les premiers modèles en champ moyen, les approches statistiques sont bien connues [195–197, 201, 202]. Ces distributions de taille ont été étendues avec des familles de grains ayant des énergies de joint de grain et des mobilités différentes [203–205]. Des approches “semi-topologiques” ont été développées [206] permettant d'introduire quelques aspects topologiques et probabilistes de la migration des joints de grain. On peut également mentionner un modèle permettant de calculer en 2D l'évolution de la distribution de longueur relative des joints de grains en fonction de la désorientation [207], mais il s'agit d'une approche non topologique, qui ne s'appuie pas sur des mésostructures où la connectivité entre les grains serait prise en compte.

Dans l'approche que nous avons proposée, au contraire, le modèle macroscopique repose, pour identifier les potentiels d'énergie libre et de dissipation, sur le modèle mésoscopique (détaillé en section 3.4.1), qui intègre évidemment les aspects topologiques et donc la connectivité entre les grains. Pour cela une base de données [116] a été construite sur un grand nombre de mésostructures qui constituent des volumes élémentaires représentatifs (VER). On a donc un lien substantiel, dans cette approche, entre l'échelle mésoscopique et l'échelle macroscopique. L'énergie libre macroscopique se révèle être une fonction déterministe des variables d'état macroscopiques, que nous avons définies. En revanche, le potentiel de dissipation macroscopique doit faire intervenir un cadre probabiliste. En pratique nous avons utilisé une inférence Bayésienne classique pour identifier ce potentiel. En effet, une incertitude épistémique apparaît du fait de la perte d'information lorsque l'on réduit la quantité de données entre l'échelle mésoscopique et l'échelle macroscopique. Plusieurs états mésoscopiques différents et qui évoluent de manière indépendante, peuvent être identiques du point de vue macroscopique. Le modèle macroscopique doit donc intégrer les différentes évolutions possibles pour un même état macroscopique initial. C'est la raison pour laquelle un cadre probabiliste a été utilisé pour identifier le potentiel de dissipation, donnant son caractère stochastique au modèle macroscopique de croissance de grain, que nous avons construit.

Comme on s'appuie sur une base de données pour formuler le modèle macroscopique, on a tout intérêt à ce que cette dernière soit sans dimension, de telle sorte que les grandeurs physiques soient mises en facteur dans les équations d'évolution et que l'approche s'adapte facilement à différents matériaux, en conservant pour une partie d'entre eux la même base de données. Les variables d'état macroscopiques sont définies de telle sorte que l'énergie libre soit entièrement déterminée par la connaissance de ces dernières. Chaque point matériel du domaine macroscopique doit représenter une structure polycristalline (c'est-à-dire un VER), dont l'énergie est la somme des énergies linéiques portées par les joints de grain multipliées par leur longueur respective. Puisque l'énergie de surface dépend de la désorientation, il est clair que l'énergie totale macroscopique dépend des distributions de longueur de joint et de désorientation. Cependant, des distributions statistiques complètes en chaque point matériel forment une information bien trop riche pour être exploitée dans un large domaine, on réduit donc cette information avec des indicateurs statistiques de position et de dispersion tels que la moyenne et l'écart-type.

Différentes distributions statistiques classiques sont utilisées pour caractériser les joints de grains dans un polycristal. On peut considérer la *boundary misorientation distribution* (BMD) ou *misorientation distribution function* (MDF), qui est la distribution du nombre relatif (proportion) de joints de grains en fonction de la désorientation. On peut alternativement considérer la *grain boundary character distribution* (GBCD),

qui est la distribution des longueurs relatives de joints de grains en fonction de la désorientation. C'est-à-dire que la MDF et la GBCD portent essentiellement la même information, à ceci près que la mesure de la probabilité n'est pas la même (nombre relatif de joints dans le premier cas et longueur relative de joints dans le second). Les indicateurs de position tels que la moyenne et l'écart-type de la MDF sont discontinus en temps, car des sauts apparaissent dès qu'un joint de grain disparaît. En revanche, puisque la longueur des joints tend continument vers zéro lorsqu'un grain tend à disparaître, les indicateurs de position et de dispersion de la GBCD sont continus en temps, ce qui est préférable pour notre modèle. Dans cette perspective, nous avons donc considéré pour construire les variables d'état macroscopiques, les trois premiers moments statistiques successifs (notés  $\mu_0, \mu_1, \mu_2$ ) de la distribution des désorientations, pondérés par les longueurs adimensionnelles des joints :

$$(0 \leq k \leq 2), \mu_k = \sum_{(i,j) \in I_{\text{RVE}}} l_{ij} \Delta\theta_{ij}^k \quad (3.13)$$

Où  $I_{\text{RVE}}$  est l'ensemble des joints de grain du VER,  $l_{ij}$  et  $\Delta\theta_{ij}$  la longueur adimensionnelle et la désorientation du joint entre les grains  $i$  et  $j$ . À partir de ces moments statistiques on peut aisément calculer la densité de joints de grains par unité de surface  $\mu_0/L_0$ , la surface des grains, ou encore la moyenne et le carré de l'écart-type relatif de la GBCD notés  $\tilde{\mu}_1$  (radians) et  $\tilde{\mu}_2$  (sans dimension) :

$$\tilde{\mu}_1 = \frac{\mu_1}{\mu_0} \quad \text{et} \quad \tilde{\mu}_2 = \frac{\mu_2 \mu_0}{\mu_1^2} - 1 \quad (3.14)$$

À ce stade, l'état mésoscopique réduit que nous avons défini et qu'on note  $\underline{\mu}_{\text{meso}} = (\mu_0, \mu_1, \mu_2)$ , se calcule à partir de l'état mésoscopique complet du système noté  $\underline{\alpha}$  grâce à (3.13). Un résultat important, qui montre que cet état mésoscopique réduit est bien choisi, est que l'énergie totale des joints  $\mathcal{E}_{\text{meso}}$ , qui apparaît dans (3.12), peut s'écrire en fonction de l'état mésoscopique réduit  $\underline{\mu}_{\text{meso}}$  au lieu de l'état mésoscopique complet  $\underline{\alpha}$  :

$$\mathcal{E}_{\text{meso}}(T, \underline{\alpha}) \approx L_0 \gamma_S \frac{G(T)}{G(0)} f(\underline{\mu}_{\text{meso}}) \quad (3.15)$$

Où  $\gamma_S$  est une énergie de surface et  $f$  une fonction adimensionnelle analytique, qui sont toutes deux identifiées grâce à la base de données, qu'on détaille plus loin. On cherche à définir, à partir de cet état réduit, un état macroscopique noté  $\underline{\mu}_{\text{macro}}$ , qui ne nécessite pas, pour être calculé, de connaître l'état mésoscopique complet. Pour cela, on reprend l'équation d'évolution mésoscopique (3.12) du modèle présenté en section 3.4.1, et on réduit l'information de la même manière que pour l'état mésoscopique réduit. Cela permet d'obtenir une loi d'évolution mésoscopique réduite (qui permet de calculer directement l'évolution de l'état réduit  $\underline{\mu}_{\text{meso}}$ ) :

$$\dot{\underline{\mu}}_{\text{meso}} = - \left( \frac{\gamma_S m(T)}{L_0^2} \frac{G(T)}{G(0)} \right) \underline{\Gamma}_{\text{meso}}(\underline{\alpha}) \cdot \frac{\partial f(\underline{\mu}_{\text{meso}})}{\partial \underline{\mu}} \quad (3.16)$$

Où l'on a introduit  $\underline{\Gamma}_{\text{meso}}$  une matrice de taille  $3 \times 3$  adimensionnelle, qu'on appelle mobilité réduite, et qui s'écrit :

$$\underline{\Gamma}_{\text{meso}} = \frac{\partial \underline{\mu}}{\partial \underline{w}} \cdot \underline{M}_{\text{meso}} \cdot \left( \frac{\partial \underline{\mu}}{\partial \underline{w}} \right)^T \quad (3.17)$$

On rappelle que toutes les quantités dimensionnées sont en facteur de l'équation d'évolution (3.16) ( $L_0$  (m) longueur physique pour la taille des grains,  $\gamma_S$  ( $\text{J.m}^{-2}$ ) énergie de surface pour les joints, et  $m(T)$  ( $\text{m}^4 \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ) facteur de mobilité introduit dans (3.9)).

On cherche à établir une loi d'évolution macroscopique, c'est-à-dire qui ne se réfère pas à l'état mésoscopique complet, mais uniquement à l'état réduit. La loi d'évolution (3.16) fait intervenir l'énergie totale adimensionnelle  $f(\underline{\mu}_{\text{meso}})$  et la mobilité réduite  $\underline{\Gamma}_{\text{meso}}$ , qui se calculent toutes deux à partir de l'état mésoscopique détaillé  $\underline{\alpha}$ . On cherche donc à identifier une bonne approximation de ces grandeurs, grâce à des variables, qui ne nécessitent pas la connaissance complète de la mésostructure. Plus précisément, cela signifie d'identifier  $f$  de telle sorte que l'on puisse évaluer  $f(\underline{\mu}_{\text{macro}})$  dans (3.15), et d'identifier une matrice de mobilité macroscopique  $\underline{\Gamma}_{\text{macro}}$ , qui ne dépende que de  $\underline{\mu}_{\text{macro}}$  telle que  $\underline{\Gamma}_{\text{macro}} \approx \underline{\Gamma}_{\text{meso}}$ . En pratique l'identification de  $\underline{\Gamma}_{\text{macro}}$  nécessite une variable d'état macroscopique supplémentaire (variable secondaire), pour normaliser les données et réduire leur dispersion, mais je fais l'impasse sur cette variable dans cette présentation par souci de concision et de clarté.

La base de données de calculs mésoscopiques compte initialement 19602 entrées, et permet d'identifier avec une très bonne précision, l'énergie totale en fonction des variables réduites (cf. figure 3.15, où chaque point représente un calcul à l'échelle mésoscopique), grâce à une fonction analytique déterministe :

$$f(\mu_0, \mu_1, \mu_2) = \kappa_1 \mu_0 \tilde{\mu}_1 \left( \kappa_2 - \log(\tilde{\mu}_1) - \frac{1}{2}(\tilde{\mu}_2 + 1) \right) \quad (3.18)$$

Où la forme de la fonction  $f$  est proposée grâce à une analyse asymptotique pour les faibles désorientations, et les coefficients  $\kappa_1, \kappa_2$  sont identifiés par minimisation entre la fonction d'énergie proposée et les points de la base de donnée.

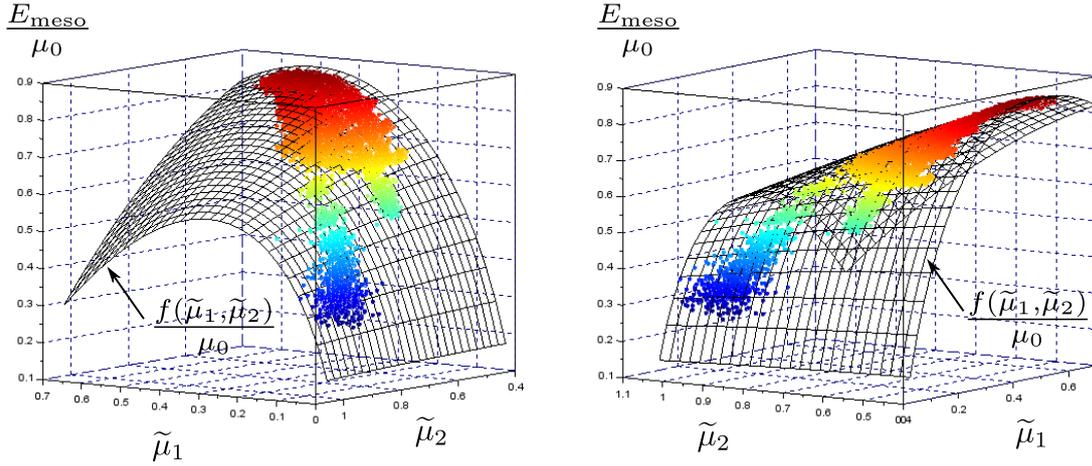


FIGURE 3.15 – Énergie totale adimensionnelle en fonction de l'état mésoscopique réduit.

Le principe est le même pour le tenseur de mobilité  $\Gamma_{\text{macro}}$  (c'est-à-dire pour le potentiel de dissipation), à ceci près que l'identification nécessite un cadre probabiliste par inférence Bayésienne du fait de la dispersion des données. On peut voir le modèle moyen et la dispersion des données normalisées à la figure 3.16 (cette normalisation fait intervenir la variable d'état secondaire que je n'ai pas présentée dans ce mémoire). Cette dispersion des données, traduit l'incertitude épistémique due à la réduction de données entre les échelles mésoscopique et macroscopique. Ainsi, on obtient un tenseur de mobilité, qui se comprend comme une variable aléatoire tensorielle, dont la loi de probabilité est issue de la calibration Bayésienne. Cela conduit à une loi d'évolution macroscopique stochastique, qui ne dépend pas de l'état mésoscopique détaillé, mais uniquement de l'état macroscopique initial et de la température.

Du point de vue pratique, la loi d'évolution du modèle macroscopique étant stochastique, on cherche à calculer l'évolution moyenne et la dispersion autour de la moyenne (écart-type) à chaque instant. On peut s'appuyer sur des méthodes spectrales pour optimiser le coût calculatoire, mais nous avons opté dans un premier temps pour une approche très simple, consistant à discrétiser l'équation par un schéma explicite, un grand nombre de fois avec des tirages différents pour les variables aléatoires impliquées dans la loi d'évolution. On calcule la moyenne et l'écart-type sur toutes ces évolutions à chaque instant. On obtient donc une enveloppe autour de l'évolution moyenne. À un même état macroscopique, correspondent une multitude d'état mésoscopiques différents, qui évoluent de manière indépendante. Comme cette information locale est perdue dans la modélisation macroscopique, l'enveloppe représente l'ensemble des possibles à partir d'un même état macroscopique initial. L'amplitude de cette enveloppe s'étend donc naturellement au cours du temps.

Pour tester le modèle macroscopique, nous avons généré quelques évolutions détaillées, grâce au modèle mésoscopique, ayant le même état macroscopique initial (cf. figure 3.17), et vérifié que l'enveloppe du modèle macroscopique probabiliste (définie ici par plus ou moins un écart-type) contenait les évolutions mésoscopiques, c'est-à-dire que chaque évolution mésoscopique se situe bien comme l'un des futurs possibles du point de vue macroscopique (cf. figure 3.18).

L'intérêt de cette approche est donc de permettre de calculer une évolution statistique assez détaillée de la mésostructure à l'échelle macroscopique où chaque point matériel représente un assemblage polycristallin différent. Le coût calculatoire étant très réduit, on peut simuler des pièces de grande taille soumises à des

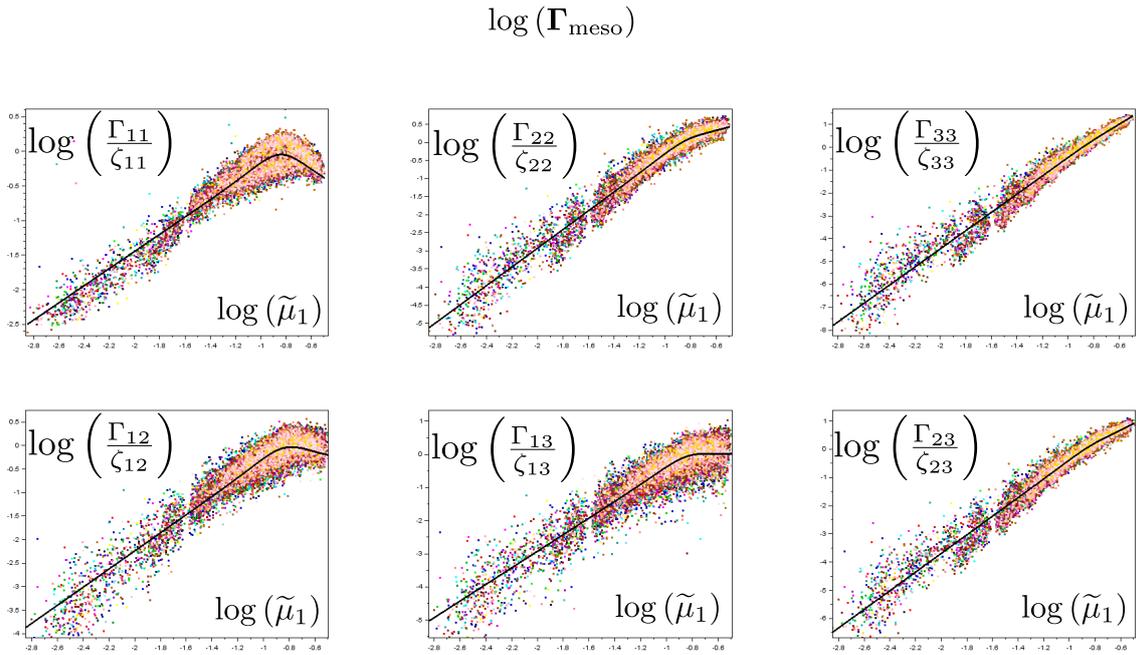


FIGURE 3.16 – Données du tenseur de mobilité adimensionnel normalisé.

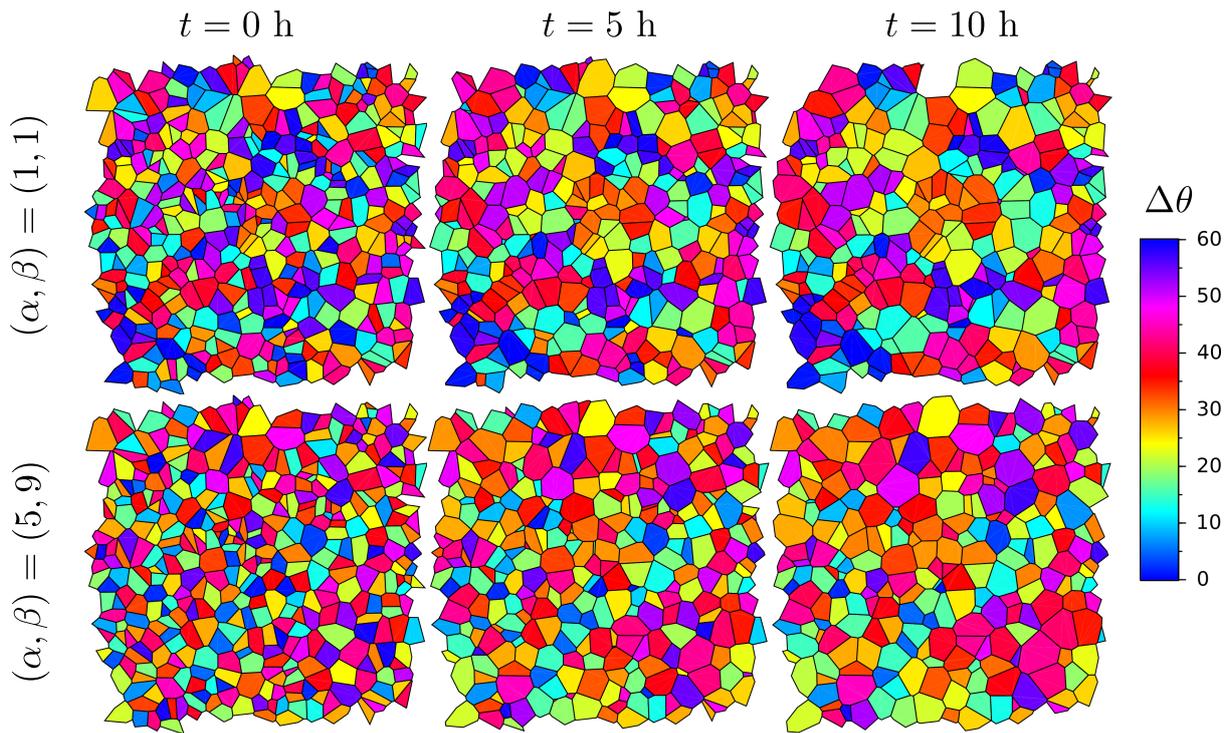


FIGURE 3.17 – Exemple d'évolution mésoscopique.

conditions thermiques hétérogènes. On obtient donc un champ de propriétés de taille et de désorientation des grains dans un domaine macroscopique.

L'approche que nous avons proposée sur un problème simple et extrêmement classique de croissance de grain, a permis de développer des idées originales et un formalisme nouveau dans ce contexte. Avec cette première tentative, nous avons mis au point une démarche, que je crois assez générale, permettant de remonter de manière économique et relativement détaillée certaines informations des échelles inférieures

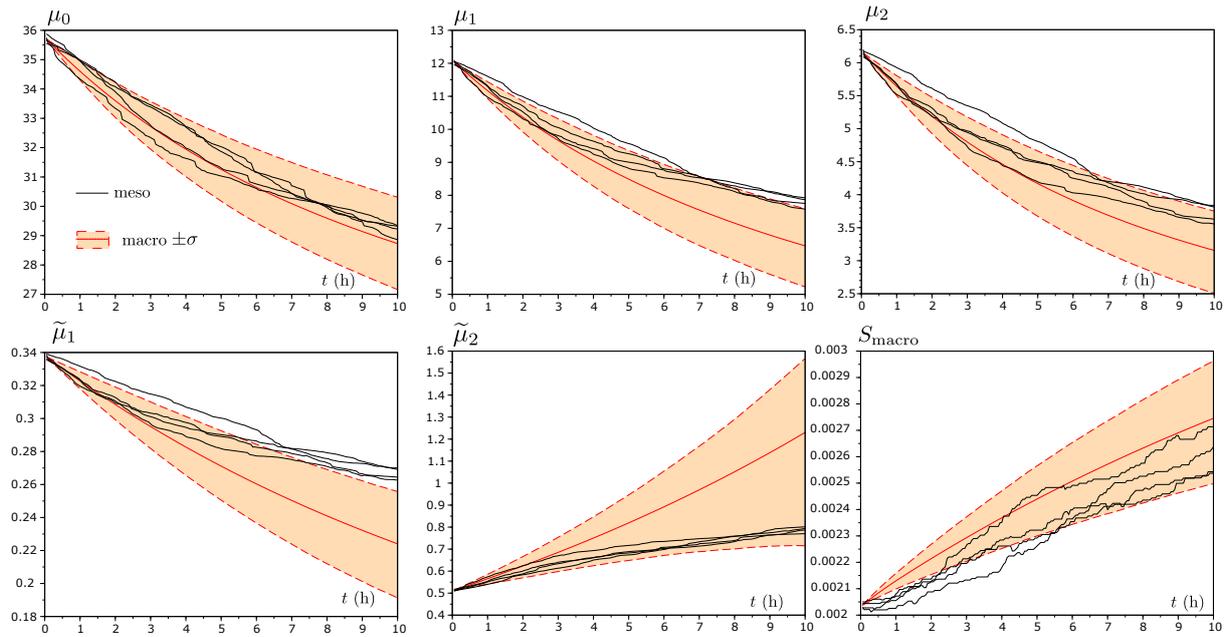


FIGURE 3.18 – Évolutions macroscopique et mésoscopiques réduites, pour les trois moments statistiques  $\mu_0, \mu_1, \mu_2$ , la moyenne et l'écart-type relatif de la GBCD  $\tilde{\mu}_1$  et  $\tilde{\mu}_2$ , et la surface moyenne des grains adimensionnelle notée  $S_{\text{macro}}$ .

jusqu'à l'échelle macroscopique. Ces travaux me semblent donc assez prometteurs sur le plan scientifique, notamment l'explicitation de l'incertitude épistémique dans le modèle, grâce à des statistiques Bayésiennes pour identifier le potentiel de dissipation. Ainsi, un travail continu sur ce sujet est nécessaire pour enrichir l'approche pour y intégrer notamment les aspects de recristallisation [208], qui requièrent à minima d'introduire les énergies volumiques des grains (en particulier due à la densité des dislocations) et les dissipations par plasticité cristalline. Un autre axe de développement tient aux transitions de phase, qui requièrent de plus d'introduire différentes énergies possibles selon les arrangements cristallins et des problèmes de diffusion d'éléments d'alliage, ce qui compliquera très nettement l'approche. On peut aussi creuser ces idées dans d'autres directions, comme la cristallisation depuis une phase liquide, la plasticité de transformation ou les phénomènes de fatigue, comme je le fait actuellement dans un certain nombre de projets, que je détaillerai en conclusion.

Sur le plan des applications, ce type d'approches, qui visent un coût calculatoire réduit à l'échelle macroscopique, est également intéressant. En effet, cela permet de rendre des informations importantes provenant des échelles inférieures, accessibles au calcul de structure macroscopique, ce qui est l'un des grands enjeux des simulations de procédés de fabrication et de mise en forme. Je me suis attelé en premier lieu aux procédés de fabrication additive métallique, pour lesquels le contrôle des microstructures est un problème important.

### 3.4.3 Application à la fabrication additive

*Cette section est liée à [117].*

Pour illustrer l'utilisation des modèles de croissance de grain à l'échelle mésoscopique (section 3.4.1) et à l'échelle macroscopique (section 3.4.1), je me suis intéressé à la croissance de grain pendant le procédé de fabrication additive DED, pour lequel j'ai proposé un modèle de thermique présenté en section 2.4.1. Je n'ai pas encore développé de modèle de solidification pour traiter la cristallisation du métal liquide. Bien sûr ce problème a déjà été traité en détails, mais j'ambitionne de développer une approche, qui repose sur des tessellations de Voronoi-Laguerre comme pour le modèle de croissance de grain à l'échelle mésoscopique, et d'en tirer une version macroscopique. Ce modèle de solidification nécessitera des ajustements significatifs par rapport au modèle de croissance de grain. Certes on conservera des énergies de surface (au niveau des joints et au niveau des interfaces entre les grains et le liquide), mais il faudra considérer l'énergie par unité de volume dans les grains et le liquide respectivement. En attendant de développer un tel modèle on peut déjà utiliser le modèle existant de croissance de grain en partant d'une mésostructure initiale qui ressemble

aux mésostructures qu'on obtient classiquement avec ce type de procédé de fabrication, c'est-à-dire des grains allongés dans une direction privilégiée avec des grains très fins aux interfaces entre les cordons (cf. figure 3.19 extraite de [209]).

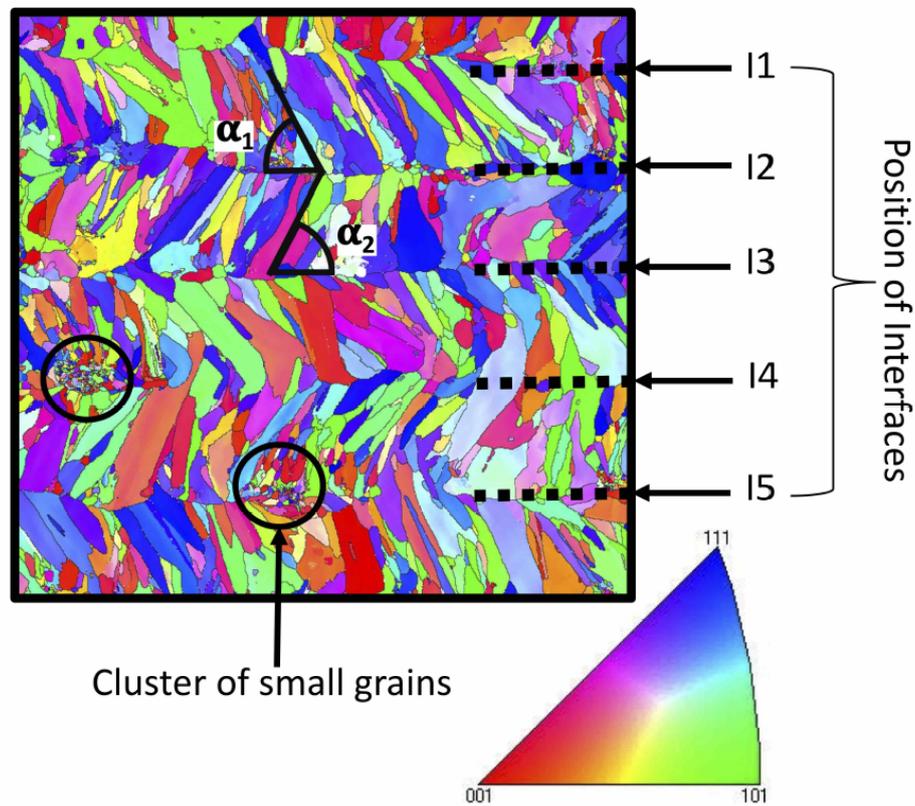


FIGURE 3.19 – Carte EBSD d'une mésostructure issue du procédé de fabrication additive DED.

Pour favoriser la croissance des grains, j'ai considéré un cas de calcul thermique où la température du substrat est maintenue à une valeur relativement élevée (800 K) en imaginant un mécanisme de contrôle asservi. À la figure 3.20, on peut voir les cycles thermiques, pour un point de matière dans le premier cordon posé sur le substrat. Pour effectuer le calcul de l'évolution de la mésostructure, j'ai posé une mobilité de joint de grain, qui dépend de la température en suivant une loi d'Arrhenius. À la figure 3.20, on voit l'évolution de la mésostructure détaillée à certains instants. L'effet de la mobilité des grains est principalement de réduire le nombre de grains aux interfaces entre les cordons. Ce calcul à l'échelle mésoscopique est suffisamment rapide pour être mené en quelques points de la structure, mais trop long pour être reproduit en chaque point matériel de la pièce fabriquée. Pour cela on utilise le modèle à l'échelle macroscopique, qui est beaucoup plus rapide. Par exemple, les figures 3.21 et 3.22 donnent l'évolution de la moyenne et de l'écart-type relatif de la GBCD au cours du temps pour un point matériel dans le premier cordon. On voit une évolution rapide à chaque passage de laser, c'est-à-dire à chaque pic de température. Cela est dû à l'augmentation très significative de la mobilité pour les hautes températures. Par ailleurs, le fait que le substrat soit maintenu à haute température permet de faire évoluer la mésostructure sur toute la durée de la fabrication.

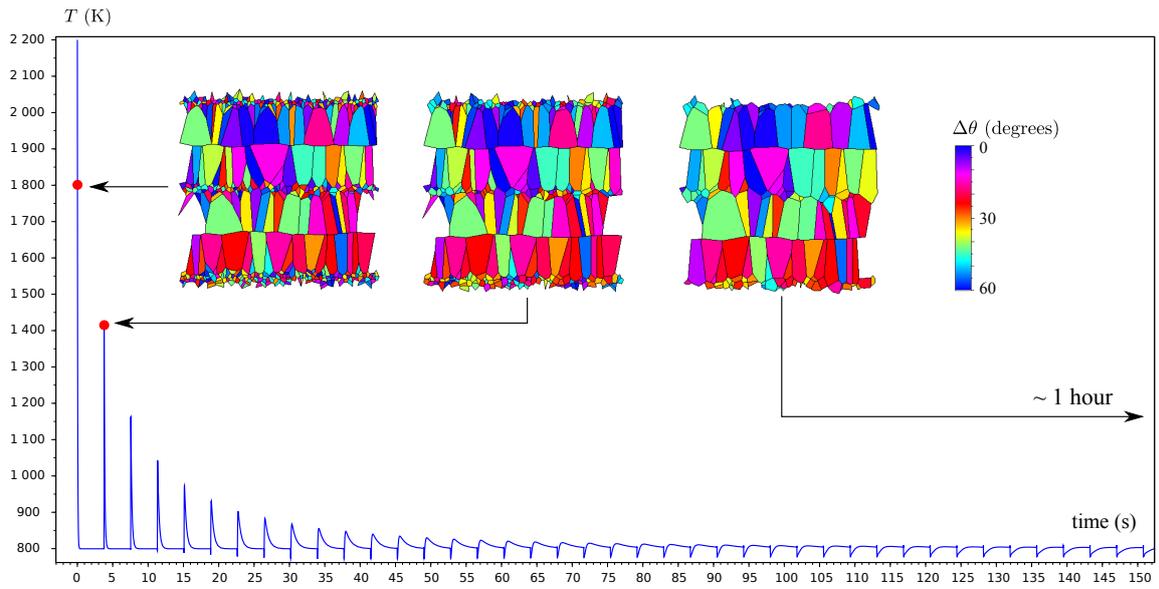


FIGURE 3.20 – Évolution de la mésostructure pendant les cycles thermiques, avec contrôle de la température du substrat.

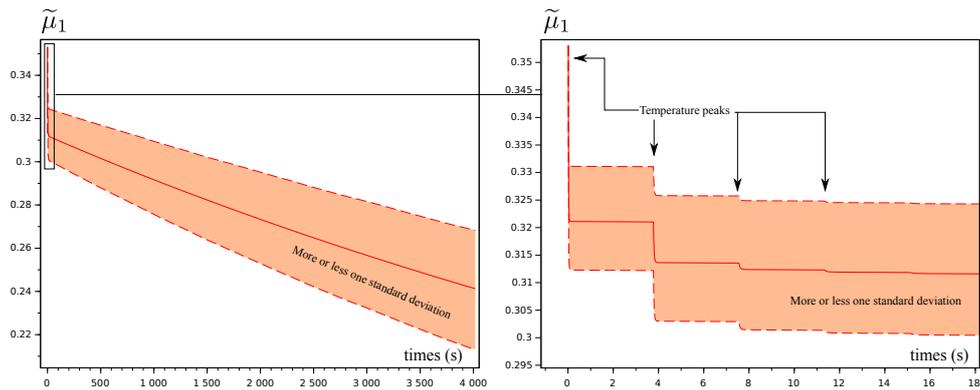


FIGURE 3.21 – Moyenne de la GBCD  $\tilde{\mu}_1$  (radians), avec contrôle de la température du substrat.

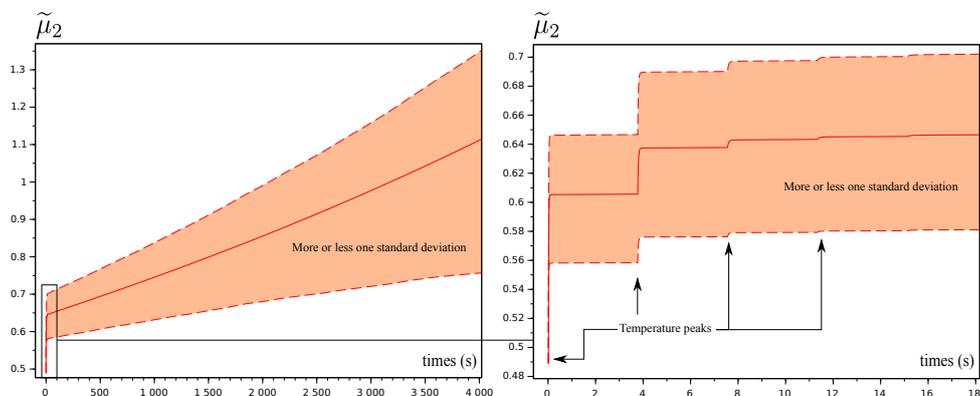


FIGURE 3.22 – Écart-type relatif de la GBCD  $\tilde{\mu}_2$  (sans dimension), avec contrôle de la température du substrat.

## Publications de l'axe 3

- [108] Joffrey Bluthé, Daniel **Weisz-Patrault**, and Alain Ehrlicher. Energetic approach for a sliding inclusion accounting for plastic dissipation at the interface, application to phase nucleation. International Journal of Solids and Structures, 121 :163–173, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2017.05.023>.
- [109] Daniel **Weisz-Patrault**. Multiphase model for transformation induced plasticity. Extended Leblonds model. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 106 :152–175, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.05.019>.
- [110] Daniel **Weisz-Patrault**. Experimental validation of the multiphase extended Leblonds model. In AIP Conference Proceedings, volume 1896, page 160017. AIP Publishing LLC, 2017. <https://doi.org/10.1063/1.5008192>.
- [111] Daniel **Weisz-Patrault**, Sofia Sakout, and Alain Ehrlicher. Fast simulation of grain growth based on Orientated Tessellation Updating Method. In 24 ème Congrès Français de Mécanique, 2019.
- [112] Daniel **Weisz-Patrault**, Sofia Sakout, and Alain Ehrlicher. Fast mesoscopic simulation of grain growth and macroscopic modeling. In AIP Conference Proceedings, volume 2293, page 110007. AIP Publishing LLC, 2020. <https://doi.org/10.1063/5.0026505>.
- [113] Daniel **Weisz-Patrault**, Sofia Sakout, and Alain Ehrlicher. Fast simulation of grain growth based on Orientated Tessellation Updating Method. Mechanics & Industry, 21(5) :513, 2020. <https://doi.org/10.1051/meca/2020041>.
- [114] Sofia Sakout, Daniel **Weisz-Patrault**, and Alain Ehrlicher. Energetic upscaling strategy for grain growth. I : Fast mesoscopic model based on dissipation. Acta Materialia, 196 :261–279, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.06.032>.
- [115] Daniel **Weisz-Patrault**, Sofia Sakout, and Alain Ehrlicher. Energetic upscaling strategy for grain growth. II : Probabilistic macroscopic model identified by Bayesian techniques. Acta Materialia, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116805>.
- [116] Daniel **Weisz-Patrault**. Database upscaling strategy for grain growth. Mendeley Data, 2020. <https://doi.org/10.17632/5km6mktmx4.1>.
- [117] Daniel **Weisz-Patrault**, Sofia Sakout, and Alain Ehrlicher. Fast simulation of temperature and grain growth in directed energy deposition additive manufacturing. In 14th World Congress on Computational Mechanics, volume 1, page 2748. ECCOMAS Congress, 2020.

## Références de l'axe 3

- [118] John D Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. In Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, volume 241, pages 376–396. The Royal Society, 1957.
- [119] T. Mura, T. Mori, and M. Kato. The elastic field caused by a general ellipsoidal inclusion and the application to martensite formation . Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 24(5) :305 – 318, 1976.
- [120] Yasunori Saotome and Nobuhiro Iguchi. In-situ microstructural observations and micro-grid analyses of transformation superplasticity in pure iron. Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan, 27 (9) :696–704, 1987.
- [121] Jin H Huang, R Furuhashi, and T Mura. Frictional sliding inclusions. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 41(2) :247–265, 1993.
- [122] CQ Ru. A circular inclusion with circumferentially inhomogeneous sliding interface in plane elastostatics. Journal of applied mechanics, 65(1) :30–38, 1998.

- [123] Z Zhong and SA Meguid. On the elastic field of a spherical inhomogeneity with an imperfectly bonded interface. Journal of elasticity, 46(2) :91–113, 1997.
- [124] Astrid Lambert-Perlade, Anne-Françoise Gourgues, and André Pineau. Austenite to bainite phase transformation in the heat-affected zone of a high strength low alloy steel. Acta Materialia, 52(8) : 2337–2348, 2004.
- [125] E Tsuchida, T Mura, and J Dundurs. The elastic field of an elliptic inclusion with a slipping interface. Journal of applied mechanics, 53(1) :103–107, 1986.
- [126] T. Mura, I. Jasiuk, and B. Tsuchida. The stress field of a sliding inclusion. International Journal of Solids and Structures, 21(12) :1165 – 1179, 1985.
- [127] It Jasiuk, E Tsuchida, and T Mura. The sliding inclusion under shear. International journal of solids and structures, 23(10) :1373–1385, 1987.
- [128] B Fedelich and A Ehrlacher. An analysis of stability of equilibrium and of quasi-static transformations on the basis of the dissipation function. European journal of mechanics. A. Solids, 16(5) :833–855, 1997.
- [129] Alexander Mielke. Energetic formulation of multiplicative elasto-plasticity using dissipation distances. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 15(4) :351–382, 2003.
- [130] N.I. Muskhelishvili. Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity. Noordhoff International Publishing, Groningen, 1953. 2nd edition (1977).
- [131] Jean-Baptiste Leblond, G Mottet, and JC Devaux. A theoretical and numerical approach to the plastic behaviour of steels during phase transformations i. derivation of general relations. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 34(4) :395–409, 1986.
- [132] Jean-Baptiste Leblond, G Mottet, and JC Devaux. A theoretical and numerical approach to the plastic behaviour of steels during phase transformations ii. study of classical plasticity for ideal-plastic phases. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 34(4) :411–432, 1986.
- [133] Jean-Baptiste Leblond, J Devaux, and JC Devaux. Mathematical modelling of transformation plasticity in steels i : case of ideal-plastic phases. International journal of plasticity, 5(6) :551–572, 1989.
- [134] Jean-Baptiste Leblond. Mathematical modelling of transformation plasticity in steels ii : coupling with strain hardening phenomena. International journal of plasticity, 5(6) :573–591, 1989.
- [135] JM Bergheau and JB Leblond. Coupling between heat flow, metallurgy and stress-strain computations in steels-the approach developed in the computer code sysweld for welding or quenching. Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes V, pages 203–210, 1991.
- [136] SK Bate, R Charles, and A Warren. Finite element analysis of a single bead-on-plate specimen using sysweld. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 86(1) :73–78, 2009.
- [137] JJ Xu, Philippe Gilles, YG Duan, and C Yu. Temperature and residual stress simulations of the net single-bead-on-plate specimen using sysweld. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 99 :51–60, 2012.
- [138] Myoung-Gyu Lee, Sung-Joon Kim, Heung Nam Han, and Woo Chang Jeong. Implicit finite element formulations for multi-phase transformation in high carbon steel. International Journal of Plasticity, 25(9) :1726–1758, 2009.
- [139] Juwan Kim, Seyoung Im, and Hyun-Gyu Kim. Numerical implementation of a thermo-elastic-plastic constitutive equation in consideration of transformation plasticity in welding. International journal of plasticity, 21(7) :1383–1408, 2005.
- [140] JM Diani, H Sabar, and M Berveiller. Micromechanical modelling of the transformation induced plasticity (trip) phenomenon in steels. International Journal of Engineering Science, 33(13) :1921–1934, 1995.

- [141] FD Fischer, ER Oberaigner, K Tanaka, and F Nishimura. Transformation induced plasticity revised an updated formulation. International Journal of Solids and Structures, 35(18) :2209–2227, 1998.
- [142] Lakhdar Taleb and François Sidoroff. A micromechanical modeling of the greenwood–johnson mechanism in transformation induced plasticity. International Journal of Plasticity, 19(10) :1821–1842, 2003.
- [143] Håkan Hallberg, Paul Håkansson, and Matti Ristinmaa. A constitutive model for the formation of martensite in austenitic steels under large strain plasticity. International Journal of Plasticity, 23(7) :1213–1239, 2007.
- [144] Rolf Mahnken, Andreas Schneidt, and Thomas Antretter. Macro modelling and homogenization for transformation induced plasticity of a low-alloy steel. International Journal of Plasticity, 25(2) :183–204, 2009.
- [145] Fabrice Barbe, Romain Quey, and Lakhdar Taleb. Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. case of a cubic array of nuclei. European Journal of Mechanics-A/Solids, 26(4) :611–625, 2007.
- [146] Takayuki Otsuka. Modélisation micromécanique de la plasticité de transformation dans les aciers par homogénéisation numérique fondée sur la TFR. PhD thesis, Paris 13, 2014.
- [147] Tim Van Rompaey, Frederic Lani, Bart Blanpain, Patrick Wollants, Pascal J Jacques, and Thomas Pardoen. Three-dimensional computational-cell modeling of the micromechanics of the martensitic transformation in transformation-induced-plasticity-assisted multiphase steels. Metallurgical and Materials Transactions A, 37(1) :99–107, 2006.
- [148] L Delannay, I Doghri, and O Pierard. Prediction of tension–compression cycles in multiphase steel using a modified incremental mean-field model. International Journal of Solids and Structures, 44(22) :7291–7306, 2007.
- [149] L Delannay, P Jacques, and T Pardoen. Modelling of the plastic flow of trip-aided multiphase steel based on an incremental mean-field approach. International Journal of Solids and Structures, 45(6) :1825–1843, 2008.
- [150] Ankit Srivastava, Hassan Ghassemi-Armaki, Hyokyung Sung, Peng Chen, Sharvan Kumar, and Allan F Bower. Micromechanics of plastic deformation and phase transformation in a three-phase trip-assisted advanced high strength steel : Experiments and modeling. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 78 :46–69, 2015.
- [151] Youssri El Majaty, Jean-Baptiste Leblond, and Djimedo Kondo. A novel treatment of greenwood–johnsons mechanism of transformation plasticity-case of spherical growth of nuclei of daughter-phase. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 121 :175–197, 2018.
- [152] Lakhdar Taleb, Nathalie Cavallo, and François Waeckel. Experimental analysis of transformation plasticity. International Journal of Plasticity, 17(1) :1–20, 2001.
- [153] Michel Coret, S Calloch, and Alain Combescure. Experimental study of the phase transformation plasticity of 16mnd5 low carbon steel under multiaxial loading. International Journal of plasticity, 18(12) :1707–1727, 2002.
- [154] Michel Coret, S Calloch, and Alain Combescure. Experimental study of the phase transformation plasticity of 16mnd5 low carbon steel induced by proportional and nonproportional biaxial loading paths. European Journal of Mechanics-A/Solids, 23(5) :823–842, 2004.
- [155] S Petit-Grostabussiat, Lakhdar Taleb, and Jean-François Jullien. Experimental results on classical plasticity of steels subjected to structural transformations. International Journal of Plasticity, 20(8) :1371–1386, 2004.
- [156] Lakhdar Taleb and Sophie Petit. New investigations on transformation induced plasticity and its interaction with classical plasticity. International journal of plasticity, 22(1) :110–130, 2006.

- [157] GW Greenwood and RH Johnson. The deformation of metals under small stresses during phase transformations. In Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, volume 283, pages 403–422. The Royal Society, 1965.
- [158] Christopher Lyman Magee and Harold W Paxton. Transformation kinetics, microplasticity and aging of martensite in fe-31 ni. Technical report, DTIC Document, 1966.
- [159] Youssri El Majaty, Renald Brenner, and Jean-Baptiste Leblond. Fft-based micromechanical simulations of transformation plasticity. comparison with a limit-analysis-based theory. European Journal of Mechanics-A/Solids, 86 :104152, 2021.
- [160] Daniel Kandel and Eytan Domany. Rigorous derivation of domain growth kinetics without conservation laws. Journal of Statistical Physics, 58(3-4) :685–706, 1990.
- [161] Elizabeth A Holm, Gregory N Hassold, and Mark A Miodownik. On misorientation distribution evolution during anisotropic grain growth. Acta Materialia, 49(15) :2981–2991, 2001.
- [162] Elizabeth A Holm, Mark A Miodownik, and Anthony D Rollett. On abnormal subgrain growth and the origin of recrystallization nuclei. Acta Materialia, 51(9) :2701–2716, 2003.
- [163] J Gruber, HM Miller, TD Hoffmann, GS Rohrer, and AD Rollett. Misorientation texture development during grain growth. part i : Simulation and experiment. Acta Materialia, 57(20) :6102–6112, 2009.
- [164] Liangzhe Zhang, Anthony D Rollett, Timothy Bartel, Di Wu, and Mark T Lusk. A calibrated Monte Carlo approach to quantify the impacts of misorientation and different driving forces on texture development. Acta Materialia, 60(3) :1201–1210, 2012.
- [165] Andrew Kuprat, Denise George, Galen Straub, and Melik C Demirel. Modeling microstructure evolution in three dimensions with grain3d and lagrit. Computational Materials Science, 28(2) :199–208, 2003.
- [166] Jason Gruber, Denise C George, Andrew P Kuprat, Gregory S Rohrer, and Anthony D Rollett. Effect of anisotropic grain boundary properties on grain boundary plane distributions during grain growth. Scripta materialia, 53(3) :351–355, 2005.
- [167] Marc Bernacki, Roland E Logé, and Thierry Coupez. Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. Scripta Materialia, 64(6) : 525–528, 2011.
- [168] Håkan Hallberg. Influence of anisotropic grain boundary properties on the evolution of grain boundary character distribution during grain growth a 2d level set study. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 22(8) :085005, 2014.
- [169] Benjamin Scholtes, Romain Boulais-Sinou, Amico Settefrati, Daniel Pino Muñoz, Isabelle Poitroult, Aurore Montouchet, Nathalie Bozzolo, and Marc Bernacki. 3d level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. Computational Materials Science, 122 :57–71, 2016.
- [170] Julien Fausty, Nathalie Bozzolo, and Marc Bernacki. A 2d level set finite element grain coarsening study with heterogeneous grain boundary energies. Applied Mathematical Modelling, 78 :505–518, 2020.
- [171] N Ma, A Kazaryan, SA Dregia, and Y Wang. Computer simulation of texture evolution during grain growth : effect of boundary properties and initial microstructure. Acta Materialia, 52(13) :3869–3879, 2004.
- [172] CE Krill III and L-Q Chen. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model. Acta materialia, 50(12) :3059–3075, 2002.
- [173] Liesbeth Vanherpe, Nele Moelans, Bart Blanpain, and Stefan Vandewalle. Bounding box framework for efficient phase field simulation of grain growth in anisotropic systems. Computational Materials Science, 50(7) :2221–2231, 2011.
- [174] Robert I Saye and James A Sethian. The voronoi implicit interface method for computing multiphase physics. Proceedings of the National Academy of Sciences, 108(49) :19498–19503, 2011.

- [175] Guillaume Abrevard, Esteban P Busso, Samuel Forest, and Benoit Appolaire. Phase field modelling of grain boundary motion driven by curvature and stored energy gradients. part i : theory and numerical implementation. Philosophical magazine, 92(28-30) :3618–3642, 2012.
- [176] Guillaume Abrevard, Esteban P Busso, Samuel Forest, and Benoit Appolaire. Phase field modelling of grain boundary motion driven by curvature and stored energy gradients. part ii : application to recrystallisation. Philosophical magazine, 92(28-30) :3643–3664, 2012.
- [177] Kunok Chang and Nele Moelans. Effect of grain boundary energy anisotropy on highly textured grain structures studied by phase-field simulations. Acta Materialia, 64 :443–454, 2014.
- [178] M Upmanyu, DJ Srolovitz, LS Shvindlerman, and G Gottstein. Misorientation dependence of intrinsic grain boundary mobility : simulation and experiment. Acta materialia, 47(14) :3901–3914, 1999.
- [179] M Upmanyu, DJ Srolovitz, LS Shvindlerman, and G Gottstein. Molecular dynamics simulation of triple junction migration. Acta materialia, 50(6) :1405–1420, 2002.
- [180] M Upmanyu, David J Srolovitz, AE Lobkovsky, James A Warren, and WC Carter. Simultaneous grain boundary migration and grain rotation. Acta Materialia, 54(7) :1707–1719, 2006.
- [181] FJ Humphreys. Modelling mechanisms and microstructures of recrystallisation. Materials Science and Technology, 8(2) :135–144, 1992.
- [182] Fumihiko Wakai, Naoya Enomoto, and Hiroshi Ogawa. Three-dimensional microstructural evolution in ideal grain growth general statistics. Acta Materialia, 48(6) :1297–1311, 2000.
- [183] M Syha and D Weygand. A generalized vertex dynamics model for grain growth in three dimensions. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18(1) :015010, 2009.
- [184] Alexander Vondrous, Mathias Reichardt, and Britta Nestler. Growth rate distributions for regular two-dimensional grains with ReadShockley grain boundary energy. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 22(2) :025014, 2014.
- [185] Hubert Telley, Th M Liebling, Alain Mocellin, and Franco Righetti. Simulating and modelling grain growth as the motion of a weighted voronoi diagram. In Materials Science Forum, volume 94, pages 301–306. Trans Tech Publ, 1992.
- [186] E Schüle. A justification of the hillert distribution by spatial grain growth simulation performed by modifications of laguerre tessellations. Computational materials science, 5(4) :277–285, 1996.
- [187] Romain Quey, PR Dawson, and Fabrice Barbe. Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 200(17-20) :1729–1745, 2011.
- [188] Dieter Wolf. A Read-Shockley model for high-angle grain boundaries. Scripta Metallurgica, 23(10) : 1713–1718, 1989.
- [189] Y Huang and FJ Humphreys. Transient dynamic recrystallization in an aluminium alloy subjected to large reductions in strain rate. Acta materialia, 45(11) :4491–4503, 1997.
- [190] Maurizio Brocato, Alain Ehrlacher, and Philippe Tamagny. Détermination de la dissipation caractéristique dans la propagation d’un front de recristallisation. Comptes Rendus de l’Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy, 327(2-3) :179–184, 1999.
- [191] Maurizio Brocato, Alain Ehrlacher, and Philippe Tamagny. Stability of discontinuities in polycrystals. Waves and Stability in Continuous Media, page 57, 1999.
- [192] John Von Neumann. Metal interfaces. American Society for Metals, Cleveland, 108, 1952.
- [193] W. W. Mullins. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries. Journal of Applied Physics, 27 : 900–904, 1956.

- [194] D Moldovan, D Wolf, SR Phillpot, and AJ Haslam. Mesoscopic simulation of two-dimensional grain growth with anisotropic grain-boundary properties. Philosophical Magazine A, 82(7) :1271–1297, 2002.
- [195] M Hillert. On the theory of normal and abnormal grain growth. Acta metallurgica, 13(3) :227–238, 1965.
- [196] PR Rios. Comparison between a computer simulated and an analytical grain size distribution. Scripta materialia, 40(6) :665–668, 1999.
- [197] W Fayad, CV Thompson, and HJ Frost. Steady-state grain-size distributions resulting from grain growth in two dimensions. Scripta materialia, 40(10) :1199–1204, 1999.
- [198] Jin Zhang, Yubin Zhang, Wolfgang Ludwig, David Rowenhorst, Peter W Voorhees, and Henning F Poulsen. Three-dimensional grain growth in pure iron. part i. statistics on the grain level. Acta Materialia, 156 :76–85, 2018.
- [199] JE Burke. Some factors affecting the rate of grain growth in metals. Aime Trans, 180 :73–91, 1949.
- [200] JE Burke and D Turnbull. Prog. metal phys.(eds) b chalmers and r king, 1952.
- [201] FJ Humphreys. A unified theory of recovery, recrystallization and grain growth, based on the stability and growth of cellular microstructuresI. the basic model. Acta Materialia, 45(10) :4231–4240, 1997.
- [202] AD Rollett and WW Mullins. On the growth of abnormal grains. Scripta materialia, 36(9), 1997.
- [203] FD Fischer, J Svoboda, and P Fratzl. A thermodynamic approach to grain growth and coarsening. Philosophical Magazine, 83(9) :1075–1093, 2003.
- [204] J Svoboda and FD Fischer. A new approach to modelling of non-steady grain growth. Acta materialia, 55(13) :4467–4474, 2007.
- [205] FD Fischer, J Svoboda, and H Petryk. Thermodynamic extremal principles for irreversible processes in materials science. Acta materialia, 67 :1–20, 2014.
- [206] David Piot, Guillaume Smagghe, John Joseph Jonas, Christophe Desrayaud, Frank Montheillet, Gilles Perrin, Aurore Montouchet, and Guillaume Kermouche. A semitopological mean-field model of discontinuous dynamic recrystallization. Journal of materials science, 53(11) :8554–8566, 2018.
- [207] I Yegorov and M Emelianenko. A kinetic approach to modeling general-texture evolution in two-dimensional polycrystalline grain growth. Computational Materials Science, 125 :224–242, 2016.
- [208] Ke Huang and RE Logé. A review of dynamic recrystallization phenomena in metallic materials. Materials & Design, 111 :548–574, 2016.
- [209] Yanis Balit, Eric Charkaluk, and Andrei Constantinescu. Digital image correlation for microstructural analysis of deformation pattern in additively manufactured 316l thin walls. Additive Manufacturing, 31 :100862, 2020.



## Axe 4

# Identification de comportements en dynamique

### Contents

---

4.1 Introduction .....	76
4.2 Identification du comportement de joints collés .....	76
4.3 Identification Bayésienne des incertitudes .....	80

---

## 4.1 Introduction

Je me suis intéressé aux aspects dynamiques de la mécanique des matériaux en arrivant au LMS, où j’ai partagé le bureau de Gérard Gary (LMS, École Polytechnique), qui m’a introduit aux barres d’Hopkinson, dont il est un expert reconnu. La dynamique n’entre pas dans la démarche générale du reste de mon travail sur les contraintes résiduelles et l’évolution de la microstructure dans les procédés, et me permet ainsi d’explorer des sujets moins centrés sur une perspective commune, mais ayant en commun un montage expérimental. Ce dernier est constitué de deux barres, entre lesquelles se situe un échantillon. Un impacteur permet de solliciter dynamiquement l’une des barres, qui transmet une onde de compression, qui génère au niveau de l’échantillon, une onde réfléchie et une onde transmise dans la seconde barre. Grâce à la mesure des ondes incidente, réfléchie et transmise, on déduit par des modèles très simples les forces et déplacements au droit de l’échantillon. L’analyse des signaux issus de ce système de mesure initié par les travaux de Kolsky [214] a été considérablement améliorée au cours des années [215–223] pour prendre en compte la friction au niveau des interfaces entre l’échantillon et les barres, l’effet de poinçonnement des barres par l’échantillon, la dispersion des ondes due aux effets tridimensionnels ou l’introduction de techniques de déconvolution pour les tests longs ou avec des barres visco-élastiques.

Je me suis donc intéressé à un axe de recherche portant sur l’identification en dynamique aux barres d’Hopkinson du comportement des matériaux ou d’assemblages. Le premier sujet, sur lequel je me suis investi dans ce domaine, tient à la thèse CIFRE (Safran Composite) d’Anthony Janin, que j’ai co-encadrée avec Andrei Constantinescu (LMS, École Polytechnique). J’ai développé depuis les aspects de caractérisation matériaux en dynamique en considérant les incertitudes cumulées dans le dépouillement des mesures, dans le cadre du post-doctorat de Charles Francart financé par le CEA.

## 4.2 Identification du comportement de joints collés

*Cette section est liée à [210–212].*

La thèse d’Anthony Janin est un travail sur la caractérisation du comportement en dynamique et des caractéristiques de rupture d’un assemblage collé pour l’industrie aéronautique. Le potentiel des assemblages collés dans ce domaine est considérable dans la mesure où cela permettrait d’éviter des assemblages par rivetage et d’alléger les appareils. L’enjeu est de caractériser le comportement en dynamique du joint de colle, alors que l’outil de mesure (les barres d’Hopkinson) ne donne accès qu’à une information très globale (déplacements et forces au droit de l’échantillon). Ainsi les barres ne permettent de caractériser que la structure collée, comme dans un certain nombre d’études [224–226], et non le joint de colle lui-même. Il s’agit d’un aspect important, car les calculs prédictifs pour concevoir les structures en aéronautique nécessitent des modèles de comportement pour les joints et non le comportement apparent d’une structure collée. Par ailleurs, si des travaux portent sur la caractérisation des joints dans un régime de sollicitation en quasi-statique [227, 228], les quelques études en régime dynamique ont été menées sur des échantillons plats simples (*single-lap joint* et *double-lap joint*) [224–226], qui ne permettent d’investiguer que le comportement en cisaillement des joints.

Le premier aspect de ce travail a donc été de développer des conditions d’essais et un nouvel échantillon permettant de tester en dynamique le joint de colle sous différents types de sollicitations. En effet, si quelques essais avaient été réalisés en adaptant le montage des barres d’Hopkinson pour réaliser des chargements sous torsion [229] ou en tension [230], chaque montage expérimental ne permettait d’explorer qu’un unique état de contrainte. L’alternative que nous avons choisie est donc de concevoir un échantillon nouveau pour être testé avec le montage classique des barres d’Hopkinson en compression, et qui permette de réaliser différents états de chargement multiaxiaux. Pour cela, parmi de nombreux types d’échantillons conçus pour identifier la ténacité des matériaux homogènes (et non des assemblages collés) [231–234], nous avons adapté le disque brésilien [235, 236]. Dans un régime quasi-statique, un échantillon inspiré du disque brésilien a été proposé pour les assemblages collés [237, 238] (disque sandwich). Cet échantillon permet de réaliser une infinité de chargements multiaxiaux différents en orientant l’échantillon dans la machine d’essai. Cependant un disque s’adapte mal aux barres d’Hopkinson pour le régime dynamique, car le contact entre les barres n’est pas assez franc. Ainsi, les différents états de contrainte pour solliciter le joint ont été obtenus en développant un échantillon sandwich constitué de deux demi-dodécagones en aluminium collés, permettant trois orientations différentes de chargement pour les essais aux barres (cf. figure 4.1b). Par ailleurs, des “becs” sont ajoutés pour limiter les effets de bords. Une procédure de préparation des surfaces, de collage et

de polissage (cf. figure 4.2a) permet d'obtenir des échantillons identiques dans de bonnes tolérances.

Le second aspect important est de permettre une analyse locale pour identifier les caractéristiques du joint de colle. En effet, en plus de l'information globale apportée par le système des barres d'Hopkinson, des mesures locales ont été produites en ajoutant une caméra rapide (cf. figure 4.1a) et un mouchetis sur l'échantillon pour mesurer le champ de déplacement autour du joint par corrélation digitale d'images (DIC) [230, 239–243]. Les limites technologiques contraignent à un compromis entre la résolution des images et la fréquence d'acquisition. En optimisant les mouchetis [244], réalisés à l'aérographe et en choisissant un éclairage flash pour fournir suffisamment de lumière pendant la courte durée de l'essai, nous avons obtenu une résolution micrométrique avec une fréquence d'acquisition suffisante pour suivre la déformation au cours des tests (cf. figure 4.2b).

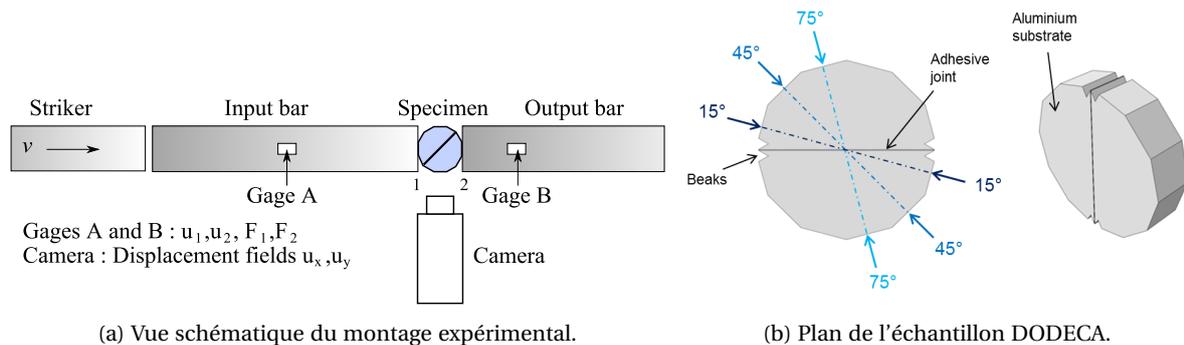


FIGURE 4.1 – Schémas de conception du dispositif expérimental.

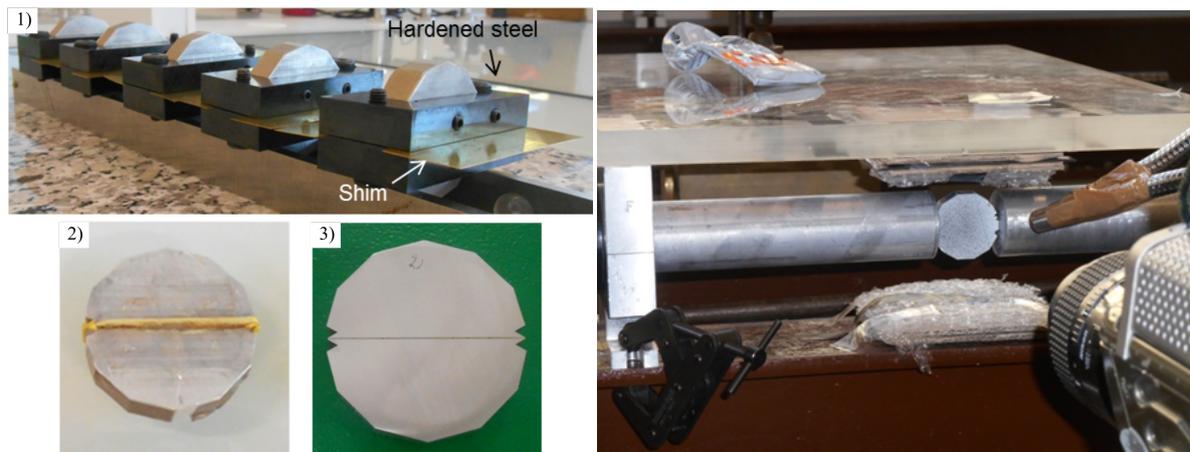
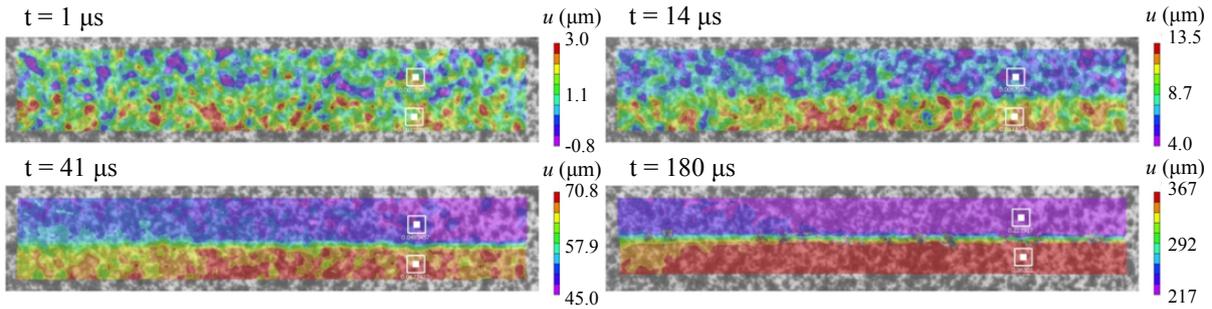


FIGURE 4.2 – Dispositif expérimental.

Les résultats de la corrélation d'image sont présentés au cours du temps à la figure 4.3. Le joint est trop fin pour que l'on puisse mesurer précisément les déplacements dans son épaisseur. En revanche, on peut mesurer précisément, les déplacements tangentiels et normaux dans les substrats de part et d'autre du joint. Cette information assez locale permet d'identifier les sauts de déplacement en cisaillement et en tension subis par le joint, et ainsi d'identifier la déformation dans le joint. Sur cette base et moyennant quelques approximations, on peut sans faire de calcul inverse, identifier un comportement approximatif du joint (cf. figure 4.4) en utilisant uniquement les données expérimentales disponibles. Bien sûr, ce comportement apparent du joint ne dispense pas d'établir un modèle inverse pour caractériser un modèle de comportement.

Nous avons donc développé une méthode inverse pour identifier le comportement du joint de colle. Il s'agit d'un sujet très étudié pour diverses applications [245–253]. Parmi plusieurs approches bien établies

### Horizontal displacement U



### Vertical displacement V

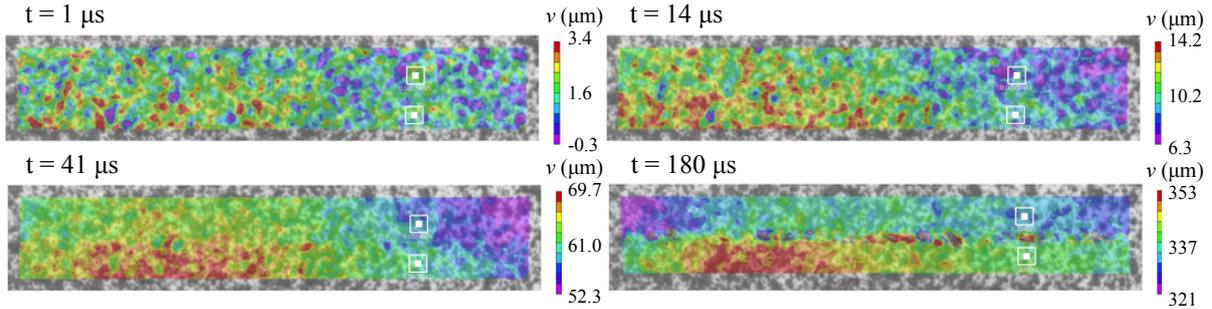
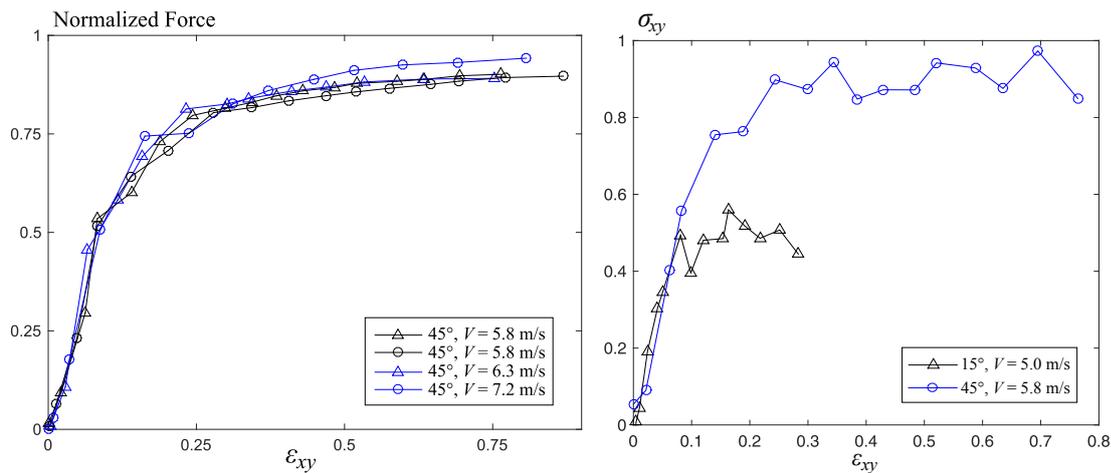


FIGURE 4.3 – Champs de déplacements obtenus par corrélation.



(a) Force normalisée en fonction de la déformation en cisaillement pour le cas à 45° et différents essais.

(b) Comportement approximatif pour deux angles d'impact différents.

FIGURE 4.4 – Comportement du joint.

[254, 255], nous nous sommes orientés vers une méthode inverse par mise à jour de calculs aux éléments finis (*finite element model updating method* (FEMU)). Il s'agit simplement de simuler l'essai grâce à un modèle aux éléments finis, qui prend en entrée les paramètres constitutifs du comportement du joint de colle. On tente ensuite d'optimiser le comportement du joint de sorte à minimiser l'écart entre les mesures et les résultats du calcul.

Une étude préliminaire a permis de montrer que le meilleur système à modéliser est l'échantillon pris entre deux portions de barres modélisées en 3D, auxquelles on ajoute des éléments unidimensionnels pour laisser les ondes mécaniques se propager librement. Pour faire cette étude trois conditions ont été testées (1) figure 4.5a l'échantillon seul (chargé à droite et à gauche par les forces mesurées aux barres), (2) figure 4.5b l'échantillon pris entre deux portions de barres (chargé à droite et à gauche par les forces mesurées

aux barres) et (3) figure 4.5c l'ajout d'éléments unidimensionnels avec un chargement à gauche uniquement et une condition aux limites libre à droite en fin de barre. La première condition n'est pas satisfaisante dans la mesure où la dispersion du signal due aux effets de contact entre les barres et l'échantillon ne sont pas pris en compte, car on ne dispose que de la force résultante. La seconde condition n'est pas satisfaisante non plus, car il existe toujours un décalage temporel entre la propagation numérique des ondes et la mesure, donc le signal imposé à gauche n'est pas parfaitement synchronisé (lorsqu'il a traversé l'échantillon et les portions de barres) avec le signal mesuré et imposé à droite, créant des réflexions d'ondes irréalistes. Seule la troisième condition donne des résultats presque identiques à une simulation complète de l'essai en 3D. Ce compromis entre temps de calcul et précision semble être le bon.

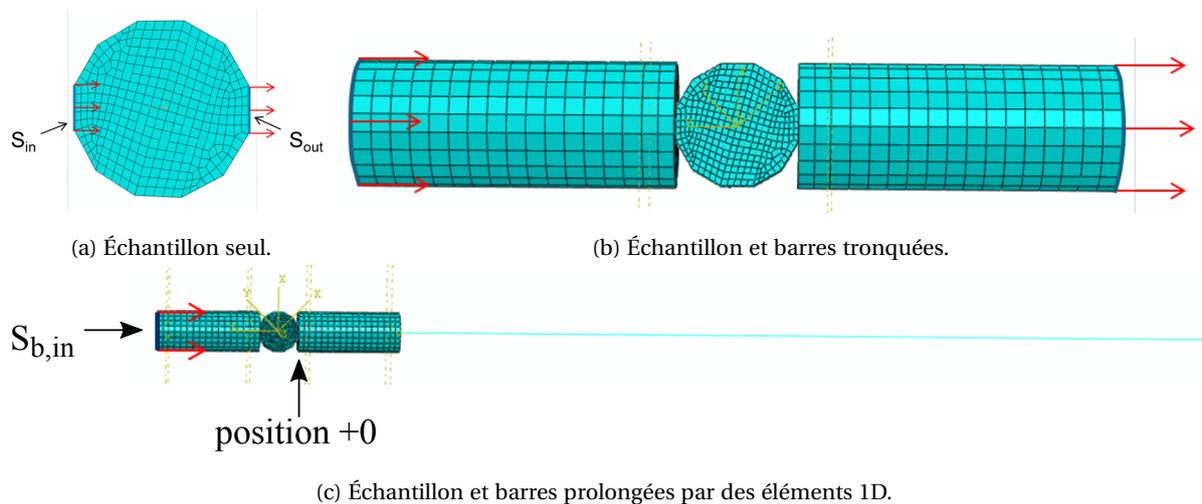


FIGURE 4.5 – Différents calculs pour simuler l'essai.

Le modèle finalement utilisé pour l'identification inverse du comportement du joint est présenté figure 4.6. Les points rouges montrent les positions où les résultats du calcul sont extraits et comparés aux mesures et les figures à droite montrent la comparaison entre les mesures et les calculs après minimisation. L'optimisation numérique quoique relativement difficile à mettre en oeuvre et à régulariser permet d'identifier les paramètres du comportement du joint. Il est à noter que le modèle s'appuie sur une estimation de la loi de contact entre l'échantillon et les barres. Cette dernière est incorporée dans la boucle de minimisation pour chaque essai car les contacts dépendent des rugosités locales, qui varient d'un essai à l'autre du fait que les échantillons ne sont pas identiques et que chaque impact modifie la rugosité des barres. Le comportement du joint sous trois chargements triaxiaux différents est ainsi caractérisé. On peut ainsi établir une surface d'élasticité et de rupture (cf. figure 4.7) pour présenter le comportement tridimensionnel du joint.

Ces recherches ont permis d'établir une procédure d'essai pour caractériser les joints collés en régime dynamique et peuvent donc avoir un impact intéressant sur le processus de certification des parties collées dans l'aéronautique, pour l'allègement des appareils.

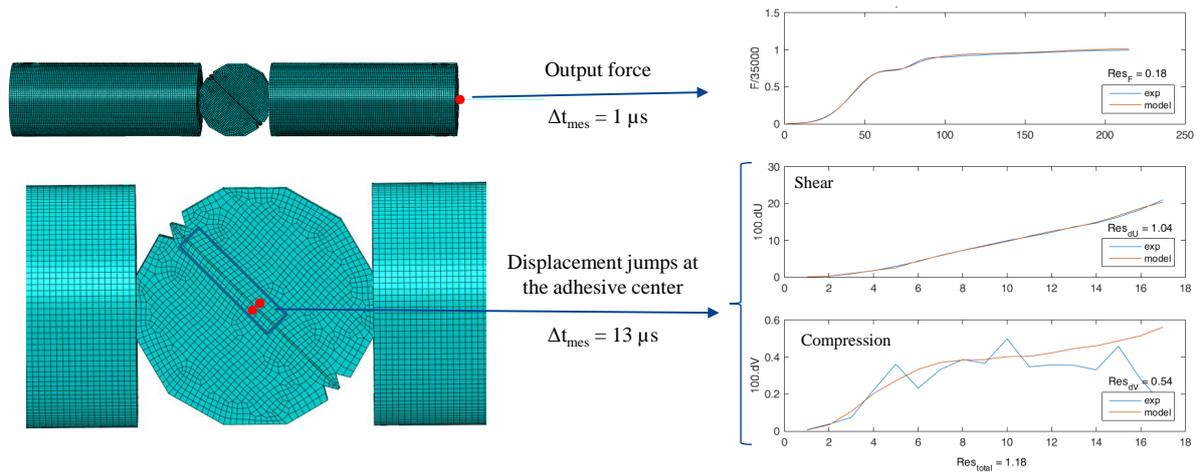


FIGURE 4.6 – Calcul inverse, comparaison entre les forces calculées et mesurées aux barres d’Hopkinson, et du saut de déplacement calculé et mesuré par corrélation.

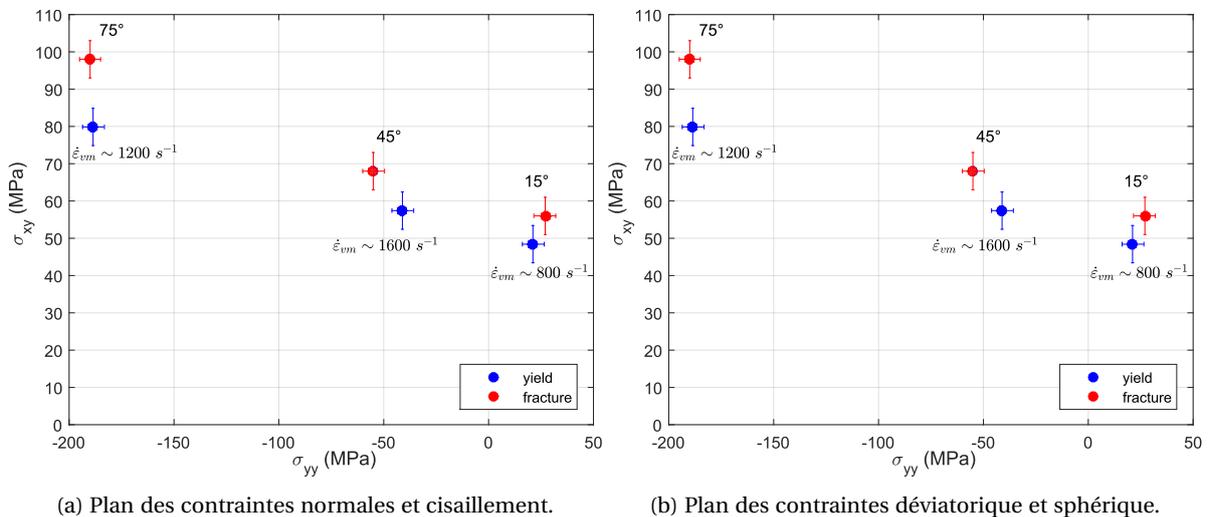


FIGURE 4.7 – Domaine d’élasticité et de rupture.

### 4.3 Identification Bayésienne des incertitudes

Cette section est liée à [213].

Ce sujet d’identification de comportement aux barres d’Hopkinson a été développé en collaboration avec Gabriel Seisson (CEA) et Charles Francart dans le cadre de son post-doctorat, que j’ai encadré. L’enjeu de ce travail est de quantifier les sources d’incertitudes qui entachent les mesures aux barres d’Hopkinson, et de quantifier leur effet cumulé sur l’incertitude du comportement identifié. Cette préoccupation provient du fait que les matériaux sont caractérisés dans certaines conditions d’essais, et le comportement ainsi identifié est injecté par les ingénieurs pour des calculs plus ou moins complexes dans le but de dimensionner une structure ou un système mécanique. Il est essentiel pour valider ces calculs, qui contribuent très largement à la conception, d’évaluer la confiance que l’on a dans les lois de comportement, qui sous-tendent les modèles. En effet, les incertitudes de comportement déterminent en partie les incertitudes des simulations numériques qui les exploitent et ainsi peuvent avoir un effet majeur sur l’évaluation des risques et la conception dans certains secteurs.

Ces travaux cherchent à quantifier les incertitudes de mesures liées au dépouillement des essais aux barres d’Hopkinson, les incertitudes liées à la variabilité intrinsèque des matériaux (conditions de fabrication etc.) et la répétabilité des essais pour évaluer in fine les incertitudes dans l’identification des para-

mètres d'un modèle de comportement. Le dépouillement des mesures de voltage des jauges de déformations sur les barres pour obtenir des courbes de forces et déplacements au droit de l'échantillon se fait via un modèle généralement assez simple et analytique impliquant une quinzaine de paramètres caractérisant le dispositif expérimental (cf. figure 4.8). Bien entendu des modèles beaucoup plus lourds existent également [226, 236, 256–258], mais ils ne servent généralement pas au dépouillement d'essais en raison de leur coût calculatoire.

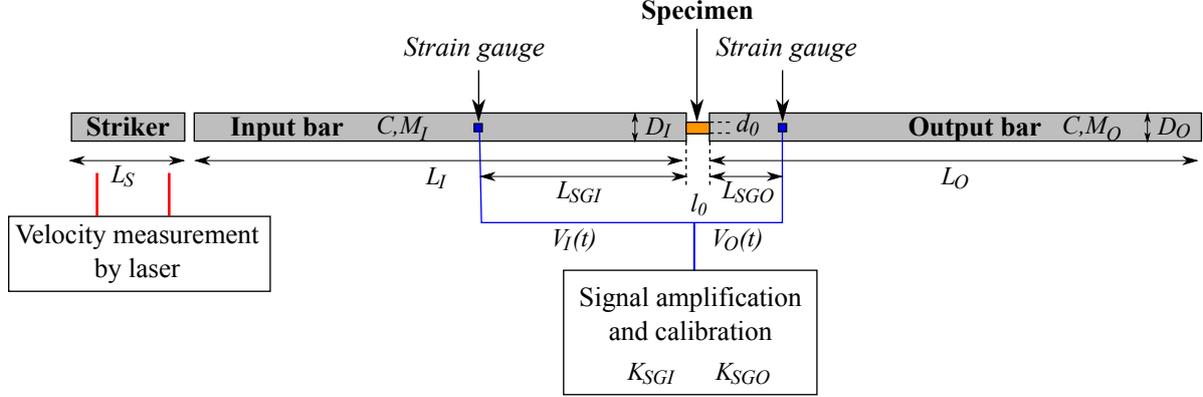


FIGURE 4.8 – Système de barres d'Hopkinson avec les paramètres connus de manière imparfaite.

Si l'on considère que l'on connaît imparfaitement ce dispositif, des incertitudes entachent chacun des paramètres et se combinent pour donner une incertitude cumulée sur les forces et déplacements issues du dépouillement de l'essai. Pour quantifier ces incertitudes, nous considérons chacun de ces paramètres comme une variable aléatoire dont on connaît la distribution de probabilité. En pratique il est relativement compliqué d'explorer empiriquement cette distribution, nous avons donc opté le plus souvent pour des lois uniformes ou normales dont la valeur moyenne est donnée par la mesure du paramètre et l'écart-type imposé de manière forfaitaire selon l'outil de mesure (mètre ruban, pied à coulisse numérique, balance numérique etc.). Le cumul de ces incertitudes se fait simplement de manière statistique en simulant un grand nombre de dépouillements sur la base d'un grand nombre de tirages aléatoires des paramètres. On obtient donc à partir des forces et déplacements des courbes contrainte-déformation et des vitesses de déformation, probabilisées (cf. figure 4.9). Pour chaque valeur de déformation, la contrainte suit une loi de probabilité que l'on peut assimiler à une loi normale avec une très bonne précision. Les résultats du  $k$ -ième essai se traduisent donc par une courbe moyenne de contrainte notée  $\bar{\sigma}_k$  en fonction de la déformation et une matrice de covariance notée  $\underline{V}_k^\sigma$ , qui traduit l'incertitude sur le dépouillement de l'essai.

Pour quantifier les incertitudes liées à la variabilité des matériaux et la répétabilité des essais, nous avons fait une campagne d'essai sur un alliage d'aluminium. Une quarantaine d'essais ont été effectués, dont 33 essais avec la même condition de vitesse de déformation moyenne et la même température. Par ailleurs, des essais en quasi-statique ont été effectués à différentes températures. Cela permet d'explorer la variabilité du matériau avec un nombre non négligeable d'échantillons différents. Il est donc aisé de cumuler l'incertitude expérimentale de chaque essai avec la variabilité matériau et d'agréger les données pour obtenir une courbe contrainte déformation probabilisée prenant en compte ces deux sources d'incertitude (cf. figure 4.10). Cela peut s'avérer utile pour examiner les résultats d'une campagne d'essais.

L'identification d'une loi de comportement à partir des essais, nécessite le choix d'un modèle de comportement faisant intervenir un certain nombre de paramètres. On a proposé d'identifier un modèle d'écrouissage assez classique de Steinberg-Cochran-Guinan simplifié :

$$\Phi(\underline{\gamma}, T(\varepsilon), \varepsilon) = Y_0 (1 + \beta\varepsilon)^n \left( 1 + \left( \frac{G'_T}{G_0} \right) (T - T_0) \right) \quad (4.1)$$

Il y a  $d = 4$  paramètres à identifier  $\underline{\gamma} = (Y_0, \beta, n, G'_T)$ , où  $Y_0$  (MPa) est la limite d'élasticité initiale avant écrouissage,  $\beta$  et  $n$  sont des paramètres sans dimension, et  $G'_T$  (MPa.K<sup>-1</sup>). Par ailleurs, le coefficient de cisaillement  $G_0$  est fixé, ce qui revient à identifier le ratio  $G'_T/G_0$ , et  $T_0$  est une température de référence.

Les variables explicatives du modèle sont  $T$  la température et  $\varepsilon$  la déformation uniaxiale. La température varie en cours d'essai du fait de l'auto-échauffement par les mécanismes dissipatifs plastiques. Cependant la

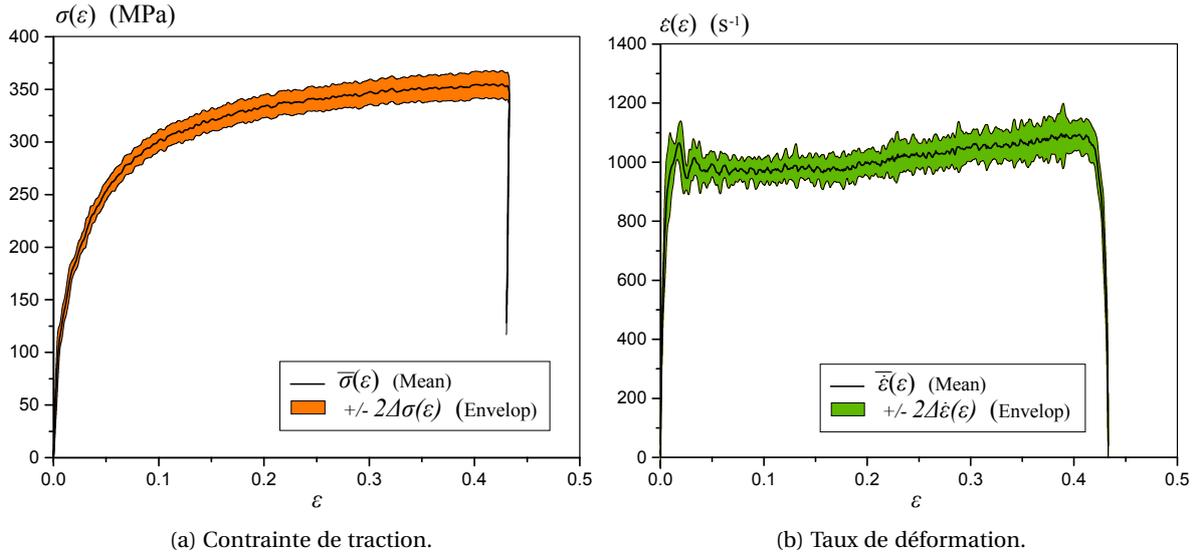


FIGURE 4.9 – Contrainte et taux de déformation probabiliste en fonction de la déformation.

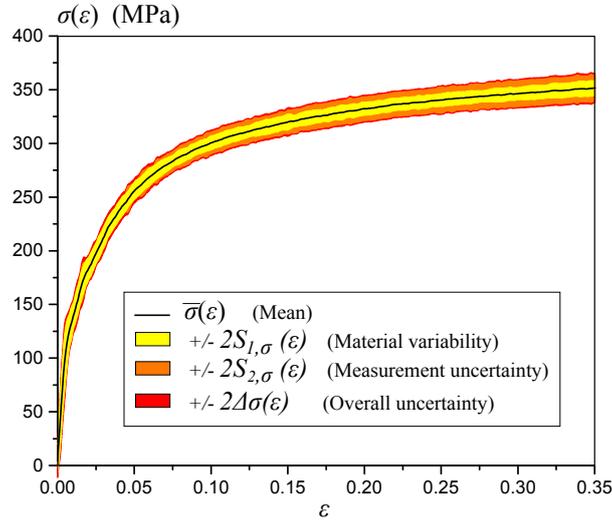


FIGURE 4.10 – Contrainte de traction en fonction de la déformation avec incertitudes cumulées.

température n'a pas été mesurée pour les essais en dynamique aux barres d'Hopkinson, du fait de la durée très réduite de l'essai et des difficultés à caler l'émissivité qui varie en cours d'essai. On estime donc la température en fonction de la déformation en postulant le coefficient de Taylor-Quinney, qui relie la puissance dissipée par les mécanismes plastiques avec l'élévation de température [259, 260] :

$$T(\varepsilon) - T_0 = \frac{\beta_{TQ}}{\rho_0 c_p} \int_0^\varepsilon \sigma(v) dv \quad (4.2)$$

Où  $\beta_{TQ}$  est le coefficient de Taylor-Quinney,  $\rho_0$  la masse volumique et  $c_p$  la capacité calorifique spécifique.

Nous n'avons pas étudié l'incertitude liée au choix du modèle, c'est-à-dire l'effet de l'écart entre un modèle théorique et les phénomènes physiques complexes conduisant à un comportement apparent des matériaux. Nous avons uniquement étudié pour le modèle fixé, l'incertitude d'identification des paramètres. Pour cela, nous avons opté pour une identification probabiliste des paramètres du matériau en utilisant les outils des statistiques Bayésiennes [247, 261, 262]. Un bon nombre d'identifications de diverses propriétés de matériaux ont été menées dans un cadre Bayésien [263–271].

Pour cette étude, j'ai proposé un modèle Bayésien hiérarchique, où l'on modélise la variabilité du matériau comme suit. On dispose de  $K$  essais, et les différents paramètres matériaux  $\underline{\gamma}_k$  de chaque échantillon

noté  $k$  ( $1 \leq k \leq K$ ) sont modélisés comme des variables aléatoires distinctes. On considère que les différentes valeurs correspondant aux différents échantillons sont des tirages aléatoires d'une variable aléatoire commune, nommée hyper-variable aléatoire notée  $\underline{\varphi}$ . Cette hyper-variable aléatoire représente en quelque sorte l'aléa dans le choix d'un échantillon plutôt qu'un autre, et permet de quantifier la dispersion des paramètres d'un test à l'autre.

Toute identification Bayésienne nécessite d'introduire des densités de probabilité a priori. Cette probabilité a priori joue le rôle de régularisation dans le problème d'identification, qui est mal posé comme toute méthode inverse. Sur la base de l'analyse des signaux et des données connues sur ce type de matériaux, nous avons opté pour un modèle a priori Gaussien de l'hyper-variable aléatoire, c'est-à-dire une loi normale multivariée de moyenne notée  $\underline{\mu}_{\underline{\gamma}}$  et de matrice de covariance notée  $\underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}}$ , ce qui se lit comme la densité de probabilité conditionnelle suivante :

$$\underline{\gamma} | \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}} \sim \mathcal{N}_d \left( \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}} \right) \quad (4.3)$$

Où  $\mathcal{N}_d$  désigne une loi normale multivariée de taille  $d$ . De plus, nous avons supposé que la matrice de covariance est diagonale. Pour écrire la distribution a priori de  $\underline{\mu}_{\underline{\gamma}}$  et  $\underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}}$ , on s'appuie sur les distributions conjuguées d'une distribution normale multivariée [261], et l'on pose donc :

$$\begin{cases} p(\underline{\mu}_{\underline{\gamma}}) \propto \prod_{l=1}^d p(\mu_l) \\ p(\underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}}) \propto \prod_{l=1}^d p(\Sigma_l) \end{cases} \quad (4.4)$$

Où  $l \in \{Y_0, \beta, n, G_T'\}$  et où :

$$\begin{cases} \Sigma_l \sim \text{Inv-}\chi^2 \left( S_{l,0}^2, \nu_{l,0} \right) \\ \mu_l \sim \mathcal{N} \left( \mu_{l,0}, s_{l,0}^2 \right) \end{cases} \quad (4.5)$$

Où  $\mathcal{N}$  représente la loi normale et  $\text{Inv-}\chi^2$  la loi du Chi2 inverse redimensionnée, qui est la distribution conjuguée de la loi normale. Ces distributions sont complètement déterminées par les paramètres a priori  $\mu_{l,0}, s_{l,0}, S_{l,0}, \nu_{l,0}$  qu'on se fixe.

Les données observées pour alimenter le modèle Bayésien sont, pour chaque test  $k$ , les courbes de contrainte moyenne rassemblant les  $M$  valeurs de contrainte moyenne  $\bar{\sigma}_k = (\bar{\sigma}_{1,k}, \dots, \bar{\sigma}_{M,k})$ , en fonction des  $M$  valeurs de déformation  $\underline{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_M)$  au cours de l'essai, ainsi que la matrice de covariance empirique  $\underline{V}_{\underline{\sigma}_k}^{\sigma}$ , qui représente l'incertitude sur l'essai. Dans ce contexte il faut comprendre la déformation comme une variable explicative du modèle, tout comme la température. Toute estimation Bayésienne se fonde sur un modèle de vraisemblance, qui établit la densité de probabilité conditionnelle des données observées sachant les paramètres à estimer, ici les paramètres du matériau  $\underline{\gamma}_k$ . On opte ici pour un modèle de vraisemblance Gaussien, dont la matrice de covariance est supposée connue, soit :

$$\bar{\sigma}_k | \underline{\gamma}_k \sim \mathcal{N}_M \left( \underline{\Phi}_k, \underline{V}_{\underline{\sigma}_k}^{\sigma} \right) \quad (4.6)$$

Où  $\underline{\Phi}_k$  est le vecteur des évaluations du modèle de comportement (4.1), évalué pour les  $M$  valeurs de déformation et de température au cours de l'essai.

L'identification Bayésienne consiste à évaluer grâce au théorème de Bayes, à partir de la densité a priori et du modèle de vraisemblance, la probabilité a posteriori, c'est-à-dire la densité de probabilité conditionnelle des paramètres à identifier  $\underline{\gamma}_k, \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}}$  sachant les données observées  $\bar{\sigma}_k$  :

$$p \left( \underline{\gamma}_k, \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}} | \bar{\sigma}_k \right) \propto p \left( \bar{\sigma}_k | \underline{\gamma}_k \right) p \left( \underline{\gamma}_k | \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}} \right) p(\underline{\mu}_{\underline{\gamma}}) p(\underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}}) \quad (4.7)$$

Où  $p \left( \underline{\gamma}_k | \underline{\mu}_{\underline{\gamma}}, \underline{\Sigma}_{\underline{\gamma}} \right)$  est donnée par (4.3). On peut aussi calculer les distributions a posteriori marginales, c'est-

à-dire :

$$\begin{cases} p(\underline{\gamma}_k | \bar{\sigma}_k) \propto \int_{\underline{\mu}_\gamma} \int_{\underline{\Sigma}_\gamma} p(\underline{\gamma}_k, \underline{\mu}_\gamma, \underline{\Sigma}_\gamma | \bar{\sigma}_k) d\underline{\mu}_\gamma d\underline{\Sigma}_\gamma \\ p(\underline{\mu}_\gamma | \bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_K) \propto \prod_{k=1}^K \int_{\underline{\Sigma}_\gamma} \int_{\underline{\gamma}_k} p(\underline{\gamma}_k, \underline{\mu}_\gamma, \underline{\Sigma}_\gamma | \bar{\sigma}_k) d\underline{\Sigma}_\gamma d\underline{\gamma}_k \\ p(\underline{\Sigma}_\gamma | \bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_K) \propto \prod_{k=1}^K \int_{\underline{\mu}_\gamma} \int_{\underline{\gamma}_k} p(\underline{\gamma}_k, \underline{\mu}_\gamma, \underline{\Sigma}_\gamma | \bar{\sigma}_k) d\underline{\mu}_\gamma d\underline{\gamma}_k \end{cases} \quad (4.8)$$

On peut simuler ces densités a posteriori marginales (4.8) grâce à des méthodes de sampling exploitant les chaînes de Markov. En pratique, nous avons utilisé un algorithme très efficace, le *No U-Turn Sampler* (NUTS) [272] implémenté dans Python [273]. Ainsi, la distribution statistique des paramètres de chaque essai est présentée figure 4.11a. On identifie également la distribution de la loi de l'hyper-variable aléatoire, ce qui permet de définir des paramètres matériaux globaux, représentant l'incertitude que l'on a sur les paramètres matériaux identifiés sur l'ensemble des essais (cf. figure 4.11b).

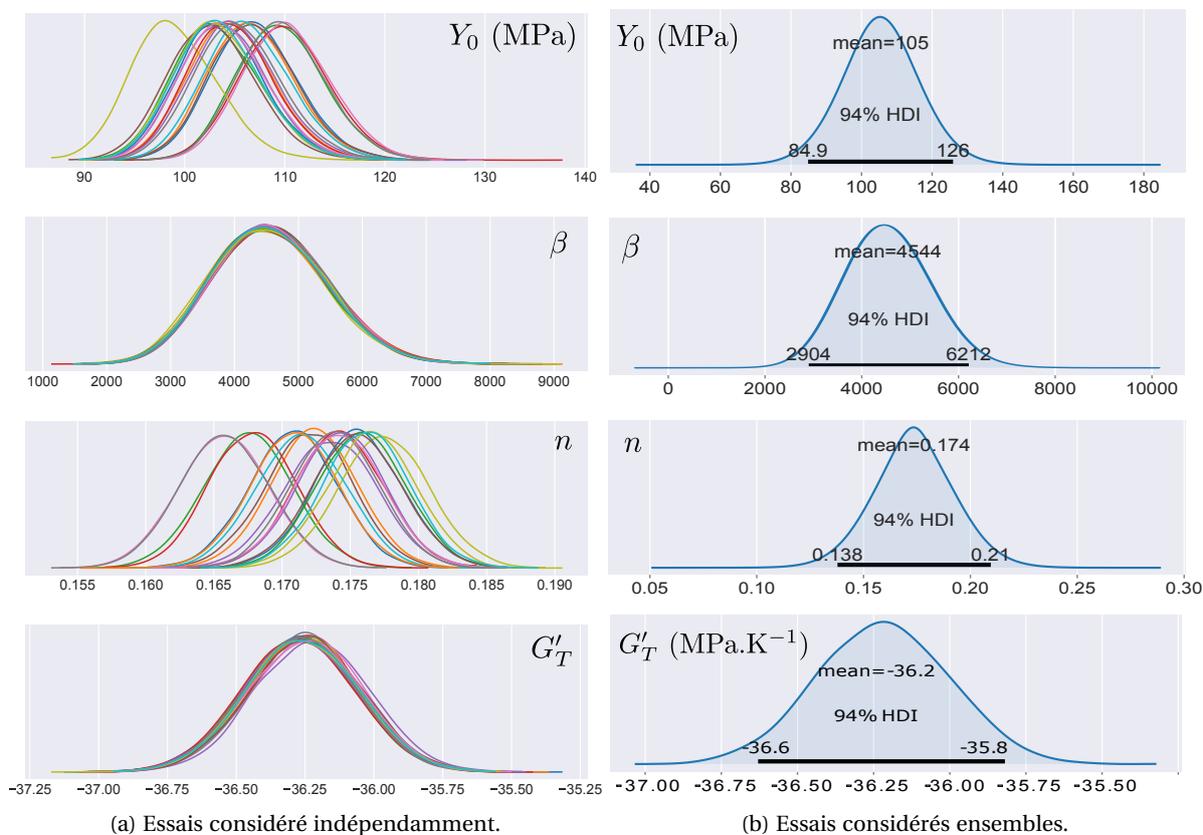


FIGURE 4.11 – Distribution de probabilité a posteriori des paramètres matériaux.

Sur la base de ces calculs, on peut représenter le comportement identifié sous forme d'une courbe contrainte déformation, associé à l'incertitude que l'on a sur les paramètres du matériau. De plus, il est possible de calculer la probabilité de nouveaux essais, sachant ceux qui ont été réalisés (*posterior checks*) (cf. figure 4.12). On voit que les marges d'incertitude identifiées avec cette technique ne sont pas négligeables, quand bien même le dispositif expérimental est bien rôdé comme pour les barres d'Hopkinson du LMS. Cela montre l'intérêt de multiplier les essais et de quantifier les incertitudes par des méthodes calibration Bayésiennes. Ce travail plaide donc en faveur de l'introduction de comportements probabilistes dans les études de sûreté ou pour la conception dans des domaines de l'ingénierie.

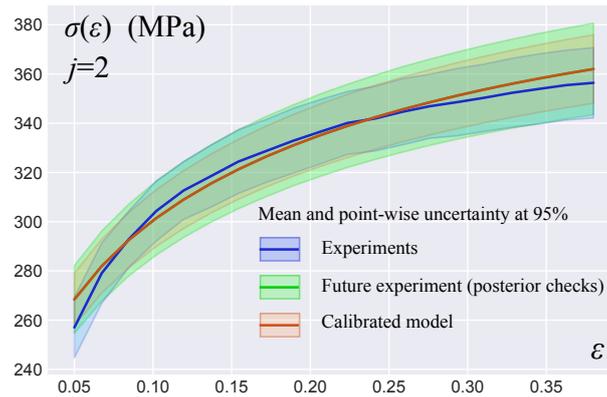


FIGURE 4.12 – Comportement expérimental et calibré avec les incertitudes.

## Publications de l'axe 4

- [210] Anthony Janin, Andrei Constantinescu, Daniel **Weisz-Patrault**, Robert Nevriere, Matthieu Stackler, and William Albouy. An experimental technique for the characterization of adhesive joints under dynamic multiaxial loadings. *Procedia engineering*, 197 :52–59, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.08.081>.
- [211] Anthony Janin, Andrei Constantinescu, Daniel **Weisz-Patrault**, Robert Nevriere, Matthieu Stackler, and William Albouy. A new multiaxial specimen for determining the dynamic properties of adhesive joints. *Experimental Mechanics*, 58(8) :1207–1219, 2018. <https://doi.org/10.1007/s11340-018-0402-7>.
- [212] Anthony Janin, Andrei Constantinescu, Daniel **Weisz-Patrault**, Robert Nevriere, Matthieu Stackler, and William Albouy. Identification of the material behavior of adhesive joints under dynamic multiaxial loadings. *International Journal of Impact Engineering*, 133 :103355, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2019.103355>.
- [213] Daniel **Weisz-Patrault**, Charles Francart, and Gabriel Seisson. Uncertainty estimation and hierarchical Bayesian analysis of mechanical dynamic tests. *Journal of Dynamic Behavior of Materials*, pages 1–22, 2021. <https://doi.org/10.1007/s40870-020-00280-6>.

## Références de l'axe 4

- [214] Herbert Kolsky. An investigation of the mechanical properties of materials at very high rates of loading. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 62(11) :676, 1949.
- [215] JZ Malinowski and JR Klepaczko. A unified analytic and numerical approach to specimen behaviour in the split-hopkinson pressure bar. *International journal of mechanical sciences*, 28(6) :381–391, 1986.
- [216] Han Zhao and Gérard Gary. On the use of shpb techniques to determine the dynamic behavior of materials in the range of small strains. *International Journal of Solids and structures*, 33(23) :3363–3375, 1996.
- [217] Han Zhao and Gérard Gary. A new method for the separation of waves. application to the shpb technique for an unlimited duration of measurement. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45 (7) :1185–1202, 1997.
- [218] Gerard Gary. *Comportement des métaux à grande vitesse de déformation. Modélisation*. Ed. Techniques Ingénieur, 2001.
- [219] Fengchun Jiang and Kenneth S Vecchio. Hopkinson bar loaded fracture experimental technique : a critical review of dynamic fracture toughness tests. *Applied Mechanics Reviews*, 62(6) :060802, 2009.

- [220] Kamal Safa and Gérard Gary. Displacement correction for punching at a dynamically loaded bar end. International Journal of Impact Engineering, 37(4) :371–384, 2010.
- [221] Weinong W Chen and Bo Song. Split Hopkinson (Kolsky) bar : design, testing and applications. Springer Science & Business Media, 2010.
- [222] T Jankowiak, A Rusinek, and T Lodygowski. Validation of the klepaczko–malinowski model for friction correction and recommendations on split hopkinson pressure bar. Finite Elements in Analysis and Design, 47(10) :1191–1208, 2011.
- [223] Gérard Gary. Testing with bars from dynamic to quasi-static. In Constitutive Relations under Impact Loadings, pages 1–58. Springer, 2014.
- [224] Mangapatnam Adamvalli and Venkitanarayanan Parameswaran. Dynamic strength of adhesive single lap joints at high temperature. International Journal of Adhesion and Adhesives, 28(6) :321–327, 2008.
- [225] Georges Challita and Ramzi Othman. Finite-element analysis of shpb tests on double-lap adhesive joints. International Journal of Adhesion and Adhesives, 30(4) :236–244, 2010.
- [226] Georges Challita, Ramzi Othman, Pascal Casari, and Khaled Khalil. Experimental investigation of the shear dynamic behavior of double-lap adhesively bonded joints on a wide range of strain rates. International Journal of Adhesion and Adhesives, 31(3) :146–153, 2011.
- [227] Jean-Yves Cognard, Romain Créac’hcadec, Laurent Sohier, and Peter Davies. Analysis of the nonlinear behavior of adhesives in bonded assemblies-comparison of tast and arcan tests. International Journal of Adhesion and Adhesives, 28(8) :393–404, 2008.
- [228] Nicolas Carrere, Claudiu Badulescu, Jean-Yves Cognard, and Dominique Leguillon. 3d models of specimens with a scarf joint to test the adhesive and cohesive multi-axial behavior of adhesives. International Journal of Adhesion and Adhesives, 62 :154–164, 2015.
- [229] Sohan Lal Raykhere, Prashant Kumar, RK Singh, and Venkitanarayanan Parameswaran. Dynamic shear strength of adhesive joints made of metallic and composite adherents. Materials & Design, 31(4) : 2102–2109, 2010.
- [230] C C Roth, G Gary, and D Mohr. Compact SHPB System for Intermediate and High Strain Rate Plasticity and Fracture Testing of Sheet Metal. Experimental mechanics, 55 :1803–1811, 2015.
- [231] D Rittel and H Maigre. An investigation of dynamic crack initiation in pmma. Mechanics of Materials, 23(3) :229–239, 1996.
- [232] J Zhao, WG Knauss, and G Ravichandran. A new shear-compression-specimen for determining quasi-static and dynamic polymer properties. Experimental mechanics, 49(3) :427, 2009.
- [233] A Dorogoy, D Rittel, and A Godinger. A shear-tension specimen for large strain testing. Experimental Mechanics, 56(3) :437–449, 2016.
- [234] P Kuhn, G Catalanotti, J Xavier, PP Camanho, and H Koerber. Fracture toughness and crack resistance curves for fiber compressive failure mode in polymer composites under high rate loading. Composite Structures, 182 :164–175, 2017.
- [235] Jun Zhou, Yang Wang, and Yuanming Xia. Mode-i fracture toughness of pmma at high loading rates. Journal of materials science, 41(24) :8363–8366, 2006.
- [236] QZ Wang, F Feng, M Ni, and XP Gou. Measurement of mode i and mode ii rock dynamic fracture toughness with cracked straight through flattened brazilian disc impacted by split hopkinson pressure bar. Engineering Fracture Mechanics, 78(12) :2455–2469, 2011.
- [237] Leslie Banks-Sills and Jacob Schwartz. Fracture testing of brazilian disk sandwich specimens. International journal of fracture, 118(3) :191–209, 2002.

- [238] Eric Martin, Fabio Pavia, Andrea Ventrella, Massimiliano Avalle, Edgar Lara-Curzio, and Monica Ferraris. A brazilian disk test for the evaluation of the shear strength of epoxy-joined ceramics. International Journal of Applied Ceramic Technology, 9(4) :808–815, 2012.
- [239] François Hild and Stéphane Roux. Digital image correlation : from displacement measurement to identification of elastic properties—a review. Strain, 42(2) :69–80, 2006.
- [240] Stéphane Roux and François Hild. Stress intensity factor measurements from digital image correlation : post-processing and integrated approaches. International journal of fracture, 140(1) :141–157, 2006.
- [241] A Gilat, TE Schmidt, and AL Walker. Full field strain measurement in compression and tensile split hopkinson bar experiments. Experimental Mechanics, 49(2) :291–302, 2009.
- [242] H Koerber, J Xavier, and PP Camanho. High strain rate characterisation of unidirectional carbon-epoxy im7-8552 in transverse compression and in-plane shear using digital image correlation. Mechanics of Materials, 42(11) :1004–1019, 2010.
- [243] JD Seidt, VT Kuokkala, JL Smith, and A Gilat. Synchronous full-field strain and temperature measurement in tensile tests at low, intermediate and high strain rates. Experimental Mechanics, 2(57) : 219–229, 2016.
- [244] Phillip Reu. All about speckles : aliasing. Experimental Techniques, 38(5) :1–3, 2014.
- [245] Huy Duong Bui. Inverse problems in the mechanics of materials. Editions of the University of Karadanga, 1997.
- [246] Victor Isakov. Inverse problems for partial differential equations, volume 127 of Applied mathematical sciences. Springer, 1998.
- [247] Albert Tarantola. Inverse problem theory and methods for model parameter estimation, volume 89. siam, 2005.
- [248] Laurent Rota. Application de méthodes inverses au dépouillement de l’essai aux barres de Hopkinson. PhD thesis, Ecole Polytechnique X, 1997.
- [249] Rolf Mahnken and Erwin Stein. Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations. International Journal of Plasticity, 12(4) :451–479, 1996.
- [250] A Gavrus, Elisabeth Massoni, and JL Chenot. An inverse analysis using a finite element model for identification of rheological parameters. Journal of Materials Processing Technology, 60(1-4) :447–454, 1996.
- [251] Andrei Constantinescu and Nicolas Tardieu. On the identification of elastoviscoplastic constitutive laws from indentation tests. Inverse Problems in Engineering, 9(1) :19–44, 2001.
- [252] Romain Forestier, Yvan Chastel, and Elisabeth Massoni. 3d inverse analysis model using semi-analytical differentiation for mechanical parameter estimation. Inverse Problems in Engineering, 11 (3) :255–271, 2003.
- [253] Andrei Constantinescu and Ky Dang Van. A global computational approach in engineering problems : identification and fatigue. Lecture Notes-AMAS, 2004.
- [254] Stéphane Avril, Marc Bonnet, Anne-Sophie Bretelle, Michel Grediac, François Hild, Patrick Ienny, Félix Latourte, Didier Lemosse, Stéphane Pagano, Emmanuel Pagnacco, et al. Overview of identification methods of mechanical parameters based on full-field measurements. Experimental Mechanics, 48 (4) :381, 2008.
- [255] Marc Bonnet and Andrei Constantinescu. Inverse problems in elasticity. Inverse problems, 21(2) :R1, 2005.

- [256] Shiming Dong, Yang Wang, and Yuanming Xia. A finite element analysis for using brazilian disk in split hopkinson pressure bar to investigate dynamic fracture behavior of brittle polymer materials. Polymer testing, 25(7) :943–952, 2006.
- [257] Christian C Roth and Dirk Mohr. Effect of strain rate on ductile fracture initiation in advanced high strength steel sheets : experiments and modeling. International Journal of Plasticity, 56 :19–44, 2014.
- [258] Jörgen Kajberg and Bengt Wikman. Viscoplastic parameter estimation by high strain-rate experiments and inverse modelling–speckle measurements and high-speed photography. International Journal of Solids and Structures, 44(1) :145–164, 2007.
- [259] Daniel Rittel. On the conversion of plastic work to heat during high strain rate deformation of glassy polymers. Mechanics of Materials, 31(2) :131–139, 1999.
- [260] Guruswami Ravichandran, Ares J Rosakis, Jon Hodowany, and Phoebus Rosakis. On the conversion of plastic work into heat during high-strain-rate deformation. In AIP conference proceedings, volume 620, pages 557–562. AIP, 2002.
- [261] Andrew Gelman, John B Carlin, Hal S Stern, and Donald B Rubin. Bayesian data analysis. Chapman and Hall/CRC, 2013. Third edition.
- [262] Bradley P Carlin and Thomas A Louis. Bayes and empirical Bayes methods for data analysis. Chapman and Hall/CRC, 2010.
- [263] Christian Gogu, Raphael Haftka, Rodolphe Le Riche, Jérôme Molimard, and Alain Vautrin. Introduction to the bayesian approach applied to elastic constants identification. AIAA journal, 48(5) :893–903, 2010.
- [264] E Zhang, Jean-Daniel Chazot, Jérôme Antoni, and Mohamed Hamdi. Bayesian characterization of young’s modulus of viscoelastic materials in laminated structures. Journal of Sound and Vibration, 332(16) :3654–3666, 2013.
- [265] Hussein Rappel, Lars Beex, Ludovic Noels, and Stéphane Bordas. Identifying elastoplastic parameters with bayes’ theorem considering double error sources and model uncertainty. Probabilistic Engineering Mechanics, 2018.
- [266] Hussein Rappel, Lars AA Beex, Jake S Hale, Ludovic Noels, and SPA Bordas. A tutorial on bayesian inference to identify material parameters in solid mechanics. Archives of Computational Methods in Engineering, pages 1–25, 2019.
- [267] D Andrew Brown and Sez Atamturktur. Nonparametric functional calibration of computer models. arXiv preprint arXiv :1602.06202, 2016.
- [268] Jean-Daniel Chazot, Erliang Zhang, and Jérôme Antoni. Acoustical and mechanical characterization of poroelastic materials using a bayesian approach. The Journal of the Acoustical Society of America, 131(6) :4584–4595, 2012.
- [269] Brian Williams, Dave Higdon, Jim Gattiker, Leslie Moore, Michael McKay, Sallie Keller-McNulty, et al. Combining experimental data and computer simulations, with an application to flyer plate experiments. Bayesian Analysis, 1(4) :765–792, 2006.
- [270] Gabriel Seisson, Vincent Dubois, Cyril Bolis, and Christophe Denoual. Flow stress of beryllium : Attempt for a bayesian crossed-data analysis from hopkinson bars to Rayleigh-Taylor instabilities. In 12th International DYMAT Conference (DYMAT 2018), page 01004, ARCACHON, France, September 2018.
- [271] Michael Fugate, Brian Williams, David Higdon, Kenneth M Hanson, James Gattiker, Shuh-Rong Chen, and Cetin Unal. Hierarchical bayesian analysis and the preston-tonks-wallace model. Los Alamos National Laboratory Technical Report LA-UR-05-3935, 2005.
- [272] Matthew D Hoffman and Andrew Gelman. The no-u-turn sampler : adaptively setting path lengths in hamiltonian monte carlo. Journal of Machine Learning Research, 15(1) :1593–1623, 2014.
- [273] John Salvatier, Thomas V Wiecki, and Christopher Fonnesbeck. Probabilistic programming in python using pymc3. PeerJ Computer Science, 2 :e55, 2016.

# Projets en cours et perspectives de recherches

J'ai esquissé dans ce mémoire l'ensemble des sujets auxquels je me suis intéressé, depuis la fin de mon doctorat. J'ai structuré ces recherches en trois axes distincts, qui ont une logique commune portant sur l'estimation des contraintes résiduelles et les évolutions microstructurales, en particulier au cours des procédés de fabrication ou de mise en forme. À cela s'ajoute un axe centré autour d'un montage expérimental pour caractériser des matériaux sous chargement dynamique. Pour chacun de ces quatre axes de recherche, je détaille dans ce chapitre, qui tient lieu de conclusion générale, les projets en cours ou en gestation. Cet ensemble d'idées constitue mon projet de recherche sur les quelques années à venir. Celui-ci s'inscrit à la fois dans une logique d'exploration de sujets que je connais peu (comme les instabilités fluides dans les bains de fusion en fabrication additive) de sorte à continuer de découvrir et apprendre en espérant pouvoir apporter parfois un regard original et transversal, et à la fois dans une logique cohérente, en conservant notamment la même structure en quatre axes. Pour alléger la lecture, je n'ajoute pas de bibliographie supplémentaire, même si bien sûr l'état de l'art est un point essentiel pour développer les sujets que j'évoque ici.

## Axe 1 : Méthodes inverses en temps réel

### Chauffages inductifs pour le contrôle des contraintes résiduelles

Une idée que je développe pour poursuivre mes travaux sur les méthodes inverses en temps réel, est d'utiliser des chauffages inductifs pour les cylindres de laminage de sorte à modifier leur géométrie pour ajuster la forme de l'emprise entre les outils et ainsi modifier les contraintes résiduelles. Cette technique est déjà utilisée avec du refroidissement par jets d'eau, ce qui implique des déformations thermiques qui modifient de manière ciblée la géométrie du cylindre de laminage. Le projet serait d'ajouter des chauffages inductifs pour avoir d'avantage de latitude pour déformer les cylindres. Cela nécessiterait de résoudre les équations de Maxwell dans le cylindre et de calculer la chaleur dissipée par effet Joule. L'enjeu de ces travaux est non seulement d'être capable de proposer une résolution numérique très rapide pour obtenir des résultats en temps réel, mais également de construire une fonction objectif qui porte directement sur l'état de contrainte résiduel comme il peut être mesuré en aval des laminoirs grâce à des dispositifs comme celui exposé en section 1.3.

### Soudage par friction malaxage (CIFRE Thales)

Je poursuis et étend aussi les thématiques de cet axe de recherche grâce à des projets industriels. Je participe notamment à l'encadrement de la thèse CIFRE de Nicolas Dimov avec THALES, co-encadré avec Éric Charkaluk (LMS, École Polytechnique) et Aude Simar (iMMC, UCLouvain). Ce sujet porte sur la soudure par friction malaxage (*friction stir welding* (FSW)) d'alliages dissimilaires (soudures de deux nuances différentes d'aluminium ou soudures d'aluminium et de titane). Ce procédé consiste à plonger un outil quasi cylindrique tournant dans les deux métaux à souder pour les brasser l'un avec l'autre. La soudure est réalisée en avançant l'outil le long de l'interface entre les deux métaux. Ce travail est essentiellement expérimental et consiste principalement à établir des corrélations entre les paramètres de soudure (vitesse d'avance, vitesse de rotation etc.) et les propriétés microstructurales obtenues et leur lien avec les caractéristiques mécaniques de la soudure et en particulier la tenue en fatigue. Un des axes de développement tient à l'instrumentation de l'outil de soudure pour mesurer des grandeurs in-situ, qui permettraient d'enrichir les corrélations avec

des informations plus locales que les seuls paramètres de fonctionnement. Cette instrumentation des outils nécessitera d'établir quelques modèles simples pour interpréter les mesures grâce à des méthodes inverses.

## Axe 2 : Simulations rapides de procédés non-linéaires

### Contrôle des microstructures en fabrication additive (projet ANR MIFASOL)

Cet axe de recherche occupe une large part de mon projet de recherche pour ces prochaines années. Je m'intéresse particulièrement aux procédés de fabrication additive DED. Je suis en particulier fortement impliqué dans le projet d'ANR "microstructure à la demande en fabrication additive par une synergie entre commande, mesures et simulations" (MIFASOL) coordonnée par Éric Charkaluk (LMS, École Polytechnique) regroupant différents laboratoires, le LMS (École Polytechnique), le LURPA (ENS Paris-Saclay) et le LaMcube (École Centrale Lille). Ce projet a pour but de proposer des outils pour contrôler les microstructures obtenues lors de la fabrication additive DED. Je co-encadre les deux thèses prévues pour ce projet.

La thèse de Michèle Bréhier, que je co-encadre avec Christophe Tournier (LURPA, ENS Paris-Saclay), porte sur la modélisation rapide thermo-métallurgique du procédé de fabrication additive métallique DED avec un contrôle commande pour obtenir une microstructure visée. On s'appuiera sur les travaux que j'ai menés sur la simulation rapide de la thermique et des transitions de phase au cours du procédé (cf. section 2.4.1), ainsi que la croissance de grain (cf. section 3.4). On ajoutera une partie solidification notamment en introduisant les aspects cristallisation, d'abord en utilisant des cartes bien connues de morphologie de grains en fonction du gradient de température et de la vitesse d'avance du laser, et ensuite en développant un modèle simplifié de cristallisation fondé sur les tessellations de Voronoi-Laguerre dans l'esthétique des travaux sur la croissance de grain présentés en section 3.4. Grâce à cet effort de développement d'outils rapides de modélisation, nous serons en mesure de proposer des stratégies de fabrication (trajet, puissance, vitesse du laser, temps de pause entre les couches etc.), qui permettent de réaliser une microstructure voulue pour une pièce de géométrie fixée. Par ailleurs, ces travaux visent à intégrer le contrôle machine pour réaliser les pièces optimisées. On s'attachera à l'élaboration d'un modèle cinématique du couple machine-outil et commande numérique pour construire un jumeau numérique du procédé. À partir des modèles existants, il s'agira d'identifier deux modèles spécifiques, le premier pour la machine BeAM (LMS, École Polytechnique) et le second pour le robot ABB (LURPA, ENS Paris-Saclay) liant la commande machine, la vitesse de la buse, la puissance du laser et la trajectoire.

Le second sujet de thèse<sup>1</sup>, que je co-encadre avec Ahmed El Bartali et Jean-François Witz (LaMcube, École Centrale Lille), porte sur le développement d'une stratégie de *machine learning* qui exploite des mesures in situ, pour le contrôle des microstructures au cours du procédé de fabrication additive DED. En effet, si les modèles du procédé que j'ai établis sont suffisamment rapides pour être exploités pour définir des stratégies de fabrication visant une certaine microstructure (par étude paramétrique ou optimisation numérique), ils sont en revanche trop lents pour être utilisés en temps réel. Ainsi, on cherche à entraîner un réseau de neurones pour ajuster les paramètres du procédé en temps réel, de sorte à contrôler les microstructures en évitant de s'écarter des conditions de température ciblées dans la stratégie de fabrication. Il s'agit de définir un apprentissage supervisé, qui autorise d'explorer un espace de paramètres relativement grand, mais qui nécessite une base de données significative. On s'appuiera pour entraîner le réseau, sur les modèles rapides existants, que j'ai déjà développés. L'idée est ensuite, qu'une fois entraîné, ce réseau pourra permettre, sans calcul thermomécanique supplémentaire, d'ajuster les paramètres du procédé en temps réel sur la base de mesures in-situ. Ces dernières reposent sur des techniques de mesures thermiques par rayonnement infra-rouge, utilisant une technologie bi-chromatique, pour tenir compte des variations d'émissivité en surface du matériau, qui peut varier au cours de la fabrication. Ces mesures thermiques seront complétées par des mesures de champs cinématiques de déplacements et de déformations obtenues par DIC et par la caractérisation des microstructures en fin de procédé.

### Contrôle des contraintes résiduelles en fabrication additive (projet CNRS 80|PRIME)

Par ailleurs, je coordonne un projet CNRS 80|PRIME ("optimisation de procédés de fabrication additive pour le contrôle des contraintes résiduelles des pièces" (OPAC)) pour lequel je co-encadre une thèse<sup>2</sup> avec

1. pour lequel il faut encore recruter le ou la doctorant.e  
2. dont il faut encore recruter le ou la doctorant.e

Grégoire Allaire (CMAP, École Polytechnique) et Jean-Yves Hascoet (GeM, École Centrale Nantes). Ce projet a pour but de contrôler les **contraintes résiduelles**, qui se forment lors de la fabrication additive DED. L'objectif de ce projet est de proposer une stratégie d'optimisation des paramètres de procédés qui permettent de minimiser le temps d'exécution en limitant les contraintes résiduelles en cours de la fabrication et une fois la pièce achevée, pour limiter les risques de distorsion excessive et de flambement. Pour cela, on propose d'utiliser des simulations de cinétique thermique rapides déjà développées (cf. section 2.4.1). Cependant, la prédiction des contraintes résiduelles nécessite un calcul de mécanique, dont le coût peut être extrêmement élevé, si les spécificités du problème, c'est-à-dire la structure en dépôts successifs de cordons élanés, sont mal exploitées. En effet, bon nombre de modèles utilisent des éléments tridimensionnels, alors que les couches sont de l'ordre de 0.2 mm d'épaisseur ce qui oblige à réaliser un maillage extrêmement fin. J'ai donc proposé de développer un modèle de mécanique rapide unidimensionnel dit "multi-fils" pour le calcul des contraintes résiduelles. Un modèle unidimensionnel ne souffre pas des limitations sur la taille du maillage du fait que l'épaisseur n'est pas maillée explicitement (il ne s'agit que d'un paramètre ajustable de l'élément). En revanche, ce modèle multi-fils, pour être représentatif de la complexité des champs de contrainte, devra intégrer d'avantage de degrés de liberté par noeud qu'un modèle de fil classique. Cependant on montre aisément, que le gain en termes de taille de maillage excède très largement le coût additionnel de ces degrés de liberté supplémentaires. Le couplage entre la thermique et la mécanique pour aboutir aux contraintes résiduelles se fera de la manière suivante. Le calcul de thermique sera réalisé indépendamment, et des déformations libres (expansion thermique, changements de phase etc.) seront calculées à chaque instant dans toute la structure existante. Ce champ de déformation libre sera appliqué au modèle de mécanique multi-fils (discrétisé aux éléments finis) sous forme d'une déformation imposée.

Sur cette base, une stratégie d'optimisation numérique sera proposée et testée sur des pièces réelles grâce à la traduction des paramètres optimisés en commandes machine. Puisque l'on dispose des équations du problème, on peut formuler un état adjoint pour calculer le gradient de la fonctionnelle à minimiser. Cela nécessite de calculer un nouveau problème en plus du problème de mécanique, mais cet état adjoint bénéficiera comme le modèle multi-fils d'une structure unidimensionnelle qui permet d'alléger le temps de calcul. Par ailleurs, pour alléger au maximum le coût calculatoire, il conviendra d'évaluer le niveau de finesse nécessaire dans la discrétisation temporelle et spatiale des problèmes de thermique et de mécanique pour que le critère, portant sur les contraintes résiduelles, soit suffisamment représentatif.

## **Instabilité du bain de fusion en fabrication additive (projet SOFIA, AddUP)**

Enfin, je participe activement au projet SOFIA dirigé par l'entreprise AddUp. Ce projet porte sur la compréhension et l'amélioration du procédé de fabrication additive métallique par *selective laser melting* (SLM). Ce procédé diffère des technologies DED, qui diffusent de la poudre localement sous le spot laser, alors que les technologies SLM utilisent un lit de poudre sur lequel le laser opère un trajet de fusion. À la fin de chaque couche, de la poudre est ajoutée au lit de poudre pour entamer la couche suivante. Un des enjeux de ce projet tient aux conditions d'usage pour les paramètres machine pour éviter des défauts majeurs tout en garantissant la meilleure productivité possible. Ces défauts sont en général de trois types : (i) le *keyhole* qui est dû à une évaporation excessive du métal, ce qui génère un capillaire conduisant à une porosité marquée, (ii) le *humping* qui est un mouvement turbulent associé à une différence de vitesse entre le gaz environnant et le métal liquide, (iii) le *balling* qui est une ségrégation en différentes gouttes fondues du bain de fusion par instabilité de Plateau-Rayleigh, qui provient de légères variations de courbure du bain de fusion, ce qui entraîne des variations de tension de surface, et (iv) le *lack-of-fusion* qui est dû à un manque de puissance par rapport à la vitesse du laser, ce qui conduit à une fusion partielle de la poudre métallique.

Ces phénomènes ont été étudiés de manière simplifiée de sorte que l'on dispose d'équations analytiques définissant la transition entre un domaine sans défaut et un domaine où l'instabilité se produit. Cependant ces analyses reposent sur des hypothèses sur la forme du bain de fusion parfois très contestables et sur des températures issues de formules analytiques très simplifiées. Ces formules permettent d'avoir un ordre de grandeur des frontières mais restent imprécises par rapport aux résultats expérimentaux. De plus, un certain nombre de paramètres ayant une influence ne sont pas pris en compte, et la gravité des défauts n'est pas caractérisée. Il existe également des approches extrêmement détaillées, mais dont le coût calculatoire interdit les études paramétriques.

Sur ce sujet, je co-encadre un post-doctorant d'un an<sup>3</sup>, avec Christophe Josserand (LadHyX, École Po-

---

3. dont il reste à recruter un.e jeune docteur.e

lytechnique) financé par AddUp sur le projet SOFIA. Nous avons proposé une approche hybride associant des calculs simplifiés et des calculs plus détaillés, pour construire une approche suffisamment précise et rapide pour investiguer les instabilités du bain de fusion dans l'espace des paramètres de fabrication et de caractériser les défauts résultants. Pour ce faire, nous disposons d'un logiciel de thermique simplifié très rapide, reposant sur une discrétisation aux différences finies, développé par Giovanni Magno dans le cadre du projet SOFIA. Ce code néglige les effets hydromécaniques dans l'équation de la chaleur, mais permet de calculer la géométrie et la température du bain de fusion dans le domaine de conduction, c'est-à-dire lorsqu'il n'y a pas d'instabilité. Le domaine de validité de ce modèle étant limité dans le bain de fusion pour certains paramètres de procédé, nous proposons un couplage avec un autre modèle existant, incluant les aspects fluides et le calcul des instabilités. Ce modèle nommé BASILIK repose sur des formulations en surface libre (*embedded boundary*) et une discrétisation par volume de fluide (*volume of fluid*). Ce couplage, pour être efficace, nécessite d'adapter et d'étendre les modèles existants, et par ailleurs d'établir des critères permettant de déterminer lorsque les calculs détaillés d'instabilité ne sont pas nécessaires pour réduire le coût calculatoire. L'une des applications de ce couplage est de cartographier les frontières des instabilités dans un espace puissance-vitesse laser en fixant les autres paramètres du procédé. En effet, c'est dans ce plan que l'on visualise le mieux la productivité dans les zones sans défaut majeur.

### **Axe 3 : Modèles macroscopiques à mésostructure**

#### **Plasticité de transformation (CIFRE ArcelorMittal)**

Après le développement du modèle analytique de plasticité de transformation présenté en section 3.3, je m'oriente vers le développement d'un modèle beaucoup plus ambitieux, qui intègre des descripteurs statistiques de la microstructure. Je développe ce sujet de recherche dans le cadre de la thèse CIFRE avec ArcelorMittal de Shahul Nambiyankulam, que je co-encadre avec Benoit Appolaire et Sabine Denis (Institut Jean Lamour, École des Mines de Nancy). Le programme de recherche est dans la veine des modèles de croissance de grain détaillés aux sections 3.4.1 et 3.4.2. L'idée principale est de s'appuyer sur des modélisations à l'échelle mésoscopique de transition de phase sous chargement mécanique et d'établir à l'échelle macroscopique des variables d'état, qui permettent de définir des potentiels macroscopiques d'énergie libre et de dissipation. Cependant, contrairement au modèle de croissance de grain, les transitions de phase et les aspects de plasticité cristalline sont lourds à calculer, par exemple avec une approche en champ de phase. Les modèles établis par Benoit Appolaire seront cependant d'une grande utilité pour sonder l'espace des possibles avec quelques calculs complets. Mais pour construire une large base de données, on s'appuiera également sur une approche très simplifiée à l'échelle mésoscopique, exploitant des tessellations de Voronoi-Laguerre, où les transitions de phase seront dans un premier temps imposées (et non obtenues via une loi d'évolution). Dans un second temps, on cherchera à établir une loi d'évolution pour les transitions de phase en intégrant l'énergie d'empilement atomique dans chaque grain, puis en générant de nouveaux grains par ajout de nouvelles graines (*seeds*) "dormantes" dans la tessellation de Voronoi-Laguerre, qui ne pourront croître que si le bilan énergétique est favorable. Sur cette base, des calculs de plasticité cristalline seront effectués en utilisant des méthodes de transformée de Fourier rapide, pour alléger le coût calculatoire. Il est fort probable que le modèle macroscopique obtenu soit stochastique comme le modèle de croissance de grain présenté en section 3.4.2.

L'ambition de ces recherches est de trouver un niveau de description de la mésostructure, par l'intermédiaire de variables d'état, qui représentent statistiquement l'arrangement des grains et de leurs orientations, de telle sorte que les phénomènes de plasticité de transformations soient bien décrits à l'échelle macroscopique en fonction des textures morphologique et cristallographique. Par ailleurs, ces travaux devraient permettre de rendre compte de la non-linéarité classique du taux de déformation de plasticité de transformation par rapport au champ de contrainte macroscopique pour les chargements importants. Cette non-linéarité est bien établie dans la littérature expérimentale, mais la plupart des modèles macroscopiques (y compris celui que j'ai proposé) conduisent à une relation linéaire.

#### **Fatigue à très grand nombre de cycles (bourse Pierre Ailleret EDF)**

Je m'attèle également à intégrer à l'échelle macroscopique des descripteurs statistiques de la mésostructure pour la fatigue à très grand nombre de cycles, dans le cadre de la thèse d'Insaf Echerradi financée par

une demi-bourse de l'École des Ponts ParisTech et un financement du fond Pierre Ailleret EDF, et que je co-encadre avec Michael Peigney (Navier, École des Ponts ParisTech).

Les phénomènes de fatigue dans les polycristaux sont probabilistes, pour un même chargement cyclique, deux éprouvettes macroscopiquement identiques ont en général des durées de vie différentes. Ceci provient en partie du fait que les microstructures présentent une certaine variabilité, même si les descripteurs statistiques sont identiques. L'approche traditionnelle consiste à établir expérimentalement des courbes S-N, qui relie le nombre de cycles à rupture et l'amplitude du chargement cyclique. Du fait de la nature aléatoire des phénomènes de fatigue, cette procédure expérimentale doit être répétée suffisamment pour être statistiquement représentative. On considère en général que la prédiction sécuritaire de la durée de vie, pour un niveau de chargement donné, se situe à la moyenne du nombre de cycles à rupture moins deux fois l'écart-type. Non seulement cette approche est lourde en termes d'efforts expérimentaux surtout pour la fatigue à très grand nombre de cycles, mais aussi insuffisante du point de vue de l'analyse des risques. Il est en effet, particulièrement difficile d'évaluer les événements rares, par exemple une distribution normale contient tout de même 2.5% des réalisations en deçà de deux fois l'écart-type. Pour contourner cette difficulté, il est classique de s'orienter vers des modèles mécaniques, qui reposent sur la capacité à calculer des structures polycristallines avec un grand nombre de grains. Ces approches permettent de calculer des structures bi-dimensionnelles de milliers de grains pour environ  $10^6$  cycles, ce qui peut être insuffisant pour aborder la fatigue à très grand nombre de cycles.

Dans ce projet on revisite l'idée de Dang Van de grain mal orienté par rapport au chargement, pour définir une loi de fatigue. On cherche à développer un modèle à l'échelle mésoscopique très peu coûteux pour simuler un très grand nombre de cycles dans les polycristaux. Ce modèle mésoscopique consiste à exploiter le fait que les chargements sont faibles pour introduire quelques approximations afin d'éviter des calculs de plasticité cristalline aux éléments finis. La première hypothèse consiste à considérer un comportement globalement élastique, en négligeant l'anisotropie du tenseur de raideur. Cela permet de traiter le polycristal comme un milieu homogène du point de vue de l'élasticité. En assignant une orientation cristalline dans chaque grain de la tessellation de Voronoi-Laguerre, on définit les systèmes de glissements possibles. Un cycle de chargement tensoriel, éventuellement complexe, est défini et on considère que les grains mal orientés par rapport au chargement sont suffisamment éloignés les uns des autres dans le VER. Enfin, pour éviter de déterminer le taux glissement plastique du grain par un calcul non-linéaire aux éléments finis, on approxime le grain mal orienté par un ellipsoïde soumis à une déformation libre, qui représente le glissement plastique à déterminer. On identifie ce dernier en minimisant l'énergie totale du polycristal comportant l'énergie potentielle et l'énergie dissipée par glissement plastique. Cette minimisation est analytique, grâce aux résultats très classiques d'Eshelby, ce qui permet d'obtenir des relations de récurrence pour calculer les cycles successifs. Le modèle mésoscopique que nous construisons permet, dans notre cadre limité d'hypothèses, de calculer très rapidement un très grand nombre de cycles en conservant des aspects statistiques de la mésostructure. Pour délimiter le domaine de validité de ce modèle simple, des calculs complets aux éléments finis sont produits sur un nombre réduit de cycles.

Un enjeu de ce projet est d'expliquer une partie de la variabilité du nombre de cycles à rupture par des variables d'état macroscopiques représentant statistiquement la mésostructure. Par ailleurs on s'attachera à modéliser les chargements de manière probabiliste, pour obtenir un modèle de probabilité de survie à  $N$  cycles dépendant des caractéristiques statistiques du chargement, qui deviennent donc aussi des variables explicatives du modèle. On envisage de construire un modèle statistique à l'échelle macroscopique, qui sera identifié sur la base de nombreux calculs (mésostructures et chargements variés) du modèle mésoscopique simplifié. L'identification Bayésienne de ce modèle probabiliste consistera à évaluer la probabilité a posteriori d'une théorie (ici la survie à  $N$  cycles en fonction des variables explicatives) sachant les données observées (ici les calculs numériques simplifiés).

## **Axe 4 : Identification de comportements en dynamique**

### **Comportement dynamique de matériaux architecturés (projet AID COMPOSITES)**

Je continue à développer des thématiques de recherche sur l'identification en dynamique, notamment en profitant de la très bonne installation de barres d'Hopkinson au LMS. Je porte notamment un projet aide innovation défense (AID) sur le "comportement dynamique des composites microarchitecturés" (COMPOSITES). Je collabore avec Andrei Constantinescu (LMS, École Polytechnique) et Pierre Margerit, dont j'ai

encadré le post-doctorat sur ce sujet. Plus récemment nous avons recruté Pierre-Louis Hanappier en tant qu'ingénieur au LMS, pour m'aider à poursuivre les travaux sur ce projet.

Le projet propose de combiner des matériaux architecturés obtenus par fabrication additive métallique servant de squelette avec des matériaux de remplissage en polymère, pour optimiser les capacités dissipatives sous chocs. On cherche donc à concevoir et fabriquer des matériaux composites architecturés par fabrication additive (squelette métallique et matrice polymère), à développer des procédures d'essais pour caractériser leurs propriétés sous sollicitations dynamiques, et à développer des outils de modélisation pour faciliter la compréhension et la conception des architectures et le choix des matériaux constitutifs. L'objectif global du projet étant de chercher et comprendre les combinaisons d'architecture et de matériau de remplissage les plus adaptées à la dissipation d'énergie.

Dans ce mémoire j'ai essayé de donner la mesure de la diversité de mes centres d'intérêt et des approches que j'ai pu développer. Je n'ai donc pas fait le choix de présenter un sujet particulier dans son ensemble avec son ancrage dans la littérature. J'espère que le texte auquel j'ai abouti ne se réduit pas à une simple énumération, et que la structure que j'ai choisie permet de donner une cohérence à l'ensemble de mes travaux et à mes motivations. Par ailleurs, il sera apparu au lecteur mon attachement aux applications, j'ai d'abord été un ingénieur avant de devenir chercheur. J'espère que cette courte présentation aura mis en valeur ma conviction, que les différents développements théoriques et mathématiques que j'ai menés, qu'ils soient anciens ou plus récents, sont loin d'être limités à la beauté du geste, et peuvent être exploités en vue de résoudre effectivement des problèmes concrets et utiles, souvent complexes et difficiles à appréhender.