



HAL
open science

À la recherche de la non-localité en mécanique des matériaux

Azdine Nait- Ali

► **To cite this version:**

Azdine Nait- Ali. À la recherche de la non-localité en mécanique des matériaux. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Poitiers, 2023. tel-04239463

HAL Id: tel-04239463

<https://hal.science/tel-04239463>

Submitted on 12 Oct 2023

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Dossier de candidature pour le Diplôme
d'Habilitation à Diriger des Recherches

Université de Poitiers

Présentée par :

Azdine Nait-Ali

**À la recherche de la non-localité en mécanique des
matériaux**

Table des matières

I	Introduction	1
II	Ma vie professionnelle :	
	Curriculum vitae, résumé des activités, liste des publications	5
0.3	Déroulé de carrière	7
0.3.1	Formations-Diplômes	7
0.4	Activités d'enseignement	8
0.4.1	Cycle Ingénieur en Formation initiale sous statut étudiant	8
0.4.2	Cycle Ingénieur en Formation initiale sous statut apprenti	9
0.5	Responsabilités collectives	9
0.5.1	À l'ISAE-ENSMA	9
0.5.2	Sociétés savantes et GDR	10
0.6	Publications et communications	10
0.6.1	Publications de rang A	10
0.6.2	Communications internationales	11
0.6.2.1	Communications internationales avec comité de sélection et d'expertise	12
0.6.2.2	Communications en tant qu'orateur	12
0.6.2.3	Communications internationales en tant que co-auteur	12
0.6.3	Communications nationales	14
0.6.3.1	Communications nationales en tant qu'orateur	14
0.6.3.2	Communications nationales en tant que co-auteur	14
0.6.4	Séminaires	15
0.6.4.1	Orateur	15
0.6.5	Co-auteur	15
0.6.6	Conférences invitées	15
0.6.6.1	Orateur	15
0.6.6.2	Co-auteur	16
0.7	Activités d'encadrement	17
0.7.1	Thèses de doctorat	17
0.7.1.1	Co-encadrement de Thèses	17
0.7.1.2	Participation à l'encadrement de Thèses	18
0.7.2	Autres encadrements	20
0.7.2.1	Encadrement de stage M2	20
0.7.2.2	Encadrement de stage M1	20

0.8	Diffusion et rayonnement	21
0.8.1	Participation à des jurys de thèses	21
0.8.2	Expertise d'articles et de communications	22
0.8.3	Autres expertises	22
0.8.4	Chairman de sessions	22
0.9	Organisation de colloques et workshop	22
0.10	Activités nationales et internationales	23
0.10.1	Accueil de chercheurs étrangers	23
0.10.2	Participation à des projets de recherche	23
0.11	Formations et stages spécialisés	24
0.12	Collaborations	24
III	Activités de recherche	27
1	Modélisation stochastique et non-locale	31
1.1	Théorie ergodique et Γ -convergence	31
1.2	Théorie ergodique	31
1.3	Γ -convergence	33
1.4	Modélisation de matériaux à fort gradient de propriété	34
1.5	Vers une modélisation non-locale en deux temps	35
1.5.1	Développement asymptotique	36
1.5.1.1	Développement asymptotique des champs mécaniques	37
1.5.1.2	Développement asymptotique sur la partie énergétique	38
1.5.2	Passage à la Γ -limite	43
1.5.2.1	Validation numérique	44
1.6	Conclusion	45
2	Recherche d'un matériau non-local	47
2.1	Caractérisation de microstructure à gradient pouvant entraîner un comportement non-local pour différents matériaux.	48
2.1.1	Utilisation du covariogramme	48
2.1.2	Matériaux Polymères :	50
2.1.2.1	Besoin de la compréhension mécanique ?	51
2.1.2.2	En résumé	52
2.1.3	Travaux autour des alliages de titane :	52
2.1.3.1	Les macrozones	52
2.1.3.2	Approche multi-échelle, prise en compte de la phase bêta	56
2.1.3.3	En résumé	56
2.1.4	Conclusion	56
3	Mes projets de recherches	59
3.1	Projets à très court terme	59
3.1.1	Matériaux composites :	59
3.1.1.1	Matériaux composites soumis au feu	59
3.1.1.2	Matériaux composites à microstructure complexe	60

3.2	Projets à moyen/long terme	61
3.2.1	Modélisation non-locale avec endommagement	61
3.2.2	Modélisation non-locale dans le cas des polycristaux.	61
3.2.3	Modélisation de l'endommagement des polymères en décompression rapide	61
3.2.4	Conclusion	62
3.3	Création /développement de logiciels	62
3.3.1	Solveur éléments finis	63
3.3.2	Implémentation d'un élément fini enrichi pour l'homogénéisation	63
3.3.3	Solveur spectral	63
3.3.4	Génération de microstructure polycristalline	65
3.3.4.1	Génération de macro-zone	65
IV	Conclusion	69

Première partie

Introduction

Préambule

En 2013, j'ai été recruté comme maître de conférences à l'ISAE-ENSMA, dans la section 60, où j'enseigne les mathématiques appliquées à la mécanique. Je suis également impliqué dans les recherches menées au sein de l'équipe Endo (Endommagement Durabilité) du Département Physique et Mécanique des Matériaux de l'Institut Pprime. Depuis, j'ai eu l'opportunité de partager mes connaissances et compétences avec mes collègues, ce qui a grandement facilité mon intégration et m'a permis de développer mes compétences en mécanique des matériaux.

Mes activités de recherche se concentrent sur la modélisation et la simulation multi-échelles, avec des développements théoriques et numériques qui s'appuient sur mes compétences de mécanicien et de mathématicien. Mes développements théoriques, combinant des approches asymptotiques, variationnelles et mathématiques, conduisent à des modèles non-locaux qui sont fortement connectés à la microstructure, et qui sont ensuite implémentés grâce à la mise en place d'Eléments Finis adaptés. J'ai centré cette partie de mon activité sur la modélisation non-locale, qui est naturellement liée aux travaux développés par [30],[31] et [15].

Les modèles non-locaux considèrent que la réponse d'un point du matériau dépend non seulement de la déformation en ce point, mais également de la déformation des points voisins, potentiellement à longue distance. Il existe plusieurs types de modèles différents. La première famille de modélisations que j'ai examinée permet de rendre compte des effets non-locaux, et ce sont les modèles du second gradient. Cette approche se fonde sur l'introduction de termes cinématiques d'ordre supérieur dans la relation de comportement du milieu.

Les modèles enrichis, qui font partie de cette famille de modèles du second gradient, donnent une description plus complète du comportement du milieu en utilisant des équations constitutives d'ordres supérieurs à celles utilisées dans le cas classique. Cependant, la prise en compte des conditions aux limites additionnelles génère des difficultés d'implémentation non négligeables, ce qui nécessite des procédures complexes. L'idée sous-jacente aux modèles explicites est d'augmenter l'ordre du développement limité permettant de calculer la déformation [34] ou la déformation équivalente [54]. Ainsi, les effets de localisation sont pris en compte grâce à un champ de déformations régularisées. D'autres approches plus phénoménologiques ont également été développées dans les années 60, telles que le modèle du second gradient de Toupin et Mindlin (1962, 1964) [61] et [43] ou le modèle de triple gradient de Mindlin (1965) citemindlin1965second. Enfin, dans [19] il est présenté une généralisation de ces modèles en tenant compte des gradients de déformation à tous les ordres.

En tant que chercheur travaillant dans un laboratoire spécialisé dans l'étude des mécanismes d'endommagement de différentes classes de matériaux, j'ai consacré mes recherches aux modèles à gradient d'endommagement. Ces modèles offrent un cadre général pour la formulation des lois d'endommagement à gradient, en modifiant la forme de l'énergie de déformation pour y inclure des termes de gradient d'endommagement, comme cela est décrit dans la théorie linéarisée pour un matériau isotrope.

Plusieurs études antérieures, notamment [55], [58], [56], et [3], ont proposé l'introduction de termes de gradient d'endommagement dans l'énergie de déformation pour éviter la localisation de l'endommagement. Bien que la loi d'évolution de l'endommagement reste formellement la même que celle de la loi d'évolution standard, elle s'écrit toujours en termes des trois principes d'irréversibilité, de stabilité, et de conservation de l'énergie.

Grâce à ces études, j'ai pu établir un lien entre mes modèles de recherche antérieurs (dans le cadre de ma thèse) et mon projet d'intégration dans mon nouveau laboratoire. Cette compréhension m'a permis de me positionner et de développer cette partie de mon activité de recherche.

Le deuxième aspect de mes activités de recherche porte sur la caractérisation des microstructures (réelles ou virtuelles) par analyse d'images et mesures morphologiques, ainsi que sur les simulations en champs complets. Je développe également des outils spécialisés dans ce domaine. L'objectif principal est de mieux comprendre les mécanismes de déformation et d'endommagement de différentes classes de matériaux (tels que les polymères, les composites et les alliages métalliques) soumis à des chargements complexes et multi-physiques. Cette dimension transversale de mes activités alimente et s'appuie sur différentes thématiques de recherche menées au sein de l'équipe, en plus d'enrichir mon travail théorique.

Dans la première partie de mon manuscrit, je présente en détail mes activités dans les domaines de l'enseignement, de la recherche et de l'administration, sous forme de CV. Cette partie est très importante dans notre métier car elle permet de mettre en perspective les différentes facettes du métier d'enseignant-chercheur. Ensuite, je présente une sélection de mes travaux scientifiques.

Bien que mon parcours universitaire soit basé sur les mathématiques appliquées, j'ai commencé à explorer la mécanique lors de ma thèse. Depuis lors, mes recherches se concentrent sur la relation entre les mathématiques et la mécanique, que ce soit dans la modélisation ou la caractérisation de la microstructure. Je suis conscient que mes travaux et activités peuvent paraître divers et peu cohérents vus de l'extérieur, mais dans ce manuscrit, je m'efforce de démontrer qu'ils sont cohérents. Ainsi, cette demande d'Habilitation à Diriger des Recherches me permet de démontrer la cohérence de mes activités passées et présentes avec mon projet de recherche.

Deuxième partie

**Ma vie professionnelle :
Curriculum vitae, résumé des activités,
liste des publications**

Les performances individuelles,
ce n'est pas le plus important.
On gagne et on perd en équipe.
Z.Zidane

Curriculum Vitae

Azdine NAIT-ALI
39 ans
Marié, 3 enfants

0.3 Déroulé de carrière.

- **Septembre 2013-actuellement** : Maître de Conférences (Section CNU 60) à l'École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique de Poitiers (ISAE-ENSMA) et au Département Physique et Mécanique des Matériaux de l'Institut Pprime (équipe endommagement et durabilité).
- **Février 2013** : Qualification Maître de Conférences, CNU 26 et 60.
- **2012-2013** : ATER à l'Université de Montpellier.

0.3.1 Formations-Diplômes

- **2009-2012** : Thèse de Doctorat spécialité Mécanique : Matériaux aléatoirement renforcés de Type TexSol : Modélisation variationnelle par homogénéisation stochastique.
Directeurs : S. Pagano et G. Michaille
- **2008-2009** : Master 2 Mathématiques appliqués à l'université Montpellier 2
- **2007** : Licence Mathématiques appliqués à l'université de Nîmes

Comme tout enseignant-chercheur, notre métier est double. D'un côté, l'enseignement et de l'autre, la recherche. J'ai eu la chance d'être recruté dans l'objectif de répondre à un besoin en enseignement autour des mathématiques pour la mécanique, et côté recherche, un besoin en modélisation en mécanique des matériaux. Ce poste est exactement adapté à mon profil et correspond à mon projet de recherche. En effet, je souhaite avoir une activité de recherche et d'enseignement qui soit bipartite, avec une partie consacrée aux aspects très théoriques du point de vue mathématique et une autre partie consacrée à l'application de ces théories à la mécanique des matériaux. C'est exactement le poste que je recherchais

0.4 Activités d'enseignement

Dès mon recrutement, une UE (Unité d'Enseignement) de Calcul scientifique était en pleine construction. J'ai donc eu la possibilité de construire cette UE avec les collègues de l'école. Depuis, je suis responsable de cette UE, et j'enseigne plus particulièrement sur la partie Analyse mathématique. L'autre aspect de cette UE concerne la discrétisation d'EDP (Équation aux Dérivées Partielles). Depuis le départ à la retraite d'un collègue, j'organise et coordonne les enseignements de mathématiques de l'école, tant du point de vue logistique que du point de vue du contenu pédagogique. Chaque année, nous essayons d'adapter nos enseignements aux étudiants tout en gardant en ligne de mire des exigences élevées du point de vue théorique

Mon service d'enseignement est d'environ **265 heures/an en moyenne** (hors charges administratives) depuis mon recrutement en 2013. Cela comprend chaque année, au minimum, **30 cours magistraux et 130 séances de TD en calcul scientifique et analyse et 3 examens de promotion complète soit \approx 600 copies à corriger.**

Avec un collègue, je m'occupe des enseignements de mathématiques dans les formations Ingénieur et Apprentissage de l'ISAE-ENSMA. En plus de la partie pédagogique (cours, TD, projets, examens), cela consiste à animer, rechercher et gérer les intervenants dans cette discipline.

Les modules dont je suis responsable seront plus détaillés ci-après.

0.4.1 Cycle Ingénieur en Formation initiale sous statut étudiant

- Depuis 2013 : **Calcul scientifique deuxième année (245h)** Cet enseignement se compose de 19 séances de cours et 19 séances de Travaux dirigés (TD), et aborde plusieurs sujets tels que l'analyse mathématique, les problèmes aux limites, les systèmes hyperboliques et discontinus, les espaces de Sobolev, ainsi qu'une brève introduction à la méthode des éléments finis et à l'optimisation. Plus spécifiquement, les thèmes abordés en optimisation incluent le calcul des variations, les algorithmes à gradients, l'optimisation non-linéaire sous contraintes, ainsi que les méthodes de Lagrangien.
- Depuis 2021 : **Probabilités et Statistiques deuxième année (99h)** Cet enseignement est composé de 7 cours et 7 séances de TD. Je l'ai récupéré récemment et il sera modifié petit à petit chaque année pour aller vers de l'IA. Ce travail est fait conjointement avec les collègues informaticiens de l'école.

Je participe également à l'encadrement de groupe en projet calcul scientifique, les sujets proposés sont autour de la transition d'échelle avec des problèmes 1D et 2D.

0.4.2 Cycle Ingénieur en Formation initiale sous statut apprenti

Depuis 2021 je participe aux enseignements de Mathématiques en première année d'apprentissage de ISAE-ENSMA (environ 100 heures). Ces enseignements traitent :

- Optimisation (12h) : Moindres carrés - Fonctions de plusieurs variables - Descente du gradient (sans contrainte)
- Analyse fonctionnelle (6h) : Théorèmes d'intégration - Espace L^1, L^2 et L^∞ - Définition d'un espace de Hilbert réel
- Harmonique (12h) : Transformée de Fourier Discrète - Série de Fourier - Transformée de Laplace
- Équations aux Dérivées Partielles (15h) : Théorie elliptique - Théorie parabolique - Théorie hyperbolique
- Méthodes numériques et simulations (25h) : Différences finies - Éléments finis - Volumes finis
- Probabilités (12h) : Variable aléatoire réelle - Théorème central limite - Vecteur aléatoire
- Statistique (18h) : Régression linéaire - Estimation paramétrique - Tests.

0.5 Responsabilités collectives

0.5.1 À l'ISAE-ENSMA

Depuis 2013 je participe à plusieurs conseils au sein de l'école, de par la taille de cet établissement, il est important pour moi de participer à différents conseils pour aider le collectif d'une part, mais aussi pour comprendre le fonctionnement d'un tel établissement. Les différents conseils sont listés ci-après (j'énumère en gras et avec plus de détails les mandats en cours) :

- **Membre élu Conseil d'administration de l'ENSMA depuis 2021**
Les prérogatives de cette instance portent sur des questions telles que le budget de l'établissement, les recrutements, les promotions/primes, et ainsi de suite. Cela se traduit par quatre séances plénières et environ douze séances en formation restreinte.
- **Membre élu et vice-président de la Commission d'Expertise Scientifique depuis 2021**
Les prérogatives de cette instance concernent des questions telles que la formation de jury de thèse, de jury d'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR), de comités de sélection, et autres sujets similaires.
- Membre élu du Conseil des Études de 2017-2020
- Membre élu du Comité technique de 2017-2019
- Membre du Sénat académique (ex-commission de choix) depuis 2017
- Membre élu du Conseil de Perfectionnement 2014-2018

0.5.2 Sociétés savantes et GDR

- Membre élu du comité CSMA-Junior de 2017-2021
- Représentant (CSMA-Junior) pour l'AFM auprès de la Fédération Française des Matériaux de 2018-2021
- **GDR ALMA (Alliages métalliques par/pour la fabrication additive) depuis 2020**

0.6 Publications et communications

0.6.1 Publications de rang A

- [1] A. Huet, A. Naït-Ali, T. Giroud, P. Villechaise, S. Hémerly, Onset of plastic deformation and strain localization in relation to α/β phase in metastable and dual phase Ti alloys, *Acta Materialia*, 240 (2022) 118348.
- [2] T Yvinec, A.Nait-Ali, D Mellier, D Bertheau, J Cormier, P Villechaise, L Rat, and S H'emery. Tensile properties of Ti-6Al-4V as-built by laser metal deposition : The relationship between heat affected zone bands, strain localization and anisotropy in ductility. *Additive Manufacturing*, 55 :102830, 2022.
- [3] K-H N'Tsouaglo, X. Milhet, J. Colin, L. Signor, A. Nait-Ali, J. Creus, M. Gueguen, Pascal Gadaud, and Marc Legros. Time'aResolved Evolution of the 3D Nanoporous Structure of Sintered Ag by X-Ray Nanotomography : Role of the Interface with a Copper Substrate. *Advanced Engineering Materials*, 24(1) :2100583, jan 2022.
- [4] A. Nait-Ali, S. Hémerly, and M. Gueguen. How macrozone size and morphology influence yield in titanium alloys invesigated using fast Fourier transform-based crystal plasticity simulations How macrozone size and morphology influence yield in titanium alloys invesigated using. *International Journal of Solids and Structures*, 2021.
- [5] M. Fazal, S. Castagnet, A. Nait-Ali, and S. Nishimura. Local kinetics of cavitation in hydrogen-exposed EPDM using in-situ X-Ray tomography : Focus on free surface effect and cavity interaction. *Polymer Testing*, page 106723, 2020.
- [6] S. Ben Elhaj Salah, A. Nait-Ali, M. Gueguen, and C. Nadot-Martin. Non- local modeling with asymptotic expansion homogenization of random materials. *Mechanics of Materials*, 147 :103459, aug 2020.
- [7] S. Hémerly, A. Nait-Ali, M. Guéguen, J. Wendorf, A.T. Polonsky, M.P. Echlin, J.C. Stinville, T.M. Pollock, and P. Villechaise. A 3D analysis of the onset of slip activity in relation to the degree of micro-texture in Ti-6Al-4V. *Acta Materialia*, 181 :36-48, dec 2019
- [8] S. Castagnet, A. Nait-Ali, and H. Ono. Effect of pressure cycling on decom- pression failure in EPDM exposed to hight-pressure hydrogen. In *Constitutive models for rubber XI*, pages 168-173. CRC Press/Balkema, 2019.

- [9] A. Nait-Ali. Stochastic homogenization of reinforced polymer with very small carbon inclusions. *Comptes Rendus - Mécanique*, 346(12) :1192-1198, dec 2018.
- [10] H. Ono, A. Nait-Ali, O. Kane Diallo, G. Benoit, and S. Castagnet. Influence of pressure cycling on damage evolution in an unfilled EPDM exposed to high-pressure hydrogen. *International Journal of Fracture*, 210(1-2), 2018.
- [11] X. Milhet, A. Nait-Ali, D. Tandieng, Y.-J. Liu, D. Van Campen, V. Caccuri, and M. Legros. Evolution of the nanoporous microstructure of sintered Ag at high temperature using in-situ X-ray nanotomography. *Acta Materialia*, 156, 2018.
- [12] S. Hémery, A. Nait-Ali, M. Guéguen, and P. Villechaise. Mechanical study of crystalline orientation distribution in Ti-6Al-4V : An assessment of micro-texture induced load partitioning. *Materials and Design*, 137(137) :22-32, 2018.
- [13] S. Castagnet, D. Mellier, A. Nait-Ali, and G. Benoit. In-situ X-ray computed tomography of decompression failure in a rubber exposed to high-pressure gas. *Polymer Testing*, 70(June) :255-262, 2018.
- [14] A. Nait-Ali. Nonlocal modeling of a randomly distributed and aligned long-fiber composite material. *Comptes Rendus - Mécanique*, 345(3) :192-207, 2017.
- [15] S Hémery, A. Nait-Ali, and P Villechaise. Combination of in-situ SEM tensile test and FFT-based crystal elasticity simulations of Ti-6Al-4V for an improved description of the onset of plastic slip. *Mechanics of Materials*, 109 :1-10, 2017.
- [16] O. Kane-Diallo, S. Castagnet, A. Nait-Ali, G. Benoit, and J-C Grandidier. Time-resolved statistics of cavity fields nucleated in a gas-exposed rubber under variable decompression conditions -a Support to a relevant modeling framework. *Polymer Testing*, 2016.
- [17] A. Nait-Ali, O. Kane-Diallo , and S. Castagnet. Catching the time evolution of microstructure morphology from dynamic covariograms. *C. R. Mécanique*, 343 :301-306, 2015.
- [18] O. Kane Diallo, S. Castagnet, J.C. Grandidier, A. Nait-Ali. Morphology of damage occurring during decompression in a hydrogen-exposed EPDM. *Constitutive Models for Rubber IX*, 345, 2015.
- [19] A. Nait-Ali. Volumic method for the variational sum of a 2D discrete model. *Comptes Rendus - Mécanique*, 2014.
- [20] G. Michaille, A. Nait-Ali, and S. Pagano. Two dimensional deterministic model of a thin body with randomly distributed high conductivity fibers. *Applied Mathematics Research eXpress*, 1 :122-156, 2012
- [21] G. Michaille, A. Nait-Ali, and S. Pagano. Macroscopic behavior of a randomly fibered medium. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 96 :230-252, 2011.

0.6.2 Communications internationales

Ici, je présente une liste de toutes les communications nationales et internationales auxquelles j'ai participé de manière significative. J'ai distingué celles pour lesquelles j'ai été orateur et celles pour lesquelles j'ai été co-auteur. Il est important de noter que cette liste n'est pas exhaustive, en particulier pour celles où j'ai été co-auteur.

0.6.2.1 Communications internationales avec comité de sélection et d'expertise

0.6.2.2 Communications en tant qu'orateur

1. **A. Nait-Ali**, A. Huet, T. Giroud, P. Villechaise, S. Hémerly : β grain structure in dual phase Ti alloys investigated using experiments and simulations; ESMC2022 Galway Ireland; 2022.
2. **A. Nait-Ali**, A. Huet, T. Giroud, S. Hémerly : Strain localization in metastable beta Ti alloys in relation to the beta structure; TMS Anaheim USA, 2022;
3. **A. Nait-Ali**, R. Bordas, S. Rix, L. Rat, R. Fortunier, D. Bertheau, P. Villechaise, J. Cormier : Variability in mechanical properties related to porosity in LMD Waspaloy; TMS 2021 (Présentation en ligne pour cause de crise sanitaire).
4. **A. Nait-Ali**, M. Gueguen, S. Hemery : Macro-zone Size Effect in Polycrystal Alloys Compute with FFT-based Crystal Elastic-Visco-Plastic Simulations of Structured Polycrystal; TMS San Antonio, Texas; 2019;
5. **A. Nait-Ali**, M. Gueguen, S. Hemery : Macro-zone Size Effect in Polycrystalline Ti-Alloys Computed with FFT-based Crystal Elastic-Visco-Plastic Simulations of Structured Polycrystal; TMS San diego, CA; 2018
6. **A. Nait-Ali**, M. Gueguen, S. Hemery : Macro-zone Size Effect in Polycrystalline Ti-Alloys Computed with FFT-based Crystal Elastic-Visco-Plastic Simulations of Structured Polycrystal; WCCM New-york; 2018
7. **A. Nait-Ali** : A non-local model of a randomly fibered medium; XXIV ICTAM; Montreal, Canada; 2016
8. **A. Nait-Ali** : Stochastic model of fibered medium; EMMC2014; Goteborg; 2014
9. **A. Nait-Ali**, G. Michaille, S. Pagano : Strategy of Modeling the behavior of Randomly Reinforced Materials by Stochastic Homogenization.; usnccm12 Raleigh; 2013
10. **A. Nait-Ali** Gérard Michaille, Stéphane Pagano. Two Dimensional Deterministic Model of a Thin Body with Micro High Stiffness Fibers Randomly Distributed ESMC 2012, Graz Austria, 2012.

0.6.2.3 Communications internationales en tant que co-auteur

1. M. V. Sazerat, **A. Nait-Ali**, A. Cervellon, L. Barot, I. Lopez-Galilea, D. Eyidi, A. Joulain, S. Weber, P. Villechaise, J. Cormier, R. Fortunier : Long-term stability of Waspaloy produced by Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM), Superalloy 718 and Derivatives 2023 , Pittsburgh, Pennsylvania, USA.
2. X. Milhet, J. Colin, K. N'Tsouaglo, L. Signor, **A. Nait-Ali**, On the thermal aging of the nanoporous structure of sintered Ag on a Cu substrate, TMS2023 San Diego

3. R. Bordas, M. Calvat, J. Cormier, **A. Nait-Ali**, P. Villechaise, R. Fortunier, Numerical Investigation of the Strain Development at the Substrate / Laser Metal Deposition - powder Refurbishment Interface, TMS2023 San Diego
4. M. V. Sazerat, **A. Nait-Ali**, A. Cervellon, L. Barot, P. Villechaise, J. Cormier, R. Fortunier : Microstructure and monotonic properties of as-deposited Waspaloy produced by Wire Arc Additive Manufacturing (WAAM) EuroSuperalloys 2022, Bamberg Allemagne.
5. S. Hémerly, **A. Nait-Ali**, M. Gueguen ; O. Smerdova ; T. Christophe ; Strain Accommodation Mechanisms in the Near Alpha Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo Alloy Studied Using Experiments and Simulations : TMS2022, Anaheim, 2022
6. S. Hémerly, **A. Nait-Ali**, Anais Huet ; Thomas Yvinec ; Tiphaine Giroud, J. Wendorf, J-C Stinville, McLeanEchlin, T Pollock, J Cormier, L. Signor, P Villechaise, M. Gueguen Mechanical Behavior of Ti Alloys in Relation to the Microstructure across Lengthscales : TMS2022, Anaheim, 2022
7. X. Milhet, K.H. N'Tsouaglo, J. Colin, L. Signor, **A. Nait-Ali**, M. Gueguen P. Gadaud, M. Legros, J. Creus, Time Resolved Evolution of the 3D nanoporous Structure of Sintered Ag by X-Rays Nanotomography : Role of the Interface with a Cu substrate, TMS2022, Anaheim, 2022
8. S. Hémerly, **A. Nait-Ali**, L. Signor, P. Villechaise, M. Echlin, J. Wendorf, J. Stinville, T. Pollock, M. Gueguen , How Microtextured Regions Influence the Early Slip Activity in Ti Alloys TMS2021 ;
9. S. Hémerly, **A. Nait-Ali**, M. Gueguen, J. Wendorf, M. Echlin, J.-C. Stinville, T. Pollock, P. Villechaise, Effect of microtextured regions on the early plastic deformation of Ti-6Al-4V : EVP-FFT simulations of realistic polycrystals reconstructed using 3D EBSD : TMS San Antonio, Texas ; 2019 ;
10. S. Hémerly, C. Lavogiez, **A. Nait-Ali**, M. Guéguen, P. Villechaise Why do titanium alloys withstand more strain under dwell-fatigue than under fatigue loadings : , Titanium 2019 (2019)
11. H. Ono, **A. Nait-Ali**, S. Castagnet, G. Benoit, S. Nishimura. Influence of the decompression process on the internal damage evolution in the transparent EPDM through the high-pressure hydrogen exposure cycling, International Rubber Conference, London ,2019
12. S. Ben, Elhaj Salah, **A. Nait-Ali**, C. Nadot, M. Gueguen. Non-local modeling : Macroscopic behavior of a randomly voided material and influence of inclusion morphology on the elastic properties gradient. EMMC, Mar 2018, Nantes.
13. S. Ben, Elhaj Salah, **A. Nait-Ali**, C. Nadot, M. Gueguen. Mikaël Gueguen, Carole Nadot-Martin. Asymptotic behavior of a randomly voided material with elastic properties gradient. WCCM 13th World Congress in Computational Mechanics, Jul 2018, New-york, United States
14. S. Hémerly, **A. Nait-Ali**, L. Signor, P. Villechaise CRSS estimation in titanium alloys : influence of elastic anisotropy and local texture : (EBSD 2017)
15. X. Milhet, **A. Nait-Ali**, D. Tandiag, M. Legros, Yijin Li, D. Van Campen, In-situ evolution of the nanoporous structure of sintered Ag at high temperature, TMS2017, San Diego, 2017

16. O. Kane Diallo, S. Castagnet, J.C. Grandidier, , **A. Nait-Ali**, Morphology of damage occurring during decompression in a hydrogen-exposed EPDM. ECCMR2015, Prague, 2015

0.6.3 Communications nationales

0.6.3.1 Communications nationales en tant qu'orateur

1. **A. Nait-Ali** : Non-local modeling of a randomly voided material and influence of inclusion morphology on the elastic property gradient.; Congrès National d'Analyse Numérique, Evian-les Bains; 2022
2. **A. Nait-Ali**, S. Hémerly, M. Guéguen : Effet de taille de macro-zone dans les alliages de titane calculé par simulations FFT- EVP; Journée Matériaux Numériques; Tours; 2019
3. **A. Nait-Ali**, N. Blal : Homogénéisation par sommation variationnelle Application au cas des matériaux à gradient de propriétés. CSMA, Giens, 2015.
4. **A. Nait-Ali**, G. Michaille, S. Pagano. Stratégie de modélisation de matériaux aléatoirement renforcés; CSMA2013, Giens, 2013.
5. **A. Nait-Ali** G. Michaille , S. Pagano. Problèmes non-locaux en mécanique du solide : modélisation variationnelle de matériaux de type Texpol par homogénéisation stochastique. 10e colloque national en calcul des structures, Giens, 2011

0.6.3.2 Communications nationales en tant que co-auteur

1. S. Ben, Elhaj Salah, M. Gueguen , **A. Nait-Ali** .Session logiciel : Présentation des outils/codes numériques FoXtroT et S2M 15e colloque national en calcul des structures, Giens, 2022
2. S. Ben, Elhaj Salah, **A. Nait-Ali** M. Gueguen. Modélisation non-locale : influence de la morphologie de défauts sur les gradients de propriétés au sein d'un matériau métallique, Aussois, 2018
3. X. Milhet, S. Castagnet, **A. Nait-Ali**, D. Tandiag, L. Signor, Y. Liu, D. Van Campen, M. Legros .Étude de l'évolution de la structure nanoporeuse de l'argent fritté au cours du vieillissement thermique par nanotomographie in situ, Matériaux 2018, Strasbourg, 2018
4. S. Ben, Elhaj Salah, **A. Nait-Ali** M. Gueguen. Effets d'agrégation de phases sur les propriétés élastiques d'un matériau hétérogène 13e colloque national en calcul des structures, Giens, 2017
5. X. Milhet, L. Signor, **A. Nait-Ali**, M. Gueguen, K. H. N'Tsouaglo, J. Colin, J. Creus, M. Legros, Evolution temps/température de la structure nanoporeuse d'une pâte d'Ag frittée sur un substrat Cu suivi par tomographie in-situ, Matériaux 2022 (Lille)

6. X. Milhet, **A. Nait-Ali**, K. H. N'Tsouaglo, J. Colin, L. Signor, J. Creusb, M. Gueguena, P. Gadaud, M. Legros, Evolution temps/température de la nanostructure poreuse d'une pâte d'Ag frittée par nano-tomographie in-situ : rôle d'une interface avec un substrat de Cu, JA SF2M 2021 (on line)

0.6.4 Séminaires

0.6.4.1 Orateur

- **A. Nait-Ali**, : Modélisation et/ou comportement non-local en mécanique des matériaux : Laboratoire de Mécanique et Génie Civile Montpellier ; 2019
- **A. Nait-Ali**, : Modélisation variationnelle par homogénéisation stochastique : LMNO (Laboratoire de Mathématiques Nicolas Oresme) Caen ; 2013.

0.6.5 Co-auteur

- M. SAZERAT, **A. Nait-Ali**, L. Barot, A. Cervellon, P. Villechaise, J. Cormier, R. Fortunier, Microstructure et propriétés monotones du Waspaloy élaboré par fabrication additive arc-fil (WAMM-CMT) ; Séminaire invité à l'ICA Toulouse 23/11/2022
- X. Milhet, K.H. N'Tsouaglo, J. Colin, L. Signor, **A. Nait-Ali**, M. Gueguen P. Gadaud, V. Caccuri, M. Legros, J. Creus, YiJin Li, D. Van Campen, J. Carr, P.D. Lee, Contraintes d'élaboration / microstructure et élasticité : apport de la nano-tomographie in-situ en température pour le vieillissement de l'Ag fritté pour le report des puces dans les modules d'électronique de puissance ; Séminaire invité - GdR Concord 2021 (on line)

0.6.6 Conférences invitées

0.6.6.1 Orateur

- **A. Nait-Ali**, : Méthodes mathématiques pour la transition d'échelle (approches variationnelles et asymptotiques). Journée thématique F2M sur le thème "Approches multi-échelles en mécanique des matériaux" 2023.
- **A. Nait-Ali**, : Non-local modeling of a randomly voided material and influence of inclusion morphology on the elastic property gradient. CANUM (Congrès National d'Analyse Numérique) 2022. **(Keynote)**

- **A. Nait-Ali**, Castagnet S, O. Kane Diallo, D. Mellier, G. Benoit, H. Ono, S. Nishimura :Statistical and image analysis in materials science.Kyushu University Energy Week 2019 (JAPON).
- **A. Nait-Ali** , : A non-local model of a randomly fibered medium ; ICTAM Montréal 2016. **(Keynote)**

0.6.6.2 Co-auteur

- Castagnet S., **A. Nait-Ali**, Mellier D., Benoit G., Pannier Y., Fazal M., Scheel M., Weitekamp T., Decompression failure mechanisms in hydrogen-exposed rubbers : insights from in-situ 3D tomography using synchrotron source, Materials Research Society Fall Meeting, December 2021 (Boston) 6-8 December 2021 (virtual) Invited keynote in Symposium EN14 : Advanced Materials for Hydrogen and Fuel Cell Technologies
- Cormier J., **A. Nait-Ali**, et al. Creep and fatigue durability of Ni-based superalloys processed by PBF/LMD : application to Inconel 718, Waspaloy, RenE 65 and CMSX-4, WAAM2021, Grenoble
- S. Castagnet, **A. Nait-Ali**, J.C. Grandidier, M. Gueguen, G. Benoît, D. Mellier, Cavitation in rubbers exposed to high-pressure hydrogen : in-situ characterization of the phenomenon and modelling at the cavity scale, Workshop on the Multiphysics Behavior of Rubber, Marseille, 30 nov-01 dec 2017
- S. Castagnet, **A. Nait-Ali**, D. Mellier, G. Benoit, H. Ono, S. Nishimura, Statistical analysis of cavitation damage in EPDM during hydrogen decompression, International Hydrogen Energy Development Forum 2017, Kyushu, 2-3 Février 2017.
- S. Castagnet, O. Kane Diallo, **A. Nait-Ali**, J.C. Grandidier, Statistical analysis of cavitation damage in EPDM during hydrogen decompression, International Hydrogen Energy Development Forum 2015, Kyushu, 3-4 Février 2015.

En résumé 0.6.1. * 21 articles dans des revus de rang A

- * 26 conférences internationales $\left\{ \begin{array}{l} 10 \text{ en tant qu'orateur,} \\ 16 \text{ en tant que co-auteur.} \end{array} \right.$
- * 11 conférences nationales $\left\{ \begin{array}{l} 5 \text{ en tant qu'orateur,} \\ 6 \text{ en tant que co-auteur.} \end{array} \right.$
- * 2 séminaires dans des laboratoires Français en tant qu'orateur
- * 2 séminaires dans des laboratoires Français en tant que co-orateur
- * 4 Conférences invitées en tant qu'orateur
- * 5 Conférences invitées en tant que co-auteur

0.7 Activités d'encadrement

0.7.1 Thèses de doctorat

0.7.1.1 Co-encadrement de Thèses

— *S. Ben Elahj Salah (2016-2019) :*

- **Titre :** *Modélisation non-locale et stochastique de matériaux 'a fort gradient de propriétés par développement asymptotique*
- **Encadrement :** *A. Nait-ali(50%), C. Nadot(30%), M. Gueguen(20%)*
- **Année de soutenance :** *2019*
- **Financement :** *Bourse Ministère*
- **Poste permanent après la thèse :** *Ingénieur de Recherche Numérique (ONERA)*
- **Publication :** *1*
- **Conférences :** *2 conférences internationales et 1 nationale*

— *M. Abdoussalam :*

- **Titre :** *Modélisation du comportement de matériaux composites soumis à des chargements thermomécaniques*
- **Encadrement :** *A. Nait-ali(33%), D. Halm(34%), B. Batio(33%)*
- **Début de Thèse** *Octobre 2021*
- **Financement :** *Labex Interactifs et Région nouvelle Aquitaine*
- **Publication :** *0*

- **Conférences** : 0

— *M. Sazerat* :

- **Titre** : *Optimisation du procédé CMT (Cold Metal Transfer) pour la réparation de composants aéronautiques*
- **Encadrement** : *P. Villechaise(34%), R. Fortunier(33%), A. Nait-Ali(33%)*
- **Début de Thèse** *Janvier 2021*
- **Financement** : *Feder-OPERA Safran Châtellerault*
- **Publication** : 1
- **Conférences** : 2 conférences internationales

— *C. Le Talludec* :

- **Titre** : *Résistance polyamide au cumul des dommages dûs au cyclage d'hydrogène à haute pression et au chargement de fatigue*
- **Encadrement** : *S. Castagnet(75%), A. Nait-Ali(25%)*
- **Début de Thèse** *Octobre 2021*
- **Financement** : *ANR Pasifhyc*
- **Publication** : 0
- **Conférences** : 0

— *H. El Mansouri* :

- **Titre** : *Modélisation variationnelle et non-locale de matériaux structurés*
- **Encadrement** : *A. Nait-ali(50%), D. Halm(30%), M. Gueguen(20%)*
- **Début de Thèse** *Octobre 2022*
- **Financement** : *Bourse Ministère*
- **Publication** : 0
- **Conférences** : 0

0.7.1.2 Participation à l'encadrement de Thèses

J'ai participé activement à certaines thèses sans taux d'encadrement "officiel". Ces thèses sont listées ci-après. Pour chacune d'elles, je liste seulement les publications et conférences pour lesquelles je suis co-auteur.

— *O. Kane-Diallo* :

- **Titre** : *Analyse morphologique des champs de cavités dans un élastomère sous décompression d'hydrogène : Influence des conditions de décompression et effets d'interaction*
- **Encadrement** : *S. Castagnet, J-C Grandidier*
- **Année de soutenance** : 2015
- **Financement** : *Bourse Ministère*
- **Poste après la thèse** : *Ingénieur d'étude*
- **Publication** : 4
- **Conférences** : 2

— *M. Fazal* :

- **Titre** : *In-Situ Investigation of Cavity Nucleation and Growth in Hydrogen-Exposed EPDM during Decompression*
- **Encadrement** : *S. Castagnet, S. Nishimura*
- **Année de soutenance** 2019
- **Financement** : *Bourse Labex interactif*
- **Publication** : 1
- **Conférences** : 1

— *K-H N'Tsouaglo* :

- **Titre** : *Évolution des propriétés mécaniques d'un matériau nanoporeux au cours de son vieillissement : essais, caractérisation structurale et modélisation*
- **Encadrement** : *X. Milhet, L. Signor, P. Gadaud*
- **Année de soutenance** 2022
- **Financement** : *Ministère*
- **Publication** : 1
- **Conférences** : 2

— *R. Bordas* :

- **Titre** : *Optimisation du procédé LMD (Laser Metal Deposition) pour la réparation de composants aéronautiques*
- **Encadrement** : *R. Fortunier, P. Villechaise, S. Rix*
- **Début de Thèse** 2020
- **Financement** : *Feder-OPERA Safran Chatellerault*
- **Publication** : 0
- **Conférences** : 2

0.7.2 Autres encadrements

0.7.2.1 Encadrement de stage M2

— X. TANDI :

- **Titre** : *Méthode d'homogénéisation sans maillage.*
- **Année** : 2015

— S. Ben-Elhaj Salah :

- **Titre** : *Simplification morphologique à partir d'analyses d'images : effets d'agrégation de phases sur les propriétés élastiques d'un matériau*
- **Année** : 2016

— D. Chinh DANG :

- **Titre** : *Évolution de la structure nanoporeuse 3D au cours du vieillissement thermique de l'argent fritté*
- **Année** : 2017

— E. Nghenzi :

- **Titre** : *Influence de la morphologie des macrozones sur le champ de contrainte des alliages de titane*
- **Année** : 2018

0.7.2.2 Encadrement de stage M1

Ici, je souhaite mettre en avant les encadrements de stages de niveau Master 1 donnant lieu à au moins une communication internationale ou un article.

— A. Huet :

- **Titre** : *Simulations CP-FFT du lien entre la structure granulaire β et les hétérogénéités de déformation plastique dans les alliages de titane β métastable*
- **Année** : 2021
- **publication** : 1
- **conférence** : 2

— *F. Machado* :

- **Titre** : *Analyse d'images tomographiques de cavités observées sous décompression dans des élastomères exposés à l'hydrogène*
- **Année** : 2020
- **conférence** : 1

En résumé 0.7.1. Activités d'encadrement :

- * *Encadrement de thèses en cours* : 4
- * *Encadrement de thèses soutenues* : 1
- * *Participation active à des thèses soutenues* : 3
- * *Participation active à des thèses en cours* : 1
- * *Encadrement de Stages M2* : 4

0.8 Diffusion et rayonnement

0.8.1 Participation à des jurys de thèses

Participation à des jurys de thèses (3) :

— *M. Fazal* :

- **Université** : ISAE-Ensma
- **Encadrement** : S. Castagnet
- **Année de soutenance** : 2019

— *S. Ben Elahj Salah* :

- **Université** : ISAE-Ensma
- **Encadrement** : A. Nait-ali, C. Nadot, M. Gueguen
- **Année de soutenance** : 2019

— *O. Kane Dialo* :

- **Université** : ISAE-Ensma
- **Encadrement** : S. Castagnet, J-C Grandidier
- **Année de soutenance** : 2015

0.8.2 Expertise d'articles et de communications

- *Mathematics MDPI (2) 2021 2020*
- *AIMS Mathematics (3) 2021² 2019*
- *Metallurgical and Materials Transactions A (4) 2022 2021 2020 2017*
- *Hydrogene energy (2) 2020²*
- *International Journal of Damage Mechanics (1) 2015*
- *Plastics, Rubber and Composites : Macromolecular Engineering (1) 2018*

0.8.3 Autres expertises

J'ai expertisé deux projets financés par l'ANR, une ANR PRC en 2021 et une ANR JCJC en 2019, portant sur la modélisation mécanique.

0.8.4 Chairman de sessions

J'ai été chairman d'une session autour de la modélisation stochastique en 2019 à la conférence WCCM à New-York ainsi qu'à la conférence ESMC2022 Galway Ireland au mini-syposium " Multi-scale Modelling of Polycrystalline Materials".

0.9 Organisation de colloques et workshop

Organisation d'évènements internationaux (1)

Fatigue2018 à Poitiers membre du comité local d'organisation

Organisation évènements nationaux (3)

- *Workshop CSMA-Junior 2017 (Giens)*
- *Workshop CSMA-Junior 3- 14 mars 2018 (Gif-sur-Yvette)*
- *Workshop CSMA-Junior 11- 13 mars 2019 (Porquerolles)*

En résumé 0.9.1. Diffusion et rayonnement :

- * 3 jurys de thèses
- * 12 expertises d'articles internationaux
- * 2 expertises d'ANR
- * Organisation de 3 Workshop nationaux
- * 1 conférence internationale (comité local)

0.10 Activités nationales et internationales

0.10.1 Accueil de chercheurs étrangers

- Échange d'un Postdoc ONO Hiroaki en 2016, dans le cadre de notre collaboration internationale avec le Japon
- Séjour de 2 mois d'ONO Hiroaki en septembre-octobre 2019, dans le cadre de la collaboration internationale avec le Japon et du programme "Make Our Planet Green Again".

0.10.2 Participation à des projets de recherche

- **PASIFHYC** :
 - **Titre** : Polyamide resistance to damage Cumulation from Fatigue loading and high-pressure Hydrogen Cycling.
 - **Financement** : ANR -PRCI
 - **Collaborations** : Arkema (France and Japon); Hydrogenius (University of Kyushu , japan)
 - **Porteuse** : Sylvie Castagnet
 - **Période** : 2021-2025
- **OPERA** :
 - **Titre** : Lien Microstructure/ procédé en fabrication additive
 - **Financement** : Safran Châtellerauld et le CPER-FEDER.
 - **Collaboration** : Safran
 - **Porteur** :Jonathan Cormier.
 - **Période** : 2020-2024
- **PEPR Hyperstock** :
 - **Titre** : Stockage hyperbare de l'hydrogène : référentiel et méthodologies matériaux
 - **Financement** : ANR
 - **Porteur (ENSMA)** : D. Halm.
 - **Période** : 2021-2026

0.11 Formations et stages spécialisés

Depuis 2013, j'ai suivi trois formations afin de compléter ma formation et d'approfondir certaines notions.

- *La première portait sur la modélisation avec le second gradient intitulée "Summer School on Mechanics of Generalized Continua and Their Applications to Engineering Materials and Structures", qui s'est déroulée du 20 au 26 juillet 2015 à Arpino, en Italie.*
- *La deuxième formation, plus récente (en 2020), portait sur la segmentation 3D avec le logiciel ImageJ, afin de perfectionner mes scripts de segmentation largement utilisés au sein de mon équipe.*
- *Enfin, la troisième formation a eu lieu en septembre 2022 pour l'édition 2022 de l'école d'été de mécanique théorique sur le thème des "Champs de Phases en Mécanique".*

Ces trois formations sont en adéquation avec mes activités de recherche et mon projet futur développé dans ce manuscrit.

0.12 Collaborations

Je participe à plusieurs collaborations nationales et internationales avec des membres de l'équipe ENDO. Celles que je mentionne ici sont celles qui ont donné lieu à des communications.

- **Collaboration avec le groupe Polymère d'Hydrogenus à l'université de Kyushu au Japon :**
La collaboration dans laquelle je suis impliqué est dirigée par S. Castagnet de l'Institut Pprime et S. Nishimura d'Hydrogenus. Mon rôle dans ce projet consiste à étudier et analyser statistiquement les champs d'endommagement observés dans des polymères ayant subi une décompression rapide sous hydrogène.
 - Publication :** 3 [53, 10, 16]
 - Conférences :** 2
- **Collaboration avec l'équipe scientifique SLAC National Accelerator Laboratory à Stanford (Yijin Liu) et le CEMES-CNRS à Toulouse (Marc Legros) :**
Dans ce contexte, notre domaine d'analyse porte sur la transformation morphologique des porosités observées dans des nanofils d'argent suite à une exposition à des cycles de températures extrêmes. Cette recherche est menée sous la direction de X. Milhet, qui est maître de conférences à l'institut Pprime.
 - Publication :** 2 [42, 52]

□ **Conférences** : 6

— **Collaboration avec l'équipe de Tressa Pollock à USBC Santa Barbara :**

Dans cette collaboration, nous étudions l'influence de la texture cristallographique et de la microstructure des agrégats 3D issus de leur TriBeam. Mon rôle consiste, entre autres, à l'analyse des données réelles, à la génération de matériaux modèles, ainsi qu'à la simulation et au post-traitement des données 3D issues du code interne FoXTRoT.

□ **Publication** : 1 [21]

□ **Conférences** : 3

En résumé 0.12.1. Projet et collaborations :

- * 3 projets de recherche en cours
- * 3 collaborations nationales et internationales

Troisième partie
Activités de recherche

Introduction

Je travaille actuellement dans un laboratoire de mécanique reconnu pour son expertise en matière d'expérimentation. Cependant, je ne suis pas un fervent défenseur du principe de construire uniquement des modèles pratiques et fonctionnels. Je le comprends, mais je ne le défendrais pas car, selon moi, il faut de temps en temps faire des modèles purement théoriques, sans réelle possibilité de validation via une simulation ou l'expérience. Cela permet d'ouvrir de nouvelles possibilités de modélisation pour notre communauté, mais pas seulement. C'est aussi pour cela que la communication entre les communautés scientifiques est très importante et même indispensable. Venant des mathématiques, je suis passé par la mécanique théorique en thèse et maintenant je travaille en mécanique des matériaux. Je suis conscient que la communication peut être compliquée, mais elle n'est pas insurmontable. En réalité, cela ne relève souvent que d'un problème de sémantique.

Pour revenir sur le besoin ou non de modèles qui servent, je vais déjà me contredire. Dans ce manuscrit, je présente mes travaux qui ont pour objectif de modéliser un phénomène, un mécanisme réel. Pour cela, nous allons chercher à obtenir un modèle qui pourra être validé par la simulation.

Dans cette partie du manuscrit je rédige mon parcours scientifique au sein du laboratoire Pprime où j'ai été recruté en essayant de garder une certaine chronologie. J'ai pris le parti de ne pas présenter l'ensemble de mes activités, mais celles que j'estime principales. En effet, j'ai une activité de recherche qui peut sembler (trop) variée, mais en réalité il y a un fil conducteur qui est assez clair de mon point de vue. Je souhaite profiter de ce manuscrit pour l'expliquer à tous.

La première partie de ce manuscrit sera autour de la modélisation théorique pour converger par la suite vers la recherche d'un matériau non-local et tout cela en passant par des développements numériques.

En effet, mes thèmes de recherche s'intéressent principalement à la définition d'un milieu homogène équivalent permettant de remplacer le matériau à microstructure complexe tout en garantissant la conservation d'un maximum de caractéristiques physiques du milieu original. Autrement dit, on souhaite relier les caractéristiques de microstructure aux échelles fines au comportement macroscopique. En arrivant à l'ENSMA en 2013 dans l'équipe ENDO, j'ai gardé cette thématique débutée en thèse tout en cherchant à l'adapter aux problématiques de l'équipe. Mes travaux de thèse étant très théoriques, il m'a fallu beaucoup de temps et de travail avec mes nouveaux collègues afin de mieux comprendre différents phénomènes physiques qui engendrent de la plasticité, de l'endommagement, des évolutions de microstructure, et cela pour différentes classes de matériaux. Dans nos études, nous souhaitons toujours mieux prendre en compte les relations microstructures/propriétés et leur compréhension.

Mes études s'articulent donc autour de la modélisation théorique, mais plus particulièrement la modélisation non-locale. Elle est obtenue par des méthodes de transitions d'échelles appliquée à différentes classes de matériaux étudiés dans l'équipe (avec gradients de mi-

crostructures, de propriétés). Les méthodes développées nous permettent de modéliser de façon plus réaliste à l'échelle macroscopique le comportement de matériaux à architectures complexes (composites, fabrications Additives, matériaux poreux, avec cavités, etc.), afin de mieux prédire leurs endommagements et mieux comprendre leurs comportements au sens large. Pour la caractérisation de microstructures je m'appuie sur différents outils d'analyse statistique et morphologique que j'ai développés dans l'équipe comme l'étude de covariogramme permettant d'obtenir des grandeurs caractéristiques pour un matériau avec plusieurs phases.

Pour Résumer, J'ai souhaité avoir une activité de recherche bimodales, d'un côté le développement théorique de modèles non-locaux, de l'autre l'analyse, la caractérisation et la simulation de microstructures complexes entraînant un comportement non-local. Cela m'a permis de débiter très rapidement différentes collaborations au sein de l'équipe Endo permettant d'obtenir des données pour différentes classes de matériaux.

En plus du côté humain et scientifique, ces collaborations internes ont également pour objectif d'alimenter ma quête sur la recherche de matériaux à comportement non-local, en effet comme précisé avant, le laboratoire dispose d'un réservoir très riches en données expérimentales et d'expertises scientifiques en science des matériaux. Mon parcours ces dernières années ainsi que mon manuscrit d'HDR sont construits autour de cette quête. Comme déjà évoqué, toutes mes activités de recherche ne sont pas présentées ici, et je me suis plutôt focalisé sur celles qui m'ont permis de faire émerger mon projet de recherche pour les 10-20-30 prochaines années....

Chapitre 1

Modélisation stochastique et non-locale

Dans plusieurs études passées, j'ai souhaité modéliser et capturer les effets non-locaux pour des matériaux à microstructures complexes. Cela a été le cas durant ma thèse où j'ai obtenu des modèles théoriques robustes [41, 40, 47, 48]. Le principal problème de ces modèles était la difficulté à les implémenter dans un code de calcul. Par la suite, après mon recrutement en tant que maître de conférences, j'ai poursuivi dans cette voie en essayant de garder la même rigueur mathématique tout en cherchant à m'approcher des modèles standards de la mécanique du solide, ceci afin d'obtenir des modèles que l'on peut intégrer dans des codes éléments finis (ou FFT). Dans ce chapitre, je présente quelques notions théoriques que j'utilise le plus souvent dans mes études ainsi que deux résultats qui illustrent mon activité. C'est pourquoi cette partie est la plus détaillée de ce mémoire d'HDR.

1.1 Théorie ergodique et Γ -convergence

1.2 Théorie ergodique

La base de la modélisation présentée ici est une modélisation de matériaux contenant des inclusions avec des distributions aléatoires. Pour cela, nous utilisons la théorie ergodique que je présente rapidement ici. L'ergodicité a pour principal avantage de permettre l'utilisation d'une grande partie des outils et/ou hypothèses utilisées en homogénéisation périodique. Nous précisons ci-après les outils qui permettent d'élaborer le cadre mathématique de notre étude. Pour plus de détails sur ces outils, les ouvrages suivants donnent plus de précisions : [4, 28, 2, 12, 13].

Les théorèmes et définitions qui suivent seront énoncés dans le cadre d'un espace probabiliste $(\Omega_p, \mathcal{A}, P)$, mais ces résultats restent valables dans un espace mesuré quelconque (X, \mathcal{A}, μ) [28]. Considérons un milieu homogène renforcé par des inclusions aléatoirement réparties pouvant potentiellement former des clusters, supposées toutes de forme convexe.

Les centres des inclusions sont répartis suivant un processus ponctuel de type Poisson pour rester suffisamment général, auquel on adjoindra les hypothèses suivantes :

- (A_1) Distribution "riche" $= P(\{\omega \in \Omega : |Y(\omega)| > 0\}) = 1$ (ie : le VER Y a une probabilité sûre d'intercepter une inclusion pour tout tirage)
- (A_2) Stationnarité : $\forall z \in \mathbf{Z}^3, \tau_z \# P = P$ (ie : la probabilité est invariante par translation τ_z)
- (A_3) Indépendance asymptotique : $\lim_{|z| \rightarrow \infty} P(\tau_z E \cup F) = P(E)P(F)$ (ie : les probabilités deviennent indépendantes "à longue distance")

Toutes ces hypothèses traduisent le cadre ergodique d'une distribution aléatoire. Dans plusieurs des études que je réalise, je vérifie la présence ou non de ces propriétés afin de pouvoir utiliser plusieurs hypothèses classiques d'homogénéisation telles que la séparation d'échelles, la périodicité, etc...

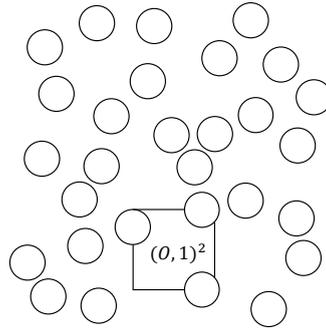


Figure 1.1 – Représentation de la non rareté de la distribution d'inclusions.

Autrement-dit 1.2.1. Dans le cas des études présentées ici, nous utiliserons ces propriétés comme suit :

- i) La taille de la cellule Y est choisie de façon à fixer le générateur du groupe $(\tau_z)_{z \in \mathbf{Z}^3}$ (groupe de translation). La condition (A_2) signifie que les fonctions aléatoires X définies sur Ω_p sont statistiquement homogènes dans le sens où X et $X \circ \tau_z$ ont la même loi de probabilité, i.e.,

$$X \# P = X \circ \tau_z \# P.$$

On peut traduire cela par le fait que lorsque l'on déplace notre VER dans Y , la répartition des sphères est statistiquement la même en fraction volumique et nombre, etc...(voir Figure (1.1)).

- ii) Les conditions (A_1) et (A_2) expriment la non rareté des inclusions. Autrement dit lorsque l'on déplace la fenêtre Y dans le domaine on intercepte (presque sûrement) toujours au moins une partie d'inclusion.

Dans un cadre plus général :

- iii) La propriété d'ergodicité implique que la moyenne temporelle d'une quantité physique peut être remplacée par une moyenne spatiale équivalente. Autrement dit, si on mesure une quantité physique sur une partie de l'espace, on peut en déduire sa moyenne sur l'ensemble de l'espace. Cette propriété est importante car elle permet de simplifier le traitement mathématique de problèmes complexes en remplaçant des moyennes temporelles par des moyennes spatiales, qui sont plus faciles à calculer.
- iv) La propriété de stationnarité est une propriété qui signifie que les propriétés statistiques du système sont invariantes dans le temps. Cela signifie que si on mesure une quantité physique à un instant donné, on peut en déduire sa statistique à n'importe quel autre moment. Cette propriété est importante car elle permet de traiter les phénomènes aléatoires de manière simplifiée, en considérant des propriétés statistiques invariantes dans le temps.
- v) Ces propriétés ergodiques sont souvent vérifiées empiriquement à travers des simulations numériques ou des mesures expérimentales. Elles peuvent être utilisées pour simplifier le traitement mathématique de problèmes complexes en garantissant des propriétés statistiques invariantes dans le temps/espace ou en permettant de remplacer des moyennes temporelles par des moyennes spatiales.

1.3 Γ -convergence

La Γ -convergence est une méthode utilisée lors de la transition d'échelle, qui vise à déterminer la limite de l'énergie totale du problème plutôt que la limite des champs mécaniques (déplacement, contrainte, déformation...). Cette méthode est largement utilisée en mécanique, comme en témoignent de nombreux travaux de la littérature [37, 29, 11, 36, 1]. En utilisant cette méthode, les champs mécaniques du milieu homogénéisé peuvent être alors obtenus en minimisant l'énergie limite. En d'autres termes, l'objectif n'est pas de faire une transition d'échelles pour les champs mécaniques, mais plutôt pour l'énergie totale.

Il existe plusieurs méthodes pour obtenir cette limite d'énergie ([6, 12, 2]). Ici, nous utilisons la méthode séquentielle qui permet en quelque sorte de "contrôler" la vitesse de convergence. Cette méthode est décrite ci-après.

Définition 1.3.1. (Γ -convergence (séquentielle)). Soit X un espace topologique. Considérons une suite $(F_n)_{n \in \mathbb{N}} : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ et une fonction $F : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. On dit que $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ Γ -converge séquentiellement vers F en $u \in X$ si les deux assertions suivantes sont vérifiées :

$$\forall u_n \rightarrow u \text{ dans } X \implies F(u) \leq \liminf_{n \rightarrow +\infty} F_n(u_n) \quad (1.1)$$

$$\exists (v_n)_{n \in \mathbb{N}} \rightarrow u \text{ dans } X \text{ tel que } F(u) \geq \limsup_{n \rightarrow +\infty} F_n(v_n) \quad (1.2)$$

Lorsque les deux propriétés (1.1) et (1.2) sont vérifiées pour tout u , on dit alors que $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ Γ -converge séquentiellement vers F .

On remarque que cette convergence n'est pas comparable à la convergence simple, l'assertion (1.1) étant plus forte que la convergence simple tandis que l'assertion (1.2) est plus faible. Cette méthode séquentielle a l'avantage d'être compatible avec les méthodes asymptotiques "classiques" et la théorie ergodique décrite précédemment.

1.4 Modélisation de matériaux à fort gradient de propriété

Dans l'étude [49], l'objectif est de déterminer un modèle homogénéisé d'un matériau renforcé par des inclusions sphériques distribuées aléatoirement dans l'espace. La méthode utilisée pour le passage à la limite est la Γ -convergence [12] dans le cas stochastique. Outre le cadre stochastique, la très petite taille des inclusions par rapport à la taille caractéristique des matériaux rend la procédure d'homogénéisation non conventionnelle. Nous cherchons à déterminer un modèle homogénéisé d'un matériau renforcé par des inclusions sphériques réparties aléatoirement dans l'espace. La distribution aléatoire est prise en compte lors du passage d'échelle de manière à conserver l'information statistique, malgré le passage à la limite.

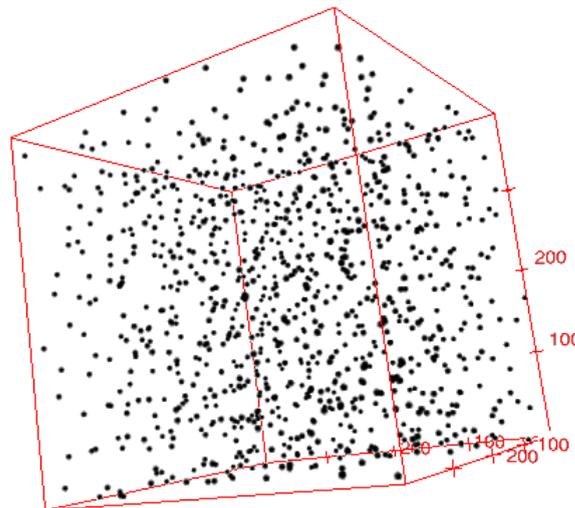


Figure 1.2 – Exemple de répartition de particule de carbone.

Les matériaux modèles pris en exemple sont des polymères renforcés avec de très faibles inclusions de carbone, obtenus par un mode de fabrication générant des distributions aléatoires, ainsi qu'un fort contraste de propriété. Ce matériau semble être un cadre d'application approprié pour cette étude. En effet, les polymères microstructurés ont une longueur caractéristique (notée ε), et pour améliorer leur résistance, il est possible d'introduire de très petites charges de carbone de rayon $r \ll \varepsilon$ correspondant à l'échelle de

la microstructure. Ces charges sont donc réparties de manière aléatoire dans le matériau. Nous faisons l'hypothèse (réaliste) d'une distribution ergodique (voir [13, 40]). Dans le cas de fortes densités d'inclusions, l'hypothèse d'ergodicité semble appropriée.

L'énergie limite obtenue [49] est de la forme suivante :

$$G(u, v) := \begin{cases} \int_O f(\nabla u) \, dx + \gamma \int_O |u - v|^p \, dx + a \int_O f^{\infty, p} \left(\frac{\partial v}{\partial \Psi} \right) \, dx & \text{si } (u, v) \in \text{Dom} \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Cette étude s'inscrit dans le cadre de l'élasticité linéaire. Le champ de déplacement de la structure globale est noté u , tandis que le champ "virtuel" ou "mémoire" du déplacement des inclusions est représenté par la variable v . Cette dernière est fortement liée à l'échelle des inclusions, ce qui confère un caractère non local à l'énergie en jeu. Le domaine Dom est un espace de Sobolev particulier, décrit en détail dans l'article de référence [49]. Les différentes constantes ainsi que les densités d'énergie limites f et $f^{\infty, p}$ sont également spécifiées dans cet article. La deuxième intégrale correspond également à un terme non local et a une forme similaire à d'autres énergies non locales de la littérature (voir, entre autres, [1, 48]). La constante γ correspond à une longueur caractéristique liée à la distribution, à la morphologie et à la taille des inclusions. De plus, nous obtenons un modèle déterministe homogène d'un matériau renforcé aléatoirement avec des inclusions sphériques très petites par rapport à la taille d'un VER.

Ce résultat est un bon début pour comprendre les mécanismes d'endommagement de ce type de matériau. En effet, le deuxième terme obtenu à la limite correspond à une énergie emmagasinée, et celle-ci peut être à l'origine de l'endommagement de ce type de composite. Mais comme pour mes précédents travaux, ce type d'énergie avec les hypothèses associées est difficilement intégrable dans un code de calcul classique. Il faut donc procéder à une autre stratégie de modélisation pour obtenir des modèles plus simples du point de vue du développement numérique, mais toujours aussi riches et reliés à la microstructure.

1.5 Vers une modélisation non-locale en deux temps

Mes premières études m'ont permis de proposer un sujet de thèse que j'ai eu la chance de co-encadrer avec Carole Nadot-Martin grâce à un financement ministériel. Cette étude est centrale pour mes projets futurs, c'est pourquoi je vais entrer dans les détails dans cette partie.

L'objectif de la thèse réalisée par S. Ben Elhaj-Salah était de proposer un modèle macroscopique, déterministe et non-local, construit par transition d'échelles pour des matériaux hétérogènes composés d'inclusions distribuées dans une matrice élastique suivant un processus stochastique ergodique. En effet, cette étude a été menée en supposant un comportement élastique linéaire des composants, avec de petits déplacements et une parfaite adhérence (sans fissure à l'intérieur des composants ni décohésion entre eux). En revanche, une répartition aléatoire des constituants est envisagée tout en supposant que les hétérogénéités sont nombreuses et de petite taille, permettant ainsi de conserver

l'hypothèse de séparation d'échelle. L'objectif était alors de construire des modèles de comportement effectif (basés sur le concept d'homogénéisation) en utilisant des techniques de développement asymptotique avec des termes d'ordre supérieur (impliquant des gradients de déformation). Cela conduit finalement à des modèles effectifs de type "matériaux généralisés" dans un cadre stochastique. Contrairement à la modélisation précédente, nous avons procédé pour cela en deux temps :

1) Utilisation de la méthode des développements asymptotiques étendue dans un cadre aléatoire : *Dans cette première partie, trois tenseurs d'élasticité homogénéisés dépendent d'un paramètre stochastique et des propriétés des phases. Cette méthode fait également appel à deux longueurs caractéristiques fortement reliées à la microstructure, l_0 et l_1 , ainsi qu'à un second gradient de déformation. Tout cela confère un cadre non-local à ce premier modèle, qui reste à l'échelle de la microstructure.*

2) Passage à la limite par Γ -convergence pour la transition d'échelle : *Cette deuxième étape permet d'obtenir un modèle homogénéisé régularisé faisant intervenir le champ virtuel v lié à la microstructure.*

1.5.1 Développement asymptotique

Dans le cadre d'élasticité, le problème local est décrit par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma^\eta(x, \omega) + f(x, \omega)) = 0 \\ \sigma^\eta(x, \omega) = \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : \varepsilon^\eta(x, \omega) & x \in \Omega \\ \varepsilon^\eta(x, \omega) = \operatorname{sym}(\nabla u^\eta(x, \omega)) \end{cases} \quad (1.3)$$

L'équation d'équilibre est communément représentée par l'équation (1.3)₁. Dans cette équation, u représente le champ de déplacement, tandis que σ et ε représentent respectivement les champs de contrainte et de déformation sur le domaine Ω . La loi de comportement qui dépend des deux échelles est définie par (1.3)₂, et la relation de compatibilité est définie par (1.3)₃. La variable de microstructure, notée η (par exemple le diamètre des inclusions), tend vers 0 pour la transition d'échelle. Tous les champs et variables dépendent de la variable aléatoire ω . Les conditions aux limites périodiques en déplacement sont considérées classiquement sur les bords de Ω . Le chargement volumique $f(x, \omega)$ est négligeable. Le tenseur d'ordre 4 des constantes d'élasticité du milieu hétérogène est défini par $\mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right)$ et est supposé constant par phase. Les interfaces entre les inclusions et la matrice sont considérées comme parfaitement collées dans la modélisation, ce qui se traduit par la continuité aux interfaces du champ de déplacement $u^\eta(x, \omega)$ et du vecteur contrainte, $t^\eta(x, \omega) = \sigma^\eta(x, \omega) \cdot n$, avec n le vecteur normal sortant.

Dans le système précédent, les symboles div et ∇ désignent respectivement les opérations différentielles "divergence" et "gradient". Ces opérations peuvent être décomposées en deux parties :

$$\nabla(\cdot) = \nabla_x(\cdot) + \frac{1}{\eta} \nabla_y(\cdot)$$

et

$$\operatorname{div}(\cdot) = \operatorname{div}_x(\cdot) + \frac{1}{\eta} \operatorname{div}_y(\cdot)$$

où les indices x et y correspondent aux dérivées par rapport aux variables x et y . Le problème peut donc être réécrit en conservant les conditions aux limites périodiques.

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}_x(\sigma^\eta(x, \omega)) + \frac{1}{\eta} \operatorname{div}_y(\sigma^\eta(x, \omega)) + f(x, \omega) = 0 \\ \sigma^\eta(x, \omega) = \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : \varepsilon^\eta(x, \omega) \\ \varepsilon^\eta(x, \omega) = \operatorname{sym}\left(\nabla_x u^\eta(x, \omega)\right) + \frac{1}{\eta} \left(\nabla_y u^\eta(x, \omega)\right) \end{array} \right. \quad x \in \Omega \quad (1.4)$$

Toutes les équations sont dépendantes du paramètre ω qui caractérise la distribution aléatoire des inclusions considérées de taille η centrées autour de

$$\omega = (\omega_i)_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^3.$$

Ces centres sont aléatoirement distribués selon un processus stochastique appartenant à l'espace probabilisé $(\Omega_p, \mathcal{A}, P)$.

1.5.1.1 Développement asymptotique des champs mécaniques

En utilisant le principe de la méthode d'homogénéisation par développement asymptotique, on peut estimer le champ de déplacement à l'échelle macroscopique Ω et microscopique Y en développant ce champ en série de puissance de η . La variable $y \in Y$ est reliée à l'échelle macro via la relation $y = \frac{x}{\eta}$.

Ce développement est effectué pour les différents champs mécaniques et est suivi d'une résolution en cascade des problèmes d'équilibre à chaque ordre, de manière à faire apparaître un second gradient en déformation. Cette décomposition est réalisée dans un cadre stochastique, ce qui permet d'écrire le champ de déplacement de la manière suivante :

$$\begin{aligned} u^\eta(x, \omega) &= u^0\left(x, \frac{x}{\eta}, \omega\right) + \eta^1 u^1\left(x, \frac{x}{\eta}, \omega\right) + \eta^2 u^2\left(x, \frac{x}{\eta}, \omega\right) + \eta^3 u^3\left(x, \frac{x}{\eta}, \omega\right) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{n=+\infty} \eta^n u^n\left(x, \frac{x}{\eta}, \omega\right) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Où chaque terme $u^n(x, \frac{x}{\eta}, \omega)$ dépend de la variable globale x , de la variable locale $y = \frac{x}{\eta}$ et de la variable de distribution aléatoire ω des centres des inclusions. Le premier terme u^0 représentera la partie homogénéisée de la solution et ne dépendra que de la variable lente comme démontré ci-après. Les termes suivants $u^n, n = 1, 2, 3, \dots$, fournissent des corrections d'ordres supérieurs et décrivent les variations locales du déplacement à l'échelle

des hétérogénéités.

En utilisant le développement asymptotique (1.5) du déplacement dans (1.4)₃, la déformation devient alors :

$$\begin{aligned}\varepsilon^\eta(x, \omega) &= \frac{1}{\eta} \varepsilon_y(u^0) + \varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1) + \eta[\varepsilon_x(u^1) + \varepsilon_y(u^2)] + \eta^2[\varepsilon_x(u^2) + \varepsilon_y(u^3)] + \dots \\ &= \frac{1}{\eta} \varepsilon_y(u^0) + \sum_{n=0}^{n=+\infty} \eta^n \varepsilon^n(u^n, u^{n+1})\end{aligned}\quad (1.6)$$

On peut faire de même avec le champs de contrainte. Il nous faut maintenant écrire nos énergies au différent ordre pour faire apparaître les propriétés homogénéisés.

1.5.1.2 Développement asymptotique sur la partie énergétique

La loi de comportement en tout point du milieu continu est caractérisée par un potentiel élastique strictement convexe et coercive. Dans [62] est présenté une formulation du modèle macroscopique incluant les gradients de la déformation. Elle est fondée sur une généralisation du lemme de Hill-Mandel qui permet d'inclure les termes de la série à tous les ordres. En introduisant ici le paramètre de la distribution stochastique ω , l'énergie élastique macroscopique est donnée par l'équation ci-dessous :

$$W^{(\eta)}(u^\eta) = W(u^0, u^1, u^2) = \int_{\Omega \times Y} \frac{1}{2} \left(\varepsilon^\eta(x, \omega) : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : \varepsilon^\eta(x, \omega) \right) dx dy \quad (1.7)$$

avec $x \in \Omega \subset \mathbb{R}$ et $y \in Y$. Il est à noter que nous sommes dans un cadre multi-échelle, car l'expression de cette énergie comporte des variables x et $y := \frac{x}{\eta}$. En substituant (1.6) dans la fonction de l'énergie (1.7) et en regroupant les termes de même puissance en η , on obtient :

$$W^{(\eta)}(u^\eta) = W(u^0, u^1, u^2, \dots) = \frac{1}{\eta^2} W^{(-2)} + \frac{1}{\eta} W^{(-1)} + W^{(0)} + \eta W^{(1)} + \eta^2 W^{(2)} + \dots \quad (1.8)$$

Les champs de déplacement u^0 et u^1 sont les solutions du problème de minimisation de la fonction quadratique $W^{(0)}$ donnée par :

$$W^{(0)}(u^0, u^1) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : [\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)] dx dy \quad (1.9)$$

Après calcul on trouve l'énergie suivante :

$$\boxed{W^{(0)}(u^0, u^1) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times Y} \varepsilon_x(u^0) : [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \varepsilon_x(u^0) dx dy} \quad (1.10)$$

Avec $\varepsilon_x(u^0) = E^0(x)$, la déformation macroscopique, on obtient :

$$W^{(0)}(u^0, u^1) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx \quad (1.11)$$

où $\mathbb{A}^{(0,0)}$, un tenseur élastique effectif qui est donné par l'expression suivante :

$$\mathbb{A}^{(0,0)} = \int_Y [\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : [\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] dy \quad (1.12)$$

Et où $\chi^0(y, \omega)$ est le tenseur de la fonction caractéristique dépendant de la distribution d'inclusions, $\mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right)$ le tenseur d'élasticité d'ordre 4 du matériau hétérogène, et \mathbb{I} représente le tenseur d'identité d'ordre 4.

L'expression précédente de l'énergie est une forme classique, on pourrait s'arrêter à cette étape et obtenir notre tenseur effectif pour la transition d'échelle, mais l'objectif ici est d'obtenir un second gradient. On poursuit donc le développement à l'ordre supérieur.

Les champs de déplacement u^0 , u^1 et u^2 sont les solutions du problème de minimisation de la fonction quadratique donnée par :

$$\eta W^{(1)}(u^0, u^1, u^2) = \eta \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) + \varepsilon_y(u^1)] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : [\varepsilon_x(u^1) + \varepsilon_y(u^2)] dx dy \quad (1.13)$$

Après développement, l'énergie $W^{(1)}$ se réécrit comme suit :

$$\begin{aligned} \eta W^{(1)}(u^0, u^1, u^2) &= \eta \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) : (\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : [(\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)) : \nabla_x U^1(x)] dx dy \\ &+ \eta \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) : (\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : \chi^0(y, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(u^0) dx dy \\ &+ \eta \int_{\Omega \times Y} [\varepsilon_x(u^0) : (\mathbb{I} + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}\left(\frac{x}{\eta}, \omega\right) : \nabla_y \chi^1(y, \omega) : \nabla_x \varepsilon_x(u^0) dx dy \end{aligned} \quad (1.14)$$

Avec $\varepsilon_x(u^0) = E^0(x)$ et $\varepsilon_x(U^1) = E^1(x)$ qui représentent respectivement les déformations macroscopiques à l'ordre 0 et 1, l'équation (1.14) devient :

$$\begin{aligned} \eta W^{(1)}(u^0, u^1, u^2) &= \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx \\ &+ \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx \end{aligned} \quad (1.15)$$

avec :

$$\begin{cases} \mathbb{B}^{(0,1)} = \int_Y [(\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : [(\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega))] dy \\ \mathbb{C}^{(0,0)} = \int_Y [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : \chi^0(y, \omega) dy \\ \mathbb{D}^{(0,0)} = \int_Y [\mathbb{1} + \nabla_y \chi^0(y, \omega)] : \mathbb{C}(\frac{x}{\eta}, \omega) : \nabla_y \chi^1(y, \omega) dy \end{cases} \quad (1.16)$$

Selon l'équation (1.8) en s'arrêtant à l'ordre 1, suffisant pour faire apparaître le second gradient de déplacement, et avec $\frac{1}{\eta^2} W^{(-2)} = \frac{1}{\eta} W^{(-1)} = 0$, l'énergie totale homogénéisée est finalement obtenue sous la forme :

$$\begin{aligned} W^{(\eta)}(u^0, u^1, u^2) &= W^{(0)} + \eta W^{(1)} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{A}^{(0,0)} : E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{B}^{(0,1)} : E^1(x) dx \\ &\quad + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{C}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx + \eta \int_{\Omega} E^0(x) : \mathbb{D}^{(0,0)} : \nabla_x E^0(x) dx \end{aligned} \quad (1.17)$$

Cette énergie implique quatre tenseurs d'élasticité homogénéisés donnés par (1.12) et (1.16) richement connectés à la microstructure, et ayant par ailleurs un caractère non-local qui s'ajoute à la non-localité via la présence du second gradient de déplacement dans l'expression (1.17).

Il nous faut maintenant vérifier la pertinence du modèle obtenu avant de passer à une transition d'échelle.

Deux types de microstructures tridimensionnelles ont été étudiés numériquement. La première est une microstructure virtuelle générée à partir d'un motif simple à gradient de microstructure (une inclusion entourée de six petites) distribué aléatoirement (voir figure 1.3). La seconde est une microstructure réelle d'Éthylène-Propylène-Diène Monomère obtenue par tomographie lors d'une étude annexe sur la distribution de cavité dans un polymère soumis à une décompression rapide de gaz. Ces microstructures contiennent des clusters d'inclusions, ce qui nous permet d'avoir les deux longueurs caractéristiques présentes dans le modèle. Nous avons utilisé ces données seulement pour avoir une microstructure modèle pour l'étude (voir figure 1.4). Cette partie de l'étude se nourrit principalement des travaux en collaboration avec S. Castagnet et le laboratoire Hydrogenus à Kyushu (Japon), travaux détaillés ultérieurement dans ce mémoire.

La distribution avec la présence de clusters de cavités obtenue par micro-tomographie est utilisée ici comme un matériau, microstructure modèle. Afin de tester le modèle, des simulations numériques ont été réalisées et comparées aux bornes classiques. Pour une première approche, le calcul ne prend pas encore en compte $\mathbb{D}^{(0,0)}$. Les différentes constantes d'élasticité sont calculées à champ complet. Ces calculs sont effectués sur deux VER (VER_0 et VER_1) obtenus à partir des distances caractéristiques l_0 et l_1 , qui peuvent être caractérisées à l'aide d'un covariogramme [51, 24, 33, 60]. l_0 correspond à l'échelle de l'inclusion, tandis que l_1 correspond à l'échelle du cluster d'inclusions. Pour effectuer ce calcul, un script Python a été développé dans le logiciel Paraview en utilisant l'algorithme suivant : Les valeurs simulées de l'énergie pour les deux microstructures se situent entre les bornes de Voigt et de Reuss, mais ne les valident pas. En effet, cette comparaison nous informe

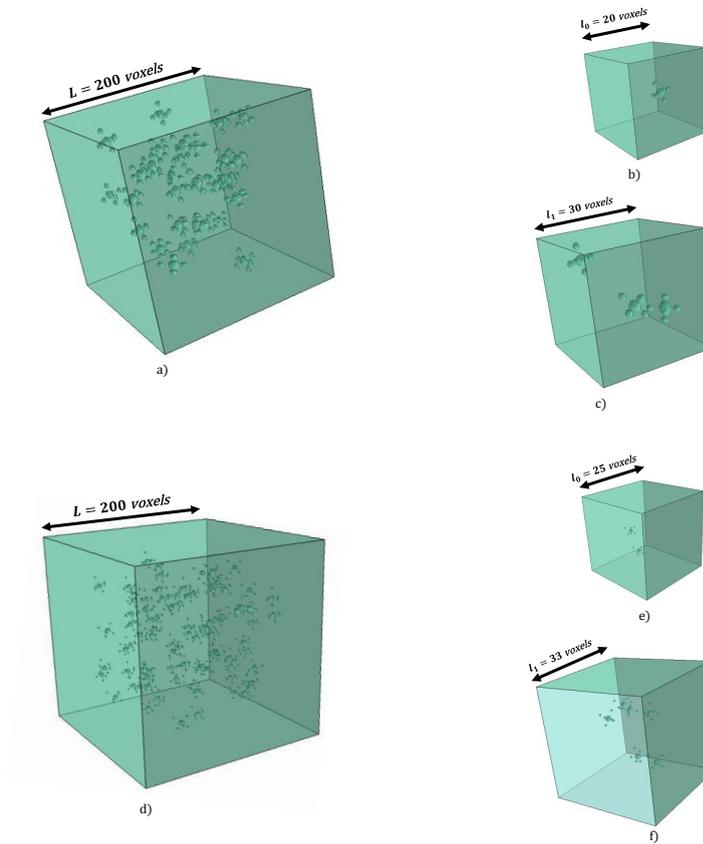


Figure 1.3 – Deux exemples (a et d) de microstructures virtuelles générées par un processus stochastique avec deux longueurs caractéristiques l_0 et l_1 (b et c pour la microstructure a ; e et f pour la d).

Algorithm : Calcul $W^{(\eta)}(u) \leftarrow W^{(0)} + \eta W^{(1)}$

1: Génération des images 3D ;

2: Caractérisation morphologique :

Détermination de l_0 et l_1 ;

Construction de VER_0 et VER_1 à partir de l_0 et l_1 respectivement ;

3: Maillage ;

4: Calcul :

$E^0(x)$, et $E^1(x)$ par moyenne volumique des champs obtenus par simulation en champs complets sur VER_0 et VER_1 , respectivement ;

$\nabla_x E^0(x) \leftarrow$ en utilisant une moyenne pondérée sur VER_0 ;

$\langle (\nabla_y \chi^0(y, \omega))_{ijkl} \rangle_Y \leftarrow \mathbb{1}$;

$(\chi^0(y, \omega))_{ijk} \leftarrow$ avec $\chi^0(y, \omega)_{ijk} = \int (\nabla_y \chi^0(y, \omega))_{ijkl} = \sum_{l=1}^3 (\nabla_y \chi^0(y, \omega))_{ijkl}$;

$W^{(0)} \left(\mathbb{A}^{(0,0)} \right) \leftarrow Eq. (1.11)$;

$\eta W^{(1)} \left(\mathbb{B}^{(0,1)}, \mathbb{C}^{(0,0)} \right) \leftarrow Eq. (1.15)$;

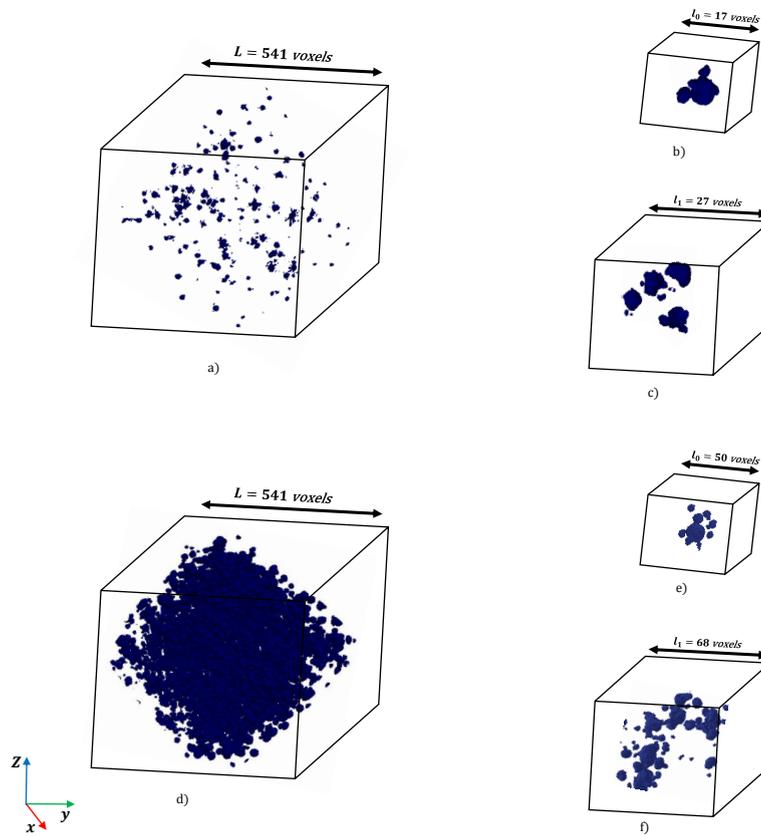


Figure 1.4 – Deux exemples (a et d) de microstructures réelles d'EPDM contenant des cavités obtenues par tomographie avec deux longueurs caractéristiques l_0 et l_1 (b et c pour la microstructure a ; e et f pour la d).

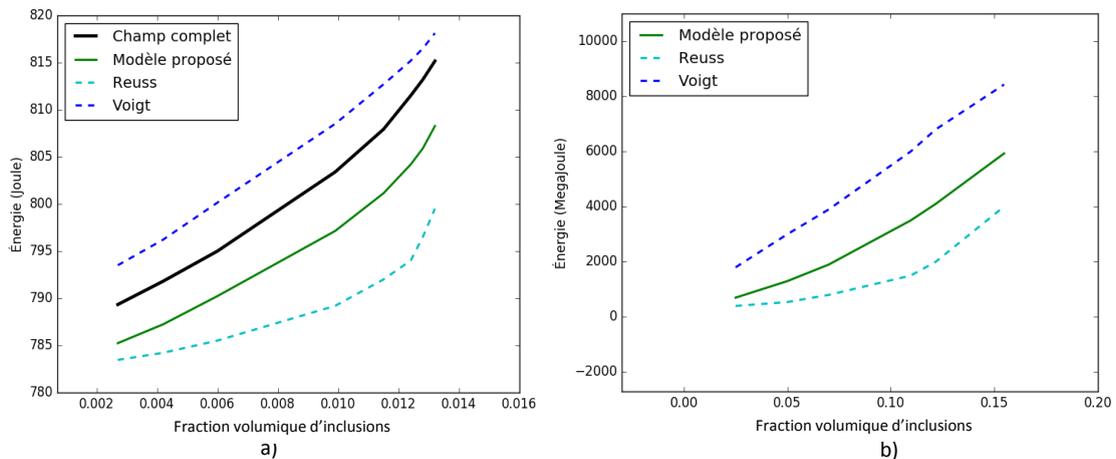


Figure 1.5 – Fuseau de Hill énergétique a) : Matériau virtuel, b) : Matériau synthétique.

seulement que le modèle n'est pas "à jeter", du moins pour le moment. Les valeurs obtenues par champs complets sur la microstructure complète sont également présentées pour le matériau virtuel dans la figure (1.5 a)). Pour les deux microstructures, les valeurs de l'énergie se rapprochent de la borne inférieure avec la diminution de la fraction volumique d'inclusions. Cela peut s'expliquer par le fait que ces résultats ont été obtenus pour une correction au premier ordre η^1 , ce qui conduit à une sous-estimation.

Cependant, il est pertinent de se demander s'il est judicieux de comparer ce modèle à une simulation en champ complet qui ne prend pas en compte les effets non-locaux. Malgré tout, le modèle permet de réduire le temps de calcul, car les calculs en champs complets sont effectués sur des volumes de taille réduite pour la détermination des déformations macroscopiques. Pour plus de détails sur les développements, il convient de consulter la publication [14].

L'énergie obtenue dépend toujours du paramètre d'échelle η et nécessite des simulations sur les deux VER. Il est également nécessaire d'effectuer plusieurs tirages pour être représentatif, car cette dépendance varie en fonction de la variable aléatoire. Il est donc nécessaire d'effectuer un passage à la limite approprié afin d'obtenir un modèle homogénéisé et déterministe.

1.5.2 Passage à la Γ -limite

Une seconde transition d'échelle est réalisée à l'aide d'outils d'homogénéisation variationnelle stochastique dans le cas ergodique. Cela afin d'obtenir un modèle homogène, exploitable en calculs de structures. Le passage à la limite sur le paramètre d'hétérogénéité émanant du développement asymptotique précédent est ainsi effectué par la méthode de Γ -convergence avec pour objectif de conserver un maximum d'informations de microstructures. In fine, le modèle obtenu est macroscopique, non-local, déterministe et richement connecté à la microstructure.

Comme le précise la Définition 1.3.1 on a besoin de l'existence de la convergence des champs de déplacement, pour cela on utilise un résultat de compacité

Le résultat obtenu, illustré sur la Figure 1.6, montre l'apparition du champ virtuel v comme la limite de la restriction du champ u aux fibres. La non-localité s'exprime alors non seulement par le second gradient de déplacement, mais aussi par la présence du champ de déplacement virtuel (mémoire) des inclusions (équation 1.18). Le lien fort avec la microstructure est toujours exprimé par la présence du paramètre stochastique θ , qui dépend des propriétés des phases. L'énergie obtenue par Γ -limite et celle ci-dessous :

$$\begin{aligned}
W_{hom}(u, v) = & \frac{1}{2}E \left(\int_{\Omega} \epsilon_x(u - v) : \tilde{\mathbb{C}}_0^m(x, \omega) : \epsilon_x(u - v) dx \right) + \frac{1}{2}\theta_1^2.E \left(\int_{\Omega} \epsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_0^i(x, \omega) : \epsilon_x(v) dx \right) \\
& + E \left(\int_{\Omega} \epsilon_x(u - v) : \tilde{\mathbb{C}}_1^m(x, \omega) : \nabla_x \epsilon_x(u - v) dx \right) + \theta_1^2.E \left(\int_{\Omega} \epsilon_x(v) : \tilde{\mathbb{C}}_1^i(x, \omega) : \nabla_x \epsilon_x(v) dx \right)
\end{aligned}
\tag{1.18}$$

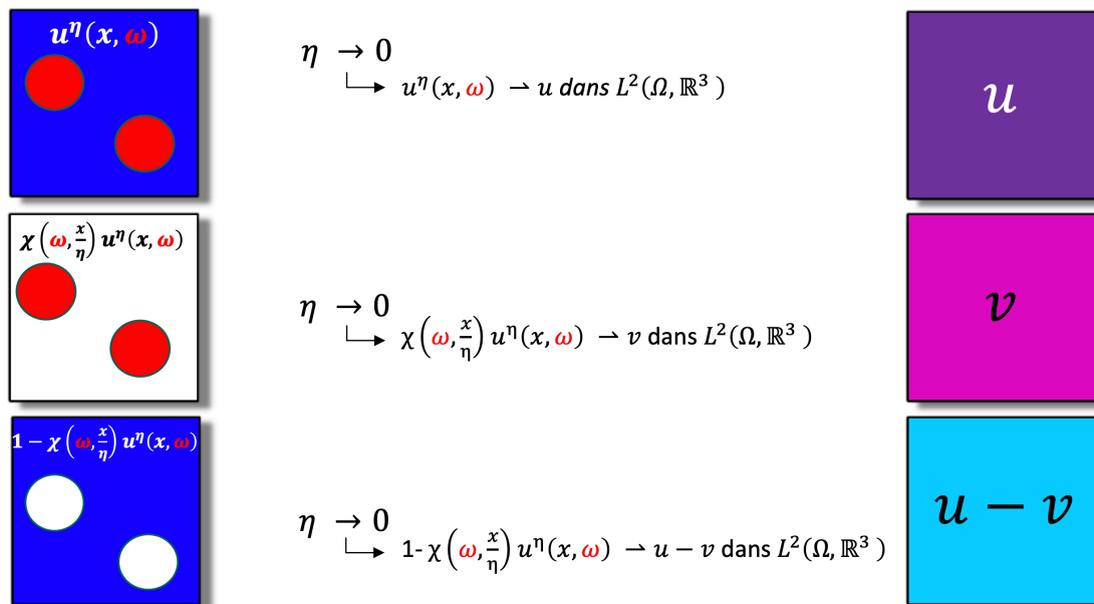


Figure 1.6 – Convergence de champs de déplacement

Dans cette expression, u représente le champ de déplacement, v est le champ virtuel qui mémorise les inclusions à l'échelle macroscopique, θ^2 est un scalaire qui dépend de la distribution et de la morphologie des inclusions, et $(\tilde{\mathbb{C}}_0^m, \tilde{\mathbb{C}}_1^m, \tilde{\mathbb{C}}_0^i, \tilde{\mathbb{C}}_1^i)$ sont les tenseurs de rigidité de la matrice et des inclusions respectivement, pondérés par les fractions volumiques dans les deux VER de taille l_0 et l_1 . Ce résultat est plus détaillée dans le manuscrit de thèse disponible en ligne.

1.5.2.1 Validation numérique

Pouvoir utiliser le modèle obtenu dans un code de calcul a été un défi important. Nous avons donc conçu un élément fini non-local enrichi avec des interpolations de type Hermite, qui est désormais intégré dans le solveur éléments finis FoXtroT de l'Institut Pprime ([lien](#)). En tant que co-développeur de FoXtroT avec M. Guéguen, Ingénieur de Recherche CNRS, nous avons pu prendre en compte le champ de déplacement virtuel des inclusions ainsi que les gradients des champs de déplacement macroscopiques et virtuels. Nous sommes ravis des premiers résultats de cette approche innovante, qui seront bientôt présentés dans deux publications en cours de rédaction.

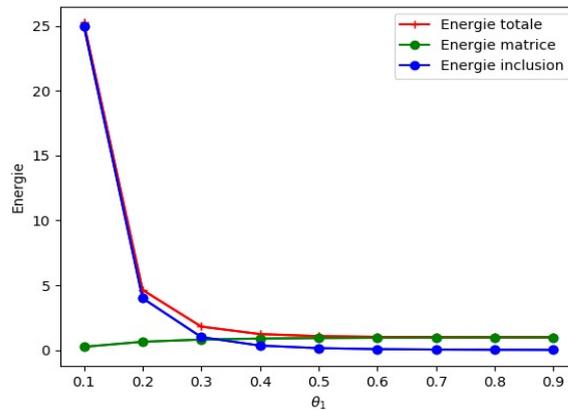


Figure 1.7 – Valeurs des énergies (à l'échelle macroscopique) dans la matrice, les fibres ainsi que l'énergie totale en fonction du taux d'inclusion

1.6 Conclusion

*Nous avons pu obtenir plusieurs modèles plus ou moins sophistiqués grâce à la modélisation non-local utilisant la Γ -convergence et divers résultats issus de la théorie ergodique. La difficulté d'utilisation de modèles lourds a été contournée et présentée dans la thèse de S. Ben Elhaj-Salah, notamment grâce à l'utilisation de l'élément d'Hermite. Ce qui est le plus intéressant dans cette approche, à mon avis, est l'apparition du champ virtuel v , qui conserve les informations à l'échelle locale de la microstructure. En effet je considère que cette approche est la clé pour développer des modèles d'endommagement pertinents à l'échelle macroscopique car elle permet de prendre en compte les particularités de la microstructure dans la modélisation. **Cette partie a abouti à la publication de 6 articles dans des revues de rang A, la présentation de 16 communications scientifiques ainsi qu'au développement d'un élément fini enrichi.** Je poursuis mes travaux sur ce champ virtuel dans le but de l'intégrer dans des modèles d'endommagement, un aspect que je développerai dans mon projet.*

Toute cette partie très théorique est interconnectée avec la partie suivante de mes activités de recherche, qui consiste à chercher des matériaux présentant un comportement non-local. Cette recherche a entraîné de nombreux développements statistiques et numériques, qui sont aujourd'hui utilisés dans notre équipe, tels que l'analyse statistique par covariance ou le solveur FFT. Les activités des deux parties sont étroitement liées et forment la trame de ma demande d'Habilitation à Diriger des Recherches.

Chapitre 2

Recherche d'un matériau non-local

Dans ma quête de recherche pour trouver un matériau ayant un comportement non-local, j'ai établi plusieurs collaborations avec des collègues de mon équipe. Ces collaborations m'ont permis de travailler sur plusieurs classes de matériaux, notamment les composites, les polymères et les alliages métalliques. L'objectif de ces études était de relier la micro-structure complexe à leur comportement macroscopique.

*Concernant les matériaux métalliques, j'ai collaboré avec X. Milhet sur l'analyse statistique de nanopores dans l'argent fritté. Nous avons étudié l'effet de la température sur la morphologie et la distribution des pores au cours du temps. **Ces travaux ont abouti à deux thèses soutenues, deux articles et sept communications scientifiques.** J'ai également collaboré avec J. Cormier et P. Villechaise sur la fabrication additive des superalliages, où nous tentons de comprendre le rôle des pores et des microstructures particulières sur la tenue en fatigue et fluage. **Cette collaboration a abouti à deux thèses en cours, une co-encadrement et une participation, ainsi que six communications scientifiques.** Enfin, j'ai travaillé sur les alliages de titane avec P. Villechaise et S. Hemery, où nous avons étudié l'effet des micro-textures (macrozones) sur le comportement de ces alliages. **Cette recherche a donné lieu à six articles et douze communications scientifiques.** Les macro-zones de ces alliages de titane font de cette classe d'alliages un bon candidat pour entrer dans la famille des matériaux non-locaux, car ces zones de grain de même orientation exercent une forte influence sur la réponse macroscopique du matériau.*

*Ma première collaboration au laboratoire concerne les polymères (à jamais les premiers comme on dit à Marseille), j'ai établi une collaboration avec S. Castagnet pour étudier l'endommagement des polymères soumis à une décompression rapide de gaz. Cette étude a révélé la formation de cavités réparties en clusters, ce qui a conduit à **deux thèses soutenues, une thèse en cours, sept articles et cinq communications scientifiques.** Cette répartition de cavités semble faire de ce matériau un bon candidat pour un modèle non-local.*

Je présente ici seulement ces deux dernières études.

2.1 Caractérisation de microstructure à gradient pouvant entraîner un comportement non-local pour différents matériaux.

Une part importante de mon activité de recherche consiste à caractériser la microstructure et à générer des microstructures statistiquement équivalentes. Pour cela, j'utilise divers outils d'analyse statistique et de traitement d'images. En 2013, l'équipe s'est dotée d'un micro-tomographe, qui a conduit à un tournant mon activité de recherche. J'ai développé plusieurs outils de traitement et d'analyse d'images, qui sont utilisés dans l'équipe. De plus, je forme les doctorants et les stagiaires à la segmentation d'images, ce qui a eu une influence positive sur mon intégration dans l'équipe. Le tomographe est donc un élément clé de mon projet de recherche.

Ici, je présente un outil d'analyse que j'utilise pour caractériser une microstructure et qui permet également de vérifier l'hypothèse d'ergodicité.

2.1.1 Utilisation du covariogramme

En mécanique des matériaux, des travaux tels que [25], [24] et [27] ont utilisé le covariogramme pour estimer les caractéristiques morphologiques à partir d'images représentatives de la microstructure d'un milieu donné. Si l'on considère le cadre de la non-localité, cet outil permet également de mettre en évidence la présence de différentes échelles et de différentes longueurs caractéristiques.

Ce passage décrit le processus de construction d'un covariogramme en géostatistique. Pour cela, il est essentiel de définir la région d'observation ou de référence. La covariance est une mesure de la corrélation spatiale entre les points d'un champ aléatoire, qui est définie comme la probabilité que deux points à une distance donnée dans la région d'observation appartiennent à la même phase du matériau hétérogène. En d'autres termes, elle mesure la probabilité de trouver d'autres inclusions à une distance donnée à partir d'une inclusion de référence. Des équations peuvent être utilisées pour calculer la covariance, et cette mesure est souvent représentée sous la forme d'un covariogramme. Les références [24], [33], et [60] sont des sources utiles pour en apprendre davantage sur le sujet.

Pour construire un covariogramme, il est d'abord important de définir la surface d'observation ou région de référence. La covariance $C(x, x+h)$ où x appartient au domaine d'étude Ω , est définie comme la probabilité, P , pour qu'un segment de longueur h , appartienne à la même phase du matériau hétérogène (voir équation (2.1)). Autrement dit, elle décrit la probabilité d'intercepter, à partir d'une inclusion de référence, d'autres inclusions à une distance donnée.

$$C(x, x+h) = P\{x \in B, x+h \in B\} \quad (2.1)$$

où B représente l'ensemble aléatoire choisi. En analyse d'images, si I est définie comme la fonction caractérisant les pixels j tels que $I(j) = 1$ si j est dans une cavité et 0 si

j appartient à la matrice, la fonction covariance $C(h)$ peut être traduite par l'équation suivante :

$$C_z(h) = \int_{\Omega} I(j) \cdot I(j + (z, h)) dj$$

où $h \in \mathbb{R}$ et z représente le vecteur unitaire dans la direction d'intérêt. On peut également prendre l'intensité en niveau de gris pour la fonction I . La mesure de la covariance permet d'étudier l'anisotropie géométrique. La Figure 2.1 montre quelques propriétés particulières du covariogramme et la manière dont elles sont estimées sur la courbe. L'analyse est faite à partir d'une matrice avec une répartition aléatoire d'inclusions. Les propriétés sont également expliquées ci-après.

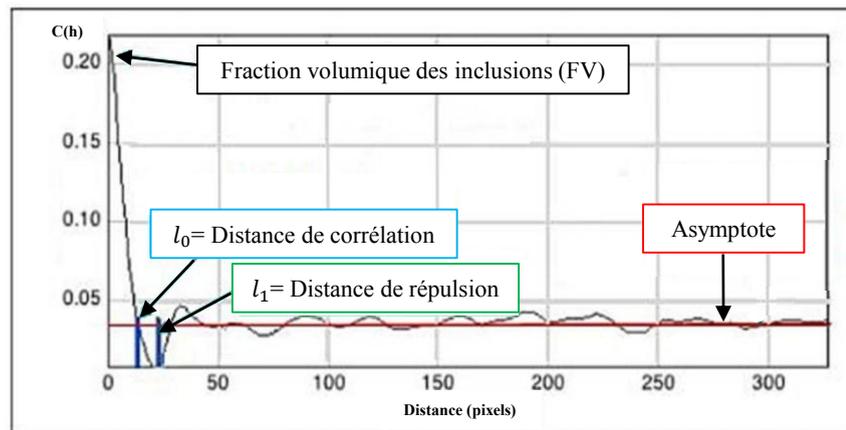


Figure 2.1 – Exemple de covariogramme et principales propriétés.

- **PROPRIÉTÉ 1 :** La fraction volumique de l'ensemble des inclusions f_B est directement donnée par le covariogramme pour une distance h nulle correspondant au centre d'une inclusion quelconque. La fraction volumique des inclusions peut varier avec le temps à cause de l'apparition de nouvelles inclusions et/ou de changement de taille des inclusions. Elle est donnée par l'équation suivante :

$$C(0) = P\{x \in B\} = f_B \quad (:= \text{fraction volumique de la phase } B)$$

- **PROPRIÉTÉ 2 :** Lorsque la distance h tend vers des grandes valeurs, les corrélations s'estompent et la probabilité de rencontrer une inclusion devient très faible. Les inclusions sont donc décorrélatées et $C(h)$ tend vers une asymptote (ligne horizontale rouge sur la Figure 2.1).

Lorsque la valeur de cette asymptote $C_z(h) = f_B^2$, la probabilité de distribution des inclusions dans la matrice est dite ergodique i.e. la distribution des inclusions est homogène. Cette probabilité est la même en tout point du milieu. L'ergodicité est une propriété importante pour pouvoir déterminer un VER. Elle est vérifiée dans le cadre de cette étude. Par contre, pour $C_z(h) \neq f_B^2$, la distribution devient statistiquement inhomogène. Dans ce cas, l'échelle d'observation devient insuffisante pour définir un

VER parce que les inclusions restent corrélées (forte interaction). Il faut soit augmenter la surface de référence, soit augmenter la taille de l'échantillon. Dans ce cas, la condition de séparation d'échelle n'est pas respectée.

- **PROPRIÉTÉ 3** : Le covariogramme étant obtenu pour deux directions, si les asymptotes ont les mêmes valeurs, alors la répartition spatiale des inclusions est macroscopiquement isotrope. Dans le cas contraire, elle est anisotrope.
- **PROPRIÉTÉ 4** : La première intersection de $C_z(h)$ avec l'asymptote correspond à la distance de corrélation suivant la direction z notée $D_c(z)$ définie par :

$$D_c(z) = \min_{h \in \mathbb{R}^*} \{C_z(h) - f_B^2 = 0\}$$

C'est la distance au-delà de laquelle l'asymptote est atteinte et l'influence statistique des inclusions est négligeable. Cette distance est alors utilisée pour dimensionner un VER morphologique.

Dans plusieurs des études autour de la caractérisation de microstructure on utilise cet outil. Plus particulièrement dans la suivante.

2.1.2 Matériaux Polymères :

Depuis 2014, Je collabore avec S. Castagnet et le laboratoire Hydrogenus à Kyushu, au Japon, sur l'effet de la microstructure à l'échelle nano et micro sur l'endommagement des polymères soumis à de fortes pressions et décompressions rapides d'hydrogène. Les travaux précédents ont permis de relier le chargement au taux d'endommagement et à la statistique de présence des cavités, démontrant ainsi le lien entre la microstructure du polymère et l'endommagement. Leur recherche a également conduit au dimensionnement d'un VER et à la détermination de deux longueurs caractéristiques dans le modèle développé dans [26], ce qui confère au matériau un comportement non-local. Cependant, la complexité de la modélisation est accrue par l'évolution temporelle du VER. Plusieurs publications ont résulté de ces travaux [9, 65, 32, 53, 26, 9, 10].

Suite à cela, la thèse de M. Fazal a été entreprise et des échanges ont eu lieu avec le Japon pour établir un lien entre la chimie et le taux de réticulation des chaînes à l'échelle nanométrique, et l'endommagement. En utilisant des données de diffusion de rayons X aux petits angles (SAXS) avant et après la décompression, nous avons mis en évidence l'importance de disposer d'informations sur la chimie et la microstructure à des échelles fines pour comprendre les cinétiques d'endommagement à des échelles supérieures.

Actuellement, nous poursuivons nos études en ajoutant un chargement mécanique pour améliorer notre prédiction de l'endommagement. En juin 2019, nous avons eu la possibilité d'utiliser le synchrotron Soleil pendant 4 jours, ce qui nous a permis de mieux comprendre l'interaction entre les cavités et les cinétiques d'endommagement. Nous avons pu établir une relation entre la position, la taille, etc. de l'endommagement et la position et la taille des cavités pendant la décompression (voir la figure 2.2). Ce travail est en cours de finalisation via l'écriture de plusieurs articles.

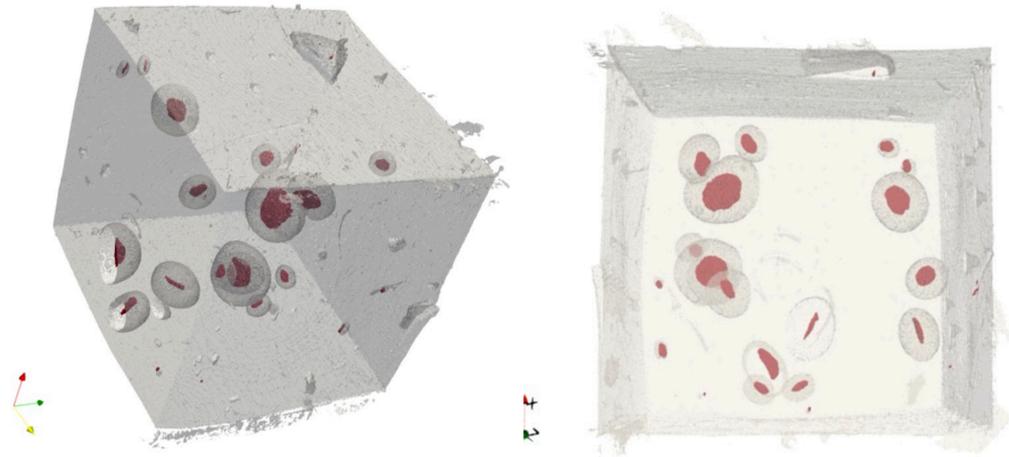


Figure 2.2 – Mise en évidence du lien entre les fissures (en rouge) et la présence de cavité (en transparence) dans lorsque leurs volume est maximal.

Ces nouvelles données sont essentielles pour simuler le phénomène d'endommagement des polymères après une décompression rapide. Cependant, il reste encore beaucoup de questions en suspens. Nos études ont renforcé notre conviction que la modélisation doit inclure un couplage fort entre la mécanique et la diffusion du gaz à différentes échelles.

2.1.2.1 Besoin de la compréhension mécanique ?

Plusieurs tentatives de simulation diffuso-mécanique ont été faite, en particuliers dans notre équipe. Que ce soit sur Abaqus via la thèse d'O. Kane Diallo ou sur le code FoXTRoT développé par M. Guéguen dans la thèse de M. Fazal. Le problème de ces simulations est évidemment le temps de calcul bien que ces calculs se font à l'échelle d'une cavité unique. Cela est dû en entre autre à la diffusion de gaz et son échelle de temps. J'ai débuté en 2022 une collaboration avec J. Collin (Prof. Université de Poitiers) pour développer un code utilisant la méthode de champ de phase pour simuler ce phénomène de cavitation. Plus précisément le champ de phase correspond à la concentration en hydrogène dans le matériau que l'on couple avec la mécanique en élasticité linéaire pour le moment. Les premiers résultats illustrés figure 2.3 sont prometteurs avec une-deux cavités dans un code python non parallélisé, les travaux en cours vont vers la simulation sur un champ de cavité qui donnera des réponses sur les contraintes locales autour d'une cavité et d'un cluster. Le calcul se fait via le langage python et à l'aide du code Fenics pour la partie éléments finis.

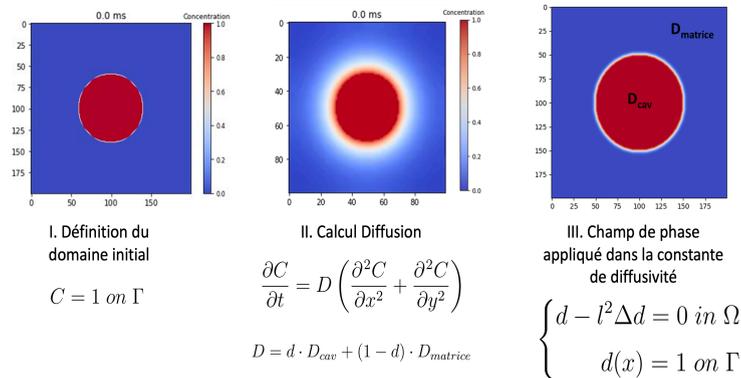


Figure 2.3 – Stratégie de simulation du phénomène par champ de phase.

2.1.2.2 En résumé

Ce matériau est clairement un bon candidat pour la modélisation non-locale de par la distribution des cavités mais également par la microstructure plus complexe induite par les chaînes à l'échelle nanométrique et comprenant des nano-vides détectables par SAXS [16]. La modélisation semble cependant très complexe étant donné les aspects multi-physique qui nécessitent un couplage fort entre les phénomènes mécaniques et de diffusion de gaz. Je reviendrai sur cela dans la partie projet de ce manuscrit. Cette partie de mon activité m'a permis de participer à 3 encadrements de thèse, 5 articles de rang A, 7 communications internationales et nationales.

2.1.3 Travaux autour des alliages de titane :

2.1.3.1 Les macrozones

Les alliages de Titane sont très sensibles à l'effet de texture sur les propriétés mécaniques, notamment en présence de macrozones (régions plus ou moins grandes contenant une forte densité de grains de même orientation). Plusieurs études dans la littérature mettent en exergue leur influences sans réellement corrélérer la réponse mécanique à leurs intensité ou taille [8, 38, 7]. Cette sensibilité à la distribution "en clusters" de grains de même orientation fait de cet alliage un bon candidat dans ma recherche d'un matériau non-local. J'ai alors commencé une collaboration avec mon collègue S. Hémerly sur la compréhension de l'abatement de propriétés mécaniques en traction et fatigue principalement, dû à la présence de ces macrozones.

Dans le cas de présence de macrozones, de grandes tailles, la question d'existence et de dimensionnement de VER se pose car l'échelle des grains peut être de l'ordre de la

dizaine de microns et la macrozone pouvant faire plusieurs centaines de microns, voire plusieurs millimètres. J'ai alors développé un solveur spectral (FFT) dans notre code interne FoXTRoT de sorte à pouvoir faire des simulations sur des agrégats polycristallins de très grandes tailles. L'objectif principal ici n'étant pas de développer le code le plus rapide possible, nous avons utilisé l'algorithme originel basé sur les travaux de Moulinec et Suquet. Cela nous a permis de nouer une collaboration avec l'université de Santa Barbara (USBC) [21]. En effet lors de nos premières études [22, 20] nous avons montré que la présence de macro-zones modifie significativement le comportement macroscopique des alliages de Titane.

Pour mettre en évidence ce phénomène nous avons effectué des simulations sur microstructure réelle avec macrozone et virtuelle sans macro-zone à texture constante et en conservant les morphologies de grains Figure 2.4.

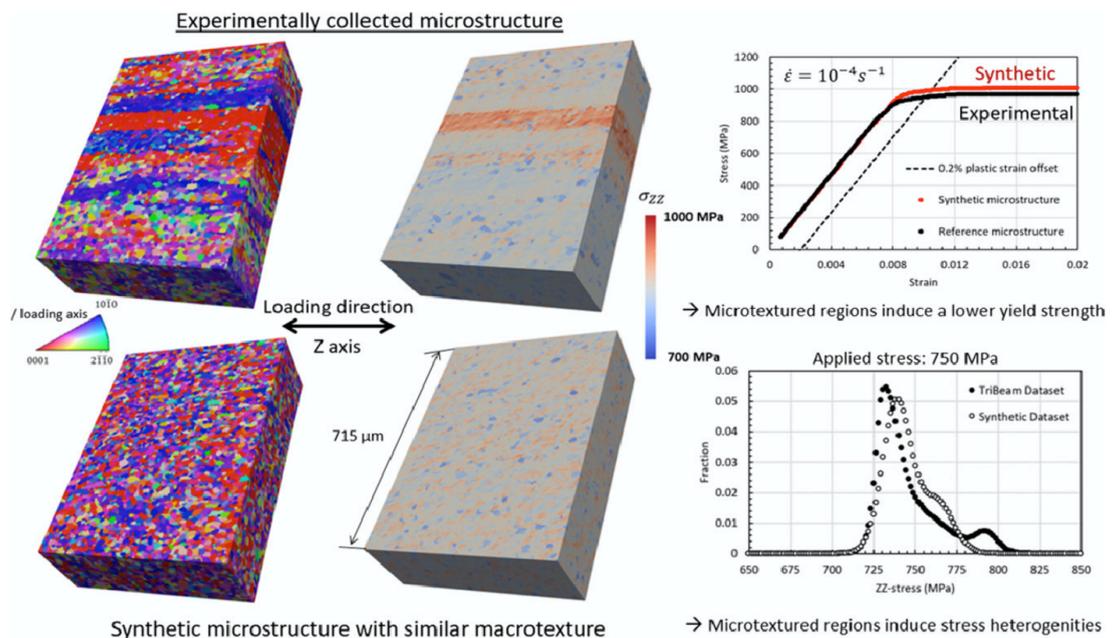


Figure 2.4 – Effet de la macro-texture sur la réponse mécanique sur une microstructure réelle.

La comparaison des simulations nous montre un effet significatif de la macro-zone. Par conséquent les méthodes de transitions d'échelles classiques doivent s'appliquer avec prudence dans ce cas. Afin de mieux comprendre l'effet de ces macrozones, j'ai développé un code de génération de macro-zones [50] (figure 2.5). Ce code permet de contrôler la taille et l'intensité de la macrozone sans changer la texture. Cela a mis en évidence l'effet de taille et de morphologie de la macrozone sur le comportement macroscopique dans le cadre d'un comportement elasto-viscoplastique.

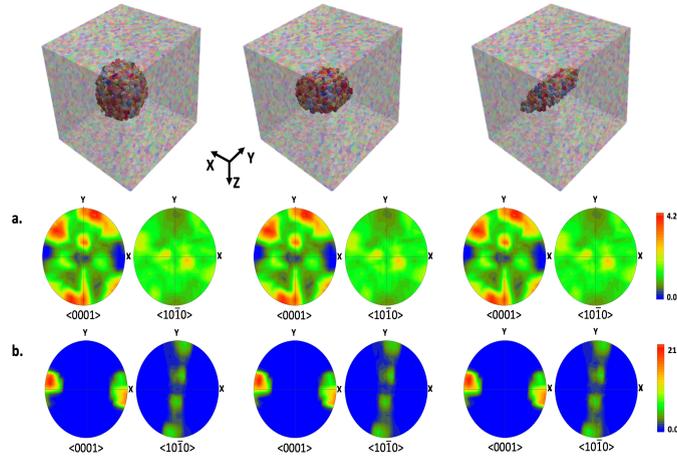


Figure 2.5 – Différentes morphologies de macro-zones générées en conservant la macro-texture

Dans notre référence récente [50], nous avons mis en évidence l'effet de la taille et morphologie de la macrozone sur la distribution des contraintes (voir figure 2.6,2.7) et l'abatement de propriétés mécaniques (figure 2.8). Cela nous amène à penser qu'il est difficilement envisageable d'utiliser un schéma d'homogénéisation "classique" (type auto-cohérent) pour modéliser le comportement macroscopique, ou peut-être passer par une convergence double échelle. Une modélisation non-locale avec transition d'échelle par Γ -convergence peut donc avoir un intérêt ici.

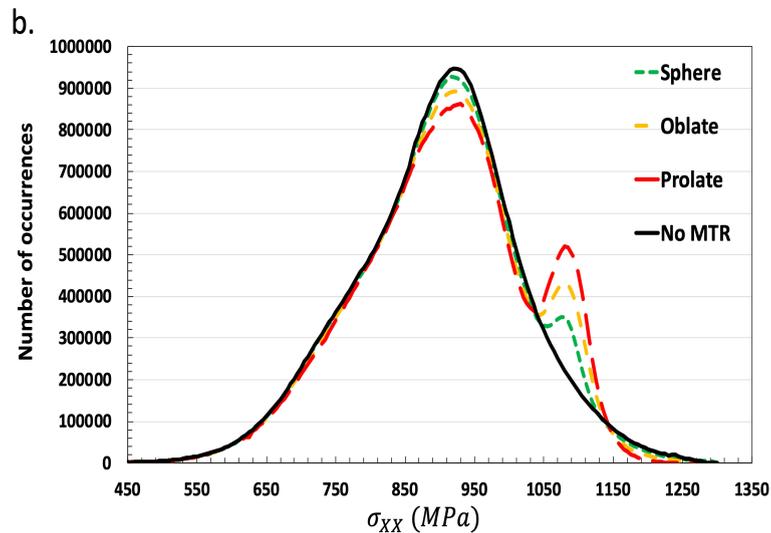


Figure 2.6 – Distribution de la contrainte pour les différentes morphologies de macro-zones pour une contrainte imposés de 900MPa.

Nous avons également constaté un effet à longue portée (non-local) sur la déformation plastique. Les travaux en cours ont pour objectif de prendre en compte la non-localité en enrichissant le modèle EVP. Les alliages de titane avec présence de macrozones semblent alors être de bons candidats dans ma recherche de matériau non-local. Les

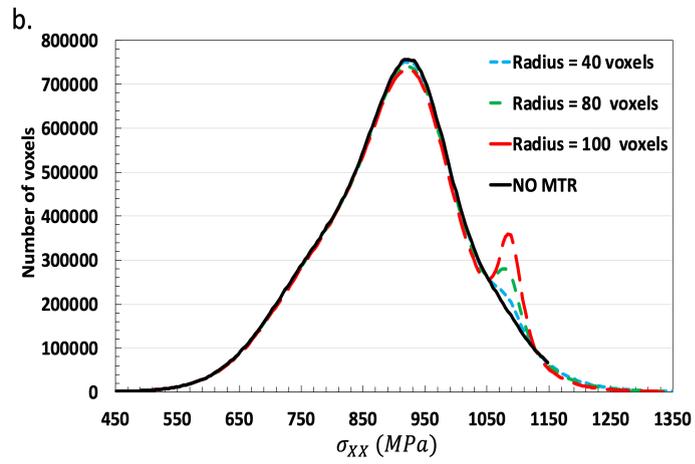


Figure 2.7 – Distribution de la contrainte pour les différentes tailles de macro-zones sphériques pour une contrainte imposés de 900MPa

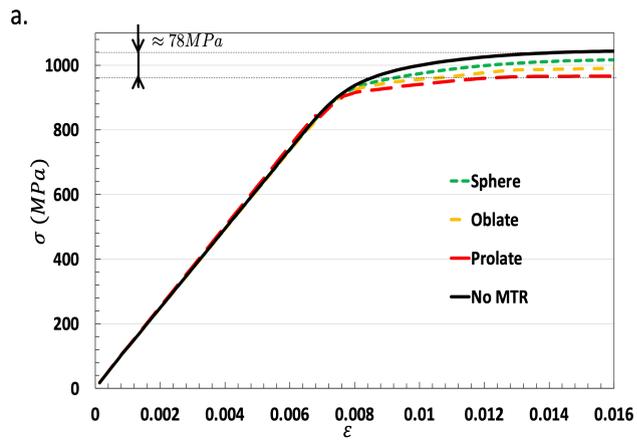


Figure 2.8 – Courbe contrainte et déformation pour les différentes morphologies de macro-zones.

prochaines études seront également axées sur l'effet de ces macrozones mais lors de sollicitations répétées. Cela demandera une adaptation du modèle précédemment utilisé en ajoutant un second gradient de déformation adapté.

2.1.3.2 Approche multi-échelle, prise en compte de la phase bêta

D'autres études comme celle sur les alliages $\alpha - \beta$ de titane ont nécessité des générations de microstructures complexes et ont mis en évidence un effet des orientations des deux phases et la morphologie du grain β sur le comportement mécanique de l'alliage. Comme pour la précédente étude, la génération de la microstructure se fait en conservant la morphologie des grains α et la texture cristallographique du polycristal. Dans l'étude [23], nous avons donc développé un code de génération de ces microstructures particulières afin de mettre en évidence les effets des grains α contenus dans des β sur le comportement effectif, la distribution des contraintes figure 2.10 et la localisation des déformations plastiques.

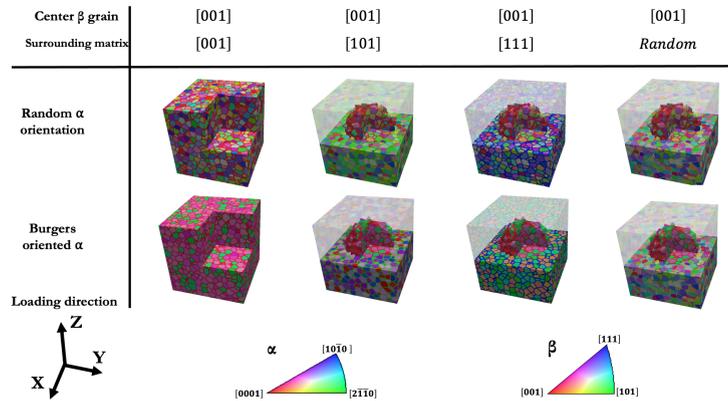


Figure 2.9 – Génération d'agrégats α/β d'alliages de titane

2.1.3.3 En résumé

Cette partie de mon activité m'a permis d'encadrer 2 stages de Master, a conduit à la publication de 6 articles et m'a surtout permis de développer un solveur spectral et plusieurs codes de générations de microstructures.

2.1.4 Conclusion

En conclusion, Il semble que l'on puisse trouver des matériaux nécessitant un modèle non-local pour leur compréhension. Cela vient du besoin de garder un lien fort avec la microstructure à l'échelle macroscopique et donc d'une condition de séparation d'échelles pas forcément bien respectées.

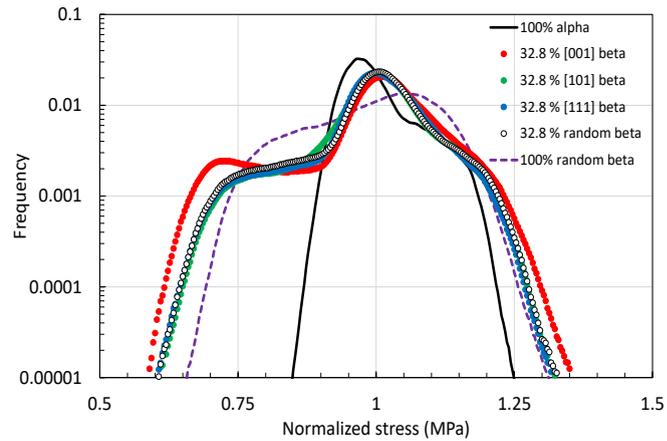


Figure 2.10 – Fréquence de distribution de l'amplitude de contrainte normalisée le long de la direction de chargement.

Les deux matériaux polymères (soumis à une décompression rapide de gaz) et les alliages de Titane (avec macro-zones, ou $\alpha - \beta$) sont donc deux bons candidats pour une modélisation non-locale. J'ai décidé d'axer mon projet de recherche sur la modélisation du comportement de ces deux matériaux. Mais pas seulement, les matériaux composites à fibre longues sont des candidats également.

Chapitre 3

Mes projets de recherches

3.1 Projets à très court terme

3.1.1 Matériaux composites :

Pour prendre en compte les effets à longue distance de la microstructure sur un comportement mécanique, les matériaux composites à fibres longues semblent être une option évidente. C'est pourquoi j'ai concentré une partie de mes activités (ainsi que mes réponses aux appels à projets) sur cette catégorie de matériaux. Les deux études suivantes ont été récemment débutées en collaboration avec le Pr D. Halm. Je prévois de travailler avec lui sur une partie de mon projet dans les années à venir, en particulier sur la modélisation de l'endommagement des matériaux composites.

3.1.1.1 Matériaux composites soumis au feu

Le premier projet mené dans la thèse de M. ABDOUSSALAM consiste à modéliser la transformation du matériau composite non endommagé en charbon, due à une exposition à la chaleur (phénomène de pyrolyse), qui entraîne une diminution de sa résistance mécanique. Des études menées à l'Institut Pprime ont récemment montré que cette réduction des propriétés mécaniques est proportionnelle à la densité d'énergie reçue pendant l'exposition à la chaleur. Des paramètres de modélisation ont été obtenus à partir de résultats expérimentaux sur des éprouvettes de faible épaisseur. Cependant, la question de la transposition de ces résultats à l'échelle de la structure réelle reste ouverte. La compréhension des couplages multi-physiques est un enjeu scientifique majeur. Bien que des travaux de la littérature se soient intéressés à la résistance mécanique résiduelle des composites ayant subi un flux de chaleur, peu d'informations sont disponibles sur le comportement de ces matériaux soumis simultanément à des contraintes mécaniques et à un flux thermique. Les efforts de modélisation se limitent généralement à un couplage faible, dans lequel les effets thermiques ont une influence unique sur les propriétés mécaniques.

La méthode de modélisation utilisée permet de simuler numériquement la décomposition thermique se produisant à travers l'épaisseur du matériau. La température T ainsi que des champs non-conservatifs de paramètre d'ordre α , qui est associé à la nature

des phases, sont utilisés pour décrire l'état local d'une microstructure hétérogène. À un point totalement transformé en charbon, on a $\alpha = 1$, tandis qu'il tend vers zéro $\alpha \rightarrow 0$ lorsqu'on s'en éloigne.

L'évolution de ce champ, à la fois temporelle et spatiale, est régie par une loi d'Arrhenius dans laquelle nous avons inclus un terme de gradient :

$$\dot{\alpha} = A\Delta H(1 - \alpha) \exp \frac{-E_i}{RT} + v\Delta\alpha$$

L'énergie libre totale s'exprime alors comme la somme d'une contribution d'une densité d'énergie libre homogène $w_0(T, \alpha) = \Delta H(1 - \alpha) \exp \frac{-E_i}{RT}$ et un terme quadratique en gradient, relié à l'énergie de l'interface :

$$w(T, \alpha, \nabla\alpha) = \frac{1}{2}\Delta H(1 - \alpha)^2 \exp \frac{-E_i}{RT} + \frac{l_c}{2}\nabla\alpha\nabla\alpha$$

Le terme en gradient ajouté vise à localiser la zone de transition entre la zone dégradée et la zone saine, ainsi qu'à propager le front de dégradation. Cette modélisation permet une première approche de la cinétique de dégradation par pyrolyse d'un matériau composite, avec des premiers résultats présentés.

Dans le cadre de mon projet, l'un des premiers objectifs est de modéliser la dégradation par chargement thermique mentionnée précédemment, en ajoutant un second champ de phase pour modéliser l'endommagement. Cependant, cette approche présente des défis importants tant au niveau de la modélisation que de la simulation.

3.1.1.2 Matériaux composites à microstructure complexe

Une autre partie de mon projet concerne ma seconde thèse en cours sur l'endommagement de matériaux composites. Plus précisément, il s'agit de la thèse de H. Elmansouri intitulée "Modélisation variationnelle et non-locale de matériaux structurés". L'objectif de ce travail est de proposer un modèle non-local du comportement des matériaux composites structurés avec une mise en oeuvre numérique. L'analyse portera sur le comportement, la tenue et la durée de vie des matériaux composites. Les matériaux composites structurés ciblés sont les composites bobinés, tissés, aléatoirement renforcés et torsadés, caractérisés par leur morphologie complexe et donc la présence de forts gradients de propriétés. Le comportement non-local de ces matériaux joue un rôle majeur sur les mécanismes d'endommagement. La modélisation retenue utilisera une méthode variationnelle pour conserver les informations de microstructures obtenues par analyse d'image. L'objectif principal de cette modélisation est de mieux décrire le comportement effectif des matériaux en fonction de leur mode d'élaboration, de mise en forme ou d'assemblage. En particulier, nous cherchons à mettre en évidence les conséquences du mode de tissage pour les matériaux composites tissés, l'influence des différentes orientations pour les matériaux bobinés, ou encore l'importance de la loi de probabilité régissant la distribution de fibres pour les composites aléatoirement renforcés. La simulation sera effectuée en utilisant la méthode de champ de phase pour prendre en compte l'endommagement.

3.2 Projets à moyen/long terme

3.2.1 Modélisation non-locale avec endommagement

Dans la première partie de mon projet, j'ai développé une modélisation qui a permis d'obtenir une énergie dépendante du champ virtuel v à partir de l'échelle de la microstructure. Mon objectif est maintenant d'enrichir cette modélisation en l'adaptant à un modèle d'endommagement. Pour cela, je vais suivre la même stratégie que celle proposée par Francfort et Marigo [18, 17] ainsi que les travaux qui ont suivi [57, 5, 1, 56, Yvonnet et al.]. Cette approche permettra de mieux lier la microstructure aux variables non-locales du modèle, telles que la longueur tensorielle l_c , qui dépendent de la microstructure.

3.2.2 Modélisation non-locale dans le cas des polycristaux.

Une suite logique de nos études pour les polycristaux serait de poursuivre dans le cas de la fatigue, étant donné les enjeux scientifiques importants autour de l'effet des macro-zones avec ce type de sollicitation. En ce qui concerne la modélisation, une transition d'échelle similaire à celle réalisée dans le premier chapitre est également un enjeu important que je souhaite aborder. Cela nécessitera la prise en compte des clusters d'orientation de grains dans le modèle, et dans un premier temps, ce travail sera effectué en utilisant l'élasticité cristalline anisotrope afin d'éviter des difficultés supplémentaires.

De plus, nos précédentes études ont montré que la présence de macro-zones modifie significativement le comportement macroscopique des alliages de titane, ce qui signifie que les méthodes de transition d'échelle utilisées précédemment ne peuvent pas s'appliquer dans ce cas. Les futures études seront donc axées sur l'effet de ces macro-zones lors de sollicitations répétées, ce qui nécessitera l'adaptation du modèle précédemment utilisé en ajoutant, entre autres, un gradient de déformation adapté à la plasticité cristalline des alliages de titane.

3.2.3 Modélisation de l'endommagement des polymères en décompression rapide

Comme mentionné précédemment, les modèles non-locaux obtenus par méthode variationnelle présentent l'avantage de conserver les paramètres et grandeurs caractéristiques de l'échelle de la microstructure. Cependant, la forme de l'énergie mécanique et l'obtention de variables internes ayant une densité d'énergie propre et dépendant des autres champs mécaniques constituent un inconvénient, car cela rend difficile la simulation de ces modèles.

Une partie de mon projet de recherche consiste à explorer la méthode de champ de phase pour adapter les modèles obtenus aux différentes physiques étudiées et énoncées précédemment. Dans le cas de la diffusion de gaz dans les polymères, l'utilisation d'un champ de phase pour la concentration en gaz est particulièrement appropriée. De plus,

cette méthode permet une meilleure gestion des gradients en ajoutant un ou plusieurs champs supplémentaires. Le modèle devra prendre en compte les différentes échelles (figure 3.1). Cette relation entre les échelles a été mise en évidence durant la thèse de M. Fazal que j'ai co-encadrée et qui a été soutenue en 2019.

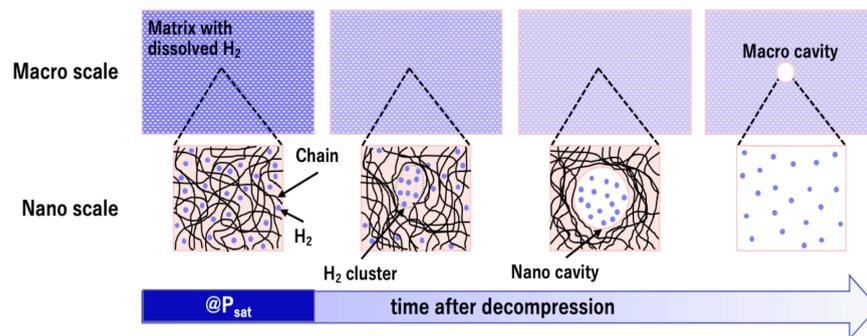


Figure 3.1 – Intéraction entre les échelles au cours d'une décompression rapide en gaz

3.2.4 Conclusion

Pour résumer mon projet de recherche, je vise à adapter les modèles développés dans les premiers chapitres aux matériaux que j'étudie, tout en maintenant une liaison entre les échelles grâce au champ virtuel v , puis en passant à un modèle d'endommagement pour relier les longueurs. Cela présentera des défis spécifiques à chaque classe de matériaux. De plus, je considère qu'en mécanique des matériaux il est crucial que le modèle puisse être intégré dans un code de calcul pour permettre des simulations numériques, et dans ce domaine, la méthode de champs de phase sera un atout précieux.

3.3 Création /développement de logiciels

Je fais partie des co-développeurs du code interne FoXTRoT, qui a été spécialement conçu pour modéliser les matériaux et pour permettre le couplage multi-physique, incluant la mécanique linéaire et non-linéaire en 3D, la thermomécanique et la diffusomécanique. Ce code permet de simuler la microstructure représentative de différents types de matériaux, tels que les agrégats polycristallins métalliques et les matériaux composites. Nous avons présenté ce code lors du colloque national sur le calcul des structures ([lien](#)). Il se compose de deux solveurs, EF et spectral, que nous décrivons brièvement ci-dessous.

3.3.1 Solveur éléments finis

Le code de calcul éléments finis FoXTRoT-EF a été développé au laboratoire Pprime dans l'équipe endommagement et durabilité, dans le but de développer/utiliser des lois de comportements internes pour traiter des problèmes à grands nombres de degrés de libertés dans un cadre non-linéaire, incluant la plasticité cristalline et les couplages multiphysiques. Depuis 2010, plusieurs plugins d'homogénéisation ont été créés pour les thématiques du laboratoire. Par la suite, dans le cadre de la thèse de M. Ben Elahj Salah, un élément fini non local pour l'homogénéisation a été développé, basé sur une formulation mixte prenant en compte une interpolation de type Hermite.

3.3.2 Implémentation d'un élément fini enrichi pour l'homogénéisation

Durant la thèse de S. Ben Elhaj Salah, le modèle basé sur l'énergie $W_{hom}^{(0)}(u, v)$ (voir l'équation (3.1)) a été mis en $\frac{1}{2}$ uvre dans le code EF FoXtroT. Pour cela, un élément fini enrichi a été développé pour prendre en compte le champ v de déplacement virtuel associé aux inclusions tout en conservant une interpolation classique de type Lagrange. Il convient de noter que cet élément fini présente un caractère non local. Un premier test numérique tridimensionnel a également été réalisé dans FoXtroT et a produit des résultats encourageants.

$$W_{hom}^{(0)}(u, v) = \frac{1}{2}E \int_{\Omega} \varepsilon_x(u) : \tilde{\mathbb{C}}_0^m(x, \omega) : \varepsilon_x(u) dx - E \int_{\Omega} \varepsilon_x(u) : \tilde{\mathbb{C}}_0^m(x, \omega) : \varepsilon_x(v) dx + \frac{1}{2}E \int_{\Omega} \varepsilon_x(v) : (\tilde{\mathbb{C}}_0^m(x, \omega) + \theta_1^2 \tilde{\mathbb{C}}_0^i(x, \omega)) : \varepsilon_x(v) dx \quad (3.1)$$

3.3.3 Solveur spectral

En 2015, j'ai lancé le développement d'un solveur FFT en m'inspirant des travaux d'un stagiaire de Master pour une version 2D en C++. Par la suite, on a créé une version C++ parallélisée à mémoire distribuée (MPI) qui est particulièrement performante pour nos études. Ce développement a été effectué avec le soutien d'un IR Numérique (Dr. M. Guéguen) dans le but de l'intégrer dans le code FoXTRoT.

En effet, dans plusieurs des études précédemment mentionnées, la recherche de VER a nécessité la simulation de gros volumes, ce qui répond également à un besoin du laboratoire lié à l'arrivée du Tomographe et de nouvelles méthodes d'acquisition 3D découlant de collaborations [21]. Tous ces éléments ont motivé le développement de ce code ainsi que des lois de comportement adaptées à ces études.

Actuellement, ce solveur spectral reposant sur la FFT permet de mener des simulations mécaniques non-linéaires sur des échantillons de microstructures, qui sont représentés par des maillages 3D structurés. En France, il y a actuellement de nombreux développements sur les polycristaux utilisant ce type de solveur, comme cela est mentionné

dans les références [39, 44, 46, 59, 35, 64, 7]. L'algorithme est fondé sur les travaux de Moulinec et Suquet [45, 44], avec leur opérateur de Green qui peut générer des oscillations lorsqu'il y a une forte présence de contraste. Cependant, ces oscillations seront corrigées dans les futurs développements en utilisant l'un des nombreux résultats présents dans la littérature.

La méthode de résolution du solveur FFT présente l'avantage de ne pas nécessiter la création d'un maillage et peut utiliser directement la segmentation d'images représentant la microstructure du matériau. Ceci s'avère extrêmement bénéfique pour le traitement (quasi-) direct des données obtenues à partir de notre tomographie pour diverses classes de matériaux.

Le code utilise des directives OpenMP pour le multi-threading et des bibliothèques pour les calculs matriciels (Eigen) et de transformées de Fourier discrètes (FFTW). Ce solveur est capable d'effectuer rapidement des calculs sur de grandes quantités de données en utilisant un modèle de plasticité cristalline décrit par l'équation 3.2.

$$\dot{\epsilon}^P(x) = \sum_{s=1}^N m^s(x) \dot{\gamma}^s(x) \quad (3.2)$$

avec :

$$\dot{\gamma}^s(x) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|m^s(x) : \sigma(x)|}{\tau_0^s} \right)^n \text{sgn}(m^s(x) : \sigma(x)) \quad (3.3)$$

Un exemple d'utilisation de l'agrégat pour effectuer des calculs FFT et une comparaison des résultats expérimentaux et numériques sont présentés dans la Figure 1. Le solveur FFT est également utilisé pour étudier l'effet des macro-zones sur le comportement macroscopique, comme illustré dans la figure 3.2.

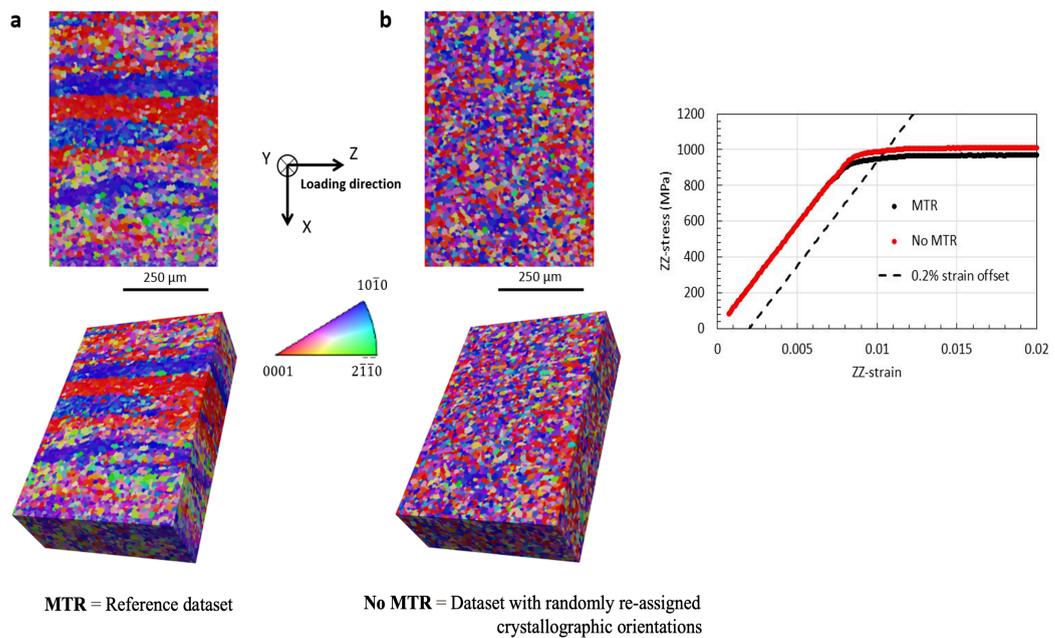


Figure 3.2 – Exemple d'agrégat utilisé pour faire des calculs FFT et concordance entre les résultats expérimentaux et numériques [21].

3.3.4 Génération de microstructure polycristalline

3.3.4.1 Génération de macro-zone

J'ai également créé plusieurs autres programmes qui permettent, par exemple, de créer ou de supprimer des macrozones dans des alliages de titane tout en conservant la macro-texture cristalline (voir Figure 3.3), ainsi que de générer des polycristaux à plusieurs échelles α/β (voir Figure 3.4). Ces deux scripts de génération de microstructures sont basés sur des outils de traitement d'image. Cette approche est particulièrement pertinente étant donné que la simulation est réalisée ensuite à l'aide d'un solveur FFT, ce qui élimine le besoin de générer un maillage.

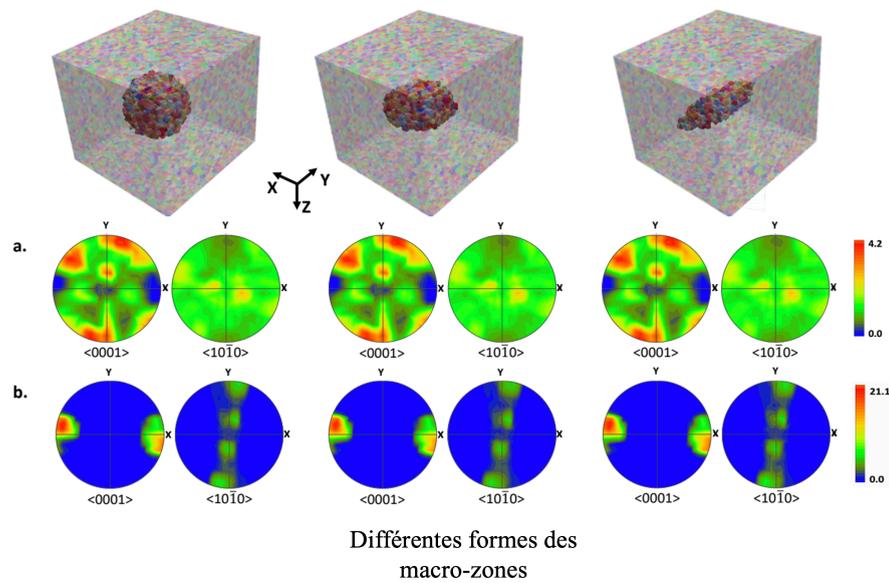


Figure 3.3 – Génération de différentes morphologies de macrozones, telles que des sphères ou des ellipsoïdes prolates ou oblates, avec une texture cristallographique constante [50].

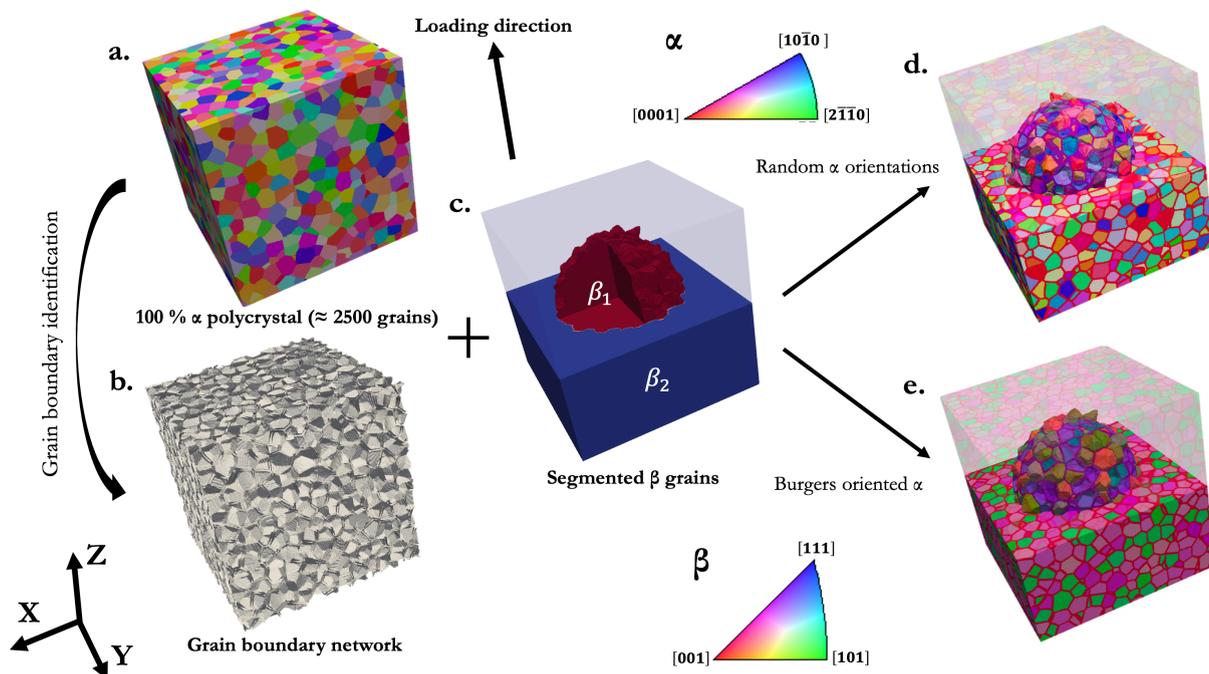


Figure 3.4 – Génération d'agrégats α/β d'alliages de titane

Pour plus de détails sur l'algorithme de génération et d'optimisation de microstructures avec macrozones basé sur l'algorithme de Levenberg-Marquardt, veuillez vous référer à l'article [50].

Pour la génération de microstructures α/β , vous pouvez vous référer à l'article [23]. Dans ces algorithmes, j'utilise plusieurs outils de traitement d'images pour générer des masques qui permettent d'obtenir la microstructure souhaitée. Par exemple, l'illustration de la figure 3.4 montre comment on peut générer un agrégat polycristallin d'un alliage de Titane avec seulement la phase alpha (figure 3.4_a). Ensuite, l'algorithme détecte les joints de grains et ajuste leur épaisseur pour obtenir la fraction volumique souhaitée. Pour ce faire, il utilise des outils de traitement d'image tels que les érosions/dilatations (figure 3.4_b). L'algorithme peut ensuite définir un grain bêta central sphérique, par exemple, de taille souhaitée en créant un masque sphérique et en prenant tous les joints de tous les grains qui interceptent le grain central (figure 3.4_c). Finalement, lors de la dernière étape, l'algorithme attribue une orientation aux deux grains bêta (figure 3.4_d) et peut modifier l'orientation des grains alpha afin de respecter les relations de Burgers, qui relie l'orientation du grain alpha à celle du grain bêta.

En plus de cela, j'ai également développé plusieurs scripts (Python et Matlab) pour effectuer des analyses statistiques d'inclusions dans un matériau hétérogène, un code de covariance pour définir des grandeurs caractéristiques, des codes de segmentation et de traitement d'images, etc.

Quatrième partie

Conclusion

Conclusion

Dans ce manuscrit, je présente un résumé de mes activités des dix dernières années. Du côté de l'école, je me suis concentré sur l'amélioration de l'enseignement des mathématiques en cherchant à mieux lier la théorie et l'application. Bien que la partie administrative puisse être chronophage, elle est également importante pour notre profession. C'est pourquoi je m'efforce de participer aux différentes instances pour aider à administrer et faire évoluer nos activités.

En ce qui concerne la recherche, le coeur et le fil conducteur de mes études sont axés sur la modélisation non-locale. En m'appuyant sur les résultats existants dans la littérature, j'ai cherché à trouver des matériaux non-locaux afin de mieux relier les différentes échelles. Cela implique de comprendre les liens entre la microstructure et le comportement macroscopique du matériau. J'ai eu de nombreuses collaborations fructueuses tant au sein de mon équipe qu'à l'extérieur, notamment à travers des projets, des encadrements de thèses/stages et des collaborations directes entre chercheurs. J'ai également eu l'opportunité d'encadrer plusieurs études, bénéfiques tant pour moi que pour les étudiants que j'ai encadrés (enfin, j'espère).

De manière plus générale, mes activités de recherche se concentrent sur l'application des mathématiques à la mécanique des matériaux, avec un accent particulier sur le développement numérique. J'apprécie la diversité des matériaux avec lesquels je travaille, ce qui est très enrichissant, et je souhaite continuer à travailler sur différentes classes de matériaux. Mes perspectives de recherche sont très denses et intéressantes, notamment en ce qui concerne la modélisation. J'ai encore beaucoup de compétences à acquérir et à partager avec mes collègues et les étudiants. C'est pourquoi j'ai entrepris la démarche de demander une habilitation à diriger des recherches. Cette étape importante me permettra de continuer à approfondir mes connaissances et mes compétences, et de contribuer de manière significative au développement de mon domaine de recherche. Pour la suite de ma carrière, j'ai pour ambition de poursuivre mes explorations dans les deux domaines de recherche que j'ai déjà entamés : la modélisation théorique de l'endommagement par transition d'échelle d'une part, et le développement d'outils complémentaires dans le domaine expérimental d'autre part. Je compte approfondir ces deux volets en m'investissant davantage dans des collaborations fructueuses avec d'autres chercheurs et professionnels du domaine.

Bibliographie

- [1] Amor, H., Marigo, J.-J. et Maurini, C. (2009). *Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact : Numerical experiments*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 57(8):1209–1229.
- [2] Attouch, H., Buttazzo, G. et Michaille, G. (2014). *Variational analysis in Sobolev and BV spaces : applications to PDEs and optimization*. SIAM.
- [3] Benallal, A. et Marigo, J.-J. (2006). *Bifurcation and stability issues in gradient theories with softening*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 15(1):S283.
- [4] Birkhoff, G. D. (1942). *What is the ergodic theorem ?* The American Mathematical Monthly, 49(4):222–226.
- [5] Bourdin, B., Marigo, J. J., Maurini, C. et Sicsic, P. (2014). *Morphogenesis and propagation of complex cracks induced by thermal shocks*. Physical Review Letters, 112(1):1–5.
- [6] Braides, A. (2002). *Gamma-convergence for Beginners, volume 22*. Clarendon Press.
- [7] Bretin, R., Levesque, M. et Bocher, P. (2019). *Neighborhood effect on the strain distribution in linearly elastic polycrystals : Part 1 â Finite element study of the interaction between grains*. International Journal of Solids and Structures, 176-177:36–48.
- [8] Cappola, J., Stinville, J.-C., Charpagne, M.-A., Callahan, P. G., Echlin, M. P., Pollock, T. M., Pilchak, A. et Kasemer, M. (2020). *Acta Materialia On the Localization of Plastic Strain in Microtextured Regions of Ti-6Al-4V*. Acta Materialia.
- [9] Castagnet, S., Mellier, D., Nait-Ali, A. et Benoit, G. (2018). *In-situ X-ray computed tomography of decompression failure in a rubber exposed to high-pressure gas*. Polymer Testing, 70(June):255–262.
- [10] Castagnet, S., Nait-Ali, A. et Ono, H. (2019). *Effect of pressure cycling on decompression failure in EPDM exposed to high-pressure hydrogen*. In Constitutive models for rubber XI, pages 168–173. CRC Press/Balkema.

- [11] Chen, Y., Vasiukov, D., Gélébart, L. et Park, C. H. (2019). *ScienceDirect A FFT solver for variational phase-field modeling of brittle fracture*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 349:167–190.
- [12] Dal Maso, G. (1993). *An Introduction to Γ -Convergence*. *Birkhäuser Boston, Boston, MA*.
- [13] Dal Maso, G. et Modica, L. (1985). *Nonlinear stochastic homogenization and ergodic theory*. *Università di Pisa. Dipartimento di Matematica*.
- [14] Elhaj Salah, S. B., Nait-Ali, A., Gueguen, M. et Nadot-Martin, C. (2020). *Non-local modeling with asymptotic expansion homogenization of random materials*. *Mechanics of Materials*, 147:103459.
- [15] Eringen, A. C. (1972). *Nonlocal polar elastic continua*. *International journal of engineering science*, 10(1):1–16.
- [16] Fazal, M., Castagnet, S., Nait-ali, A. et Nishimura, S. (2020). *Local kinetics of cavitation in hydrogen-exposed EPDM using in-situ X-Ray tomography : Focus on free surface effect and cavity interaction*. *Polymer Testing*, page 106723.
- [17] Francfort, G. et Marigo, J.-J. (1999). *Une approche variationnelle de la mécanique du défaut*. *ESAIM : Proceedings*, 6:57–74.
- [18] Francfort, G. et Marigo, J. J. (2002). *Vers une théorie énergétique de la rupture fragile*. *Comptes Rendus - Mécanique*, 330(4):225–233.
- [19] Green, A. E. et Rivlin, R. S. (1964). *Multipolar continuum mechanics*. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 17:113–147.
- [20] Hémerly, S., Nait-Ali, A., Guéguen, M. et Villechaise, P. (2018). *Mechanical study of crystalline orientation distribution in Ti-6Al-4V : An assessment of micro-texture induced load partitioning*. *Materials and Design*, 137(137):22–32.
- [21] Hémerly, S., Naït-Ali, A., Guéguen, M., Wendorf, J., Polonsky, A. T., Echlin, M. P., Stinville, J. C., Pollock, T. M. et Villechaise, P. (2019). *A 3D analysis of the onset of slip activity in relation to the degree of micro-texture in Ti6Al4V*. *Acta Materialia*, 181:36–48.
- [22] Hémerly, S., Nait-Ali, A. et Villechaise, P. (2017). *Combination of in-situ SEM tensile test and FFT-based crystal elasticity simulations of Ti-6Al-4V for an improved description of the onset of plastic slip*. *Mechanics of Materials*, 109:1–10.
- [23] Huet, A., Na, A., Giroud, T. et Villechaise, P. (2022). *Journal Pre-proof Onset of plastic deformation and strain localization in relation to β phase in metastable β and dual phase Ti alloys*. *Acta Materialia*.
- [24] Jeulin, D. (2000). *Random texture models for material structures*. *Statistics and Computing*, 10(2):121–132.

- [25] Jeulin, D. (2012). *Morphology and effective properties of multi-scale random sets : A review*. *Comptes Rendus Mécanique*, 340(4-5):219–229.
- [26] Kane-Diallo, O., Castagnet, S., Nait-Ali, A., Benoit, G. et Grandidier, J.-C. (2016). *Time-resolved statistics of cavity fields nucleated in a gas-exposed rubber under variable decompression conditions â Support to a relevant modeling framework*. *Polymer Testing*.
- [27] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V. et Jeulin, D. (2003). *Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach*. *International Journal of solids and structures*, 40(13-14):3647–3679.
- [28] Krengel, U. (1985). *De Gruyter studies in mathematics : Vol. 6. Ergodic theorems*.
- [29] Kristensen, P. K. et Martínez-Pañeda, E. (2020). *Phase field fracture modelling using quasi-Newton methods and a new adaptive step scheme*. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 107(December).
- [30] Kröner, E. (1967). *Elasticity theory of materials with long range cohesive forces*. *International Journal of Solids and Structures*, 3(5):731–742.
- [31] Krumhansl, J. A. (1968). *Some considerations of the relation between solid state physics and generalized continuum mechanics*. In *Mechanics of generalized continua*, pages 298–311. *Springer*.
- [32] Kulkarni, S. S., Choi, K. S., Kuang, W., Menon, N., Mills, B., Soulami, A. et Simmons, K. (2021). *Damage evolution in polymer due to exposure to high-pressure hydrogen gas*.
- [33] Lantuéjoul, C. (2002). *Geostatistical simulation : models and algorithms*. *Springer, Berlin, Germany*.
- [34] Lasry, D. et Belytschko, T. (1988). *Localization limiters in transient problems*. *International Journal of Solids and Structures*, 24(6):581–597.
- [35] Lebensohn, R. A. et Needleman, A. (2016). *Numerical implementation of non-local polycrystal plasticity using fast Fourier transforms*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 97:333–351.
- [36] Li, B. et Maurini, C. (2019). *Crack kinking in a variational phase-field model of brittle fracture with strongly anisotropic surface energy*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 125:502–522.
- [37] Licht, C. et Michaille, G. (2005). *A nonlocal energy functional in pseudo-plasticity*. *Asymptotic Analysis*, 45:313–339.

- [38] Ma, R., Truster, T. J., Ma, R. et Truster, T. J. (2019). *A Hierarchical Multiscale Modeling Investigation on the Behavior of Microtextured Regions in Ti-6242 α/β Processing*. *Metals*, 9(2):233.
- [39] Marano, A., Gélébart, L. et Forest, S. (2021). *FFT-based simulations of slip and kink bands formation in 3D polycrystals : Influence of strain gradient crystal plasticity*. *J. Mech. Phys. Solids*, 149:104295.
- [40] Michaille, G., Nait-Ali, A. et Pagano, S. (2012). *Two dimensional deterministic model of a thin body with randomly distributed high conductivity fibers*. *Applied Mathematics Research eXpress*, 1:122–156.
- [41] Michaille, G. G., Nait-Ali, A. et Pagano, S. S. (2011). *Macroscopic behavior of a randomly fibered medium*. *Journal de mathématiques pures et appliquées*, 96:230–252.
- [42] Milhet, X., Nait-Ali, A., Tandieng, D., Liu, Y.-J., Van Campen, D., Caccuri, V. et Legros, M. (2018). *Evolution of the nanoporous microstructure of sintered Ag at high temperature using in-situ X-ray nanotomography*. *Acta Materialia*, 156.
- [43] Mindlin, R. D. (1964). *Micro-structure in linear elasticity*. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 16(1):51–78.
- [44] Moulinec, H. et Suquet, P. (1995). *A FFT-Based Numerical Method for Computing the Mechanical Properties of Composites from Images of their Microstructures*. In Pyrz, R., éditeur : *IUTAM Symposium on Microstructure-Property Interactions in Composite Materials*, pages 235–246, Dordrecht. Springer Netherlands.
- [45] Moulinec, H. et Suquet, P. (1998). *Computer methods in applied mechanics and engineering A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*. *Rapport technique, Ima*.
- [46] Moulinec, H. et Suquet, P. (2003). *Comparison of FFT-based methods for computing the response of composites with highly contrasted mechanical properties*. *Physica B : Condensed Matter*, 338(1-4):58–60.
- [47] Nait-Ali, A. (2014). *Volumic method for the variational sum of a 2D discrete model*. *Comptes Rendus - Mécanique*.
- [48] Nait-ali, A. (2017). *Nonlocal modeling of a randomly distributed and aligned long-fiber composite material*. *Comptes Rendus - Mécanique*, 345(3):192–207.
- [49] Nait-Ali, A. (2018). *Stochastic homogenization of reinforced polymer with very small carbon inclusions*. *Comptes Rendus Mécanique*, 346(12):1192–1198.
- [50] Nait-Ali, A., Hémerly, S. et Gueguen, M. (2021). *Journal Pre-proofs How macrozone size and morphology influence yield in titanium alloys investigated using fast Fourier transform-based crystal plasticity simulations How macrozone size and morphology influence yield in titanium alloys investigated using*. *International Journal of Solids and Structures*.

- [51] Nait-Ali, A., Ousseynou, K.-D. et Castagnet, S. (2015). *Catching the time evolution of microstructure morphology from dynamic covariograms* Évolution temporelle de la morphologie de la microstructure à partir d'un covariogramme dynamiques. *C. R. Mécanique*, 343:301–306.
- [52] N'Tsouaglo, K. H., Milhet, X., Colin, J., Signor, L., Nait-Ali, A., Creus, J., Gueguen, M., Gadaud, P. et Legros, M. (2022). *Time-Resolved Evolution of the 3D Nanoporous Structure of Sintered Ag by X-Ray Nanotomography : Role of the Interface with a Copper Substrate*. *Advanced Engineering Materials*, 24(1): 2100583.
- [53] Ono, H., Nait-Ali, A., Kane Diallo, O., Benoit, G. et Castagnet, S. (2018). *Influence of pressure cycling on damage evolution in an unfilled EPDM exposed to high-pressure hydrogen*. *International Journal of Fracture*, 210(1-2).
- [54] Peerlings, R. H. J. (1999). *Enhanced damage modelling for fracture and fatigue*. Thèse de doctorat, Technische Universiteit Eindhoven.
- [55] Pham, K. (2010). *Construction et analyse de modèles d'endommagement à gradient*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
- [56] Pham, K., Amor, H., Marigo, J.-J. et Maurini, C. (2011). *Gradient damage models and their use to approximate brittle fracture*. *International Journal of Damage Mechanics*, 20(4):618–652.
- [57] Pham, K. et Marigo, J. J. (2010). *Approche variationnelle de l'endommagement : I. Les concepts fondamentaux*. *Comptes Rendus - Mécanique*, 338(4):191–198.
- [58] Pham, K. et Marigo, J.-J. (2013). *From the onset of damage to rupture : construction of responses with damage localization for a general class of gradient damage models*. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 25(2-4):147–171.
- [59] Suquet, P., Moulinec, H., Castelnau, O., Montagnat, M., Lahellec, N., Grennerat, F., Duval, P. et Brenner, R. (2012). *Multi-scale modeling of the mechanical behavior of polycrystalline ice under transient creep*. *Procedia IUTAM*, 3:76–90.
- [60] Torquato, S. (1982). *Random heterogeneous materials*. Springer, New York, USA.
- [61] Toupin, R. A. (1962). *Elastic materials with couple-stresses*. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 11(1):385–414.
- [62] Tran, T.-H., Monchiet, V. et Bonnet, G. (2012). *A micromechanics-based approach for the derivation of constitutive elastic coefficients of strain-gradient media*. *International Journal of Solids and Structures*, 49(5):783–792.
- [Yvonnet et al.] Yvonnet, J., Nguyen, T. T., Xia, L., Bornert, M. et Chateau, C. *la méthode de champ de phase Motivations and context : prediction of 3D microcracking in heterogeneous materials*. (1).

- [64] Zecevic, M. et Lebensohn, R. A. (2020). *New robust self-consistent homogenization schemes of elasto-viscoplastic polycrystals.*
- [65] Zheng, Y., Tan, Y., Zhou, C., Chen, G., Li, J., Liu, Y., Liao, B. et Zhang, G. (2020). *A review on effect of hydrogen on rubber seals used in the high-pressure hydrogen infrastructure.* International Journal of Hydrogen Energy, (July).

