

Mardi 27 septembre

Simulation des échanges conducto-radiatifs au sein de milieux hétérogènes et semi-transparents

Cyril Daoût^{1,2}, Denis Rochais¹, Olivier Rozenbaum²

¹ CEA, DAM, Le Ripault, F-37260 Monts, France

² CNRS, Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation (CEMHTI), UPR 3079, 1D Avenue de la Recherche Scientifique, 45071, Orléans, Cedex 2, France

Depuis plusieurs décennies, de nombreuses études ont été dédiées aux performances thermiques de microstructures poreuses et notamment dans le cadre d'applications à hautes températures. Cependant, la compréhension et la prédiction des transferts thermiques au sein de ces matériaux restent parfois un défi. C'est particulièrement le cas lorsqu'on s'intéresse aux propriétés conducto-radiatives de matériaux comportant un domaine de semi-transparence. En effet, ces matériaux présentent des zones d'opacités dans une certaine plage spectrale (la conduction est alors prédominante) mais peuvent être semi-transparents voir complètement transparents sur une autre (les transferts radiatifs deviennent ainsi majoritaires). Autrement dit, le comportement thermique de ces matériaux dépend fortement de la température et de la fréquence du rayonnement. Ainsi, une simulation conducto-radiative « classique » pour laquelle les propriétés radiatives des matériaux sont considérées constantes en fréquence (hypothèse des milieux gris) et en température ne permet pas une prédiction fiable des échanges thermiques au sein de tels matériaux.

Pour illustrer ce point, le comportement thermique d'un milieu fibreux (fibre Aluminosilicate) imprégné d'un aérogel de silice et soumis à un flux de chaleur a été étudié. L'expérience mise en place a permis de chauffer la face avant d'une plaque de ce matériau jusqu'à trois niveaux de température différents (300, 500 et 800°C) en 200 s, de maintenir ces niveaux pendant 600 s et de mesurer l'évolution de la température en face arrière au cours du temps. Sur les trois thermogrammes ainsi obtenus, une brusque élévation de la température a été observée et ceci à des instants différents suivant le niveau de température appliqué. Ce comportement ne peut être représenté par un modèle de milieu gris. En effet, ce phénomène est étroitement lié aux propriétés radiatives de l'aérogel sur les gammes spectrales où les échanges radiatifs s'opèrent [1].

Le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives développe un code (THERMIVOX) pour évaluer les échanges conducto-radiatifs au sein de microstructures 3D voxelisées [2][3]. Chaque voxel représente alors une unique phase (fluide ou solide) homogène et non-diffusante. L'équation de la chaleur est calculée dans chacun de ces voxels par un schéma de différences finies où la contribution radiative est incluse comme une source volumique. Cette dernière est calculée par résolution de l'Équation du Transfert Radiatif (ETR) dans chacun des voxels.

Au cours de ces travaux, ce code de calcul a été modifié pour prendre en compte la dépendance spectrale des échanges radiatifs pour pouvoir simuler correctement l'évolution temporelle de la température de milieux semi-transparents comme celui présenté précédemment. Pour ce faire, le domaine spectral est discrétisé en un nombre de bandes spectrales N et l'ETR est résolue pour chaque bande avec les propriétés radiatives spectrales associées. Les flux radiatifs extraits de ces calculs sont alors sommés et intégrés dans l'équation de la chaleur.

Grâce à une méthodologie d'identification développée précédemment (en cours de publication), les propriétés radiatives spectrales du matériau imprégné d'aérogel ont pu être identifiées et des simulations conducto-radiatives grises et spectrales ont été réalisées avec THERMIVOX. Les simulations spectrales ont alors permis de reproduire le comportement thermique observé expérimentalement, ce qui n'aurait pas été possible avec une simulation grise. Ces résultats confirment donc la pertinence de réaliser des simulations spectrales plutôt que grises pour caractériser le comportement thermique de matériaux semi-transparents à haute température.

Références

- [1] F. Enguehard, *"Multi-scale modeling of radiation heat transfer through nanoporous superinsulating materials"*, International Journal of Thermophysics, vol. 28, n°5, 2007.
- [2] M. Niezgoda, D. Rochais, F. Enguehard, B. Rousseau, P. Echegut, *"Modeling heat transfer within porous multiconstituent materials"*, J. Phys. Conf. 369., 2012.
- [3] C. Heisel, C. Caliot, T. Chartier, S. Chupin, P. David, D. Rochais, *"Digital design and 3D printing of innovative SiC architectures for high temperature volumetric solar receivers"*, Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 232, 2021

Modélisation du transfert thermique couplé conducto-radiatif dans les milieux hétérogènes par des techniques stochastiques

Loïc Seyer¹, Franck Enguehard², Denis Rochais¹

¹ CEA, DAM, Le Ripault, F-37260 Monts, France

² Institut Pprime, CNRS, Université de Poitiers, ISAE-ENSMA, F-86962 Futuroscope Chasseneuil, France

Les matériaux céramiques poreux ont démontré ces dernières décennies leurs excellentes propriétés thermiques. Portés à haute température, ils sont utiles pour l'aérospatial ou les nouvelles technologies pour l'énergie [1, 2, 3]. Afin de les caractériser, ou d'orienter leur conception longue et coûteuse, il est nécessaire d'établir de nouveaux modèles numériques résolvant le transfert couplé conducto-radiatif, instationnaire, au sein de structures 3D complexes, semi-transparentes et hétérogènes.

A l'heure actuelle, il est très compliqué voire impossible de concevoir de tels modèles par des méthodes classiques déterministes, principalement à cause du besoin de mémoire vive important, et de l'étape de maillage souvent difficile [4]. Pour éviter ces difficultés, on cherche à développer un nouveau modèle purement stochastique adapté aux structures voxélisées. Le choix de la structure voxélisée permet de travailler directement à partir de tomographies (par rayons X, FIB-MEB) de matériaux réels, sans remaillage nécessaire, mais en contrepartie avec une discrétisation imposée par la taille du voxel de la tomographie. Enfin, le choix d'une méthode stochastique contourne la difficulté du besoin en mémoire vive, au détriment de la vitesse de calcul si l'on veut atteindre le régime asymptotique. Dans ce nouveau modèle, on couple la méthode de lancer de rayons pour simuler le transfert radiatif développée dans la thèse de Y. Dauvois [5], à celle des marcheurs Browniens pour simuler le transfert par conduction récemment approfondie dans la thèse de V. Gonneau [6].

Références

- [1] A. Kribus, Y. Gray, M. Grijnevich, G. Mittelman, S. Mey-Cloutier, C. Cal, *"The promise and challenge of solar volumetric absorbers"*, Sol. Energy **110** (2014), 463-481.
- [2] A. Ortona, D. Trimis, V. Uhlig, R. Eder, S. Gianella, P. Fino, G. D'Amico, E. Boulet, C. Chazelas, T. Grämer, E. Cresci, J.G. Wüning, H. Altena, F. Beneke, M. Debier, *"SiSiC heat exchangers for recuperative gas burners with highly structured surface elements"*, Int. J. Appl. Ceram. Technol. **11** (2014), 927-937.
- [3] L. Ferrari, M. Barbato, B. Esser, I. Petkov, M. Kuhn, S. Gianella, J. Barcena, C. Jimenez, D. Francesconi, V. Liedtke, A. Ortona, *"Sandwich structured ceramic matrix composites with periodic cellular ceramic cores: an active cooled thermal protection for space vehicles"*, Compos. Struct. **154** (2016), 61-68.
- [4] M.A. Badri, P. Jolivet, B. Rousseau, Y. Favennec, *"High performance computation of radiative transfer equation using the finite element method"*, J. Comput. Phys. **360** (2018), 74-92.
- [5] Y. Dauvois, « *Modélisation du transfert thermique couplé conductif et radiatif au sein de milieux fibreux portés à haute température, manuscrit de thèse, Université Paris-Saclay* » (France) (2016).
- [6] V. Gonneau, « *Modélisation du transfert thermique par marcheurs Browniens dans des milieux hétérogènes* », Université Paris-Saclay (France) (2020)

Simultaneous measurement of Seebeck coefficient and thermal conductivity of mesoporous silicon and graphenized mesoporous silicon

S. Nar^{1-2*}, A. Stolz¹, D. Machon², A. Boucherif², N. Semmer¹

¹GREMI, UMR 7344, Université d'Orléans, CNRS, Orléans, France

²Laboratoire Nanotechnologies Nanosystèmes (LN2) - CNRS UMI-3463, Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique (3IT), Université de Sherbrooke, Canada
sibel.nar@univ-orleans.fr and sibel.nar@usherbrooke.ca

Mesoporous silicon, obtained by electrochemical etching, from an electrolytic solution of HF and CH₃CH₂OH, is a promising material for tuning the thermoelectric properties [1] [2] (Seebeck coefficient, thermal and electrical conductivity) in order to maximize the figure of merit, ZT. Depending on the thickness of mesoporous silicon (named membrane in the present work with thickness varying from 30 μm until 160 μm) the properties of the membrane will be different. A graphene insertion is also made to increase the electrical conductivity of this type of material, which decrease drastically by the creation of a porous layer. [3]

Thanks to a homemade device (ZT-meter), it is possible to measure directly the in-depth Seebeck coefficient as well as the thermal conductivity. In the case of this work, properties of mesoporous silicon (MePSi) and graphenized mesoporous silicon (MePSi-Gr) have been evaluated with $S(\text{MePSi}) = 700 \pm 20 \mu\text{V/K}$ and $S(\text{MePSi-Gr}) = 100 \pm 20 \mu\text{V/K}$ for the same porous thickness of 0.135 mm. We have in GREMI, a ZT-meter device for evaluation in-plane properties of MePSi. The aim would be to evaluate if the in-depth properties can be found by measuring the in-plane properties at different cross-sections and to compare Seebeck coefficient values.

Références

- [1] G Gesele et al, J. Phys. D: Appl. Phys. (1997) 30:2911.
- [2] K. Valalaki et al, Nanoscale Research Letters (2016) 11 :201.
- [3] M. Khardani, Thin Solid Films, (2006) 495 :243-245.

Initiation d'une composition explosive à base de HMX soumise à un impact de basse énergie

David Drouet et Didier Picart

CEA DAM le Ripault, F-37260 Monts, France

L'étude numérique de la chaleur générée par la plasticité pendant l'impact d'un explosif est détaillée. Un modèle de plasticité cristalline a été implémenté dans un solveur explicite aux éléments finis. Le cisaillement de polycristaux est alors simulé. L'utilisation des données de la littérature sur le comportement anisotrope du HMX permet de reproduire la courbe contrainte-déformation moyenne observée lors d'expériences triaxiales quasi-statiques menées à un confinement de 0,8 GPa. Les résultats de quinze simulations ont été utilisés pour relier la température locale maximale à la dissipation plastique macroscopique. Cette règle de localisation permet ensuite de prédire l'initiation de l'explosif lors d'impacts à faible vitesse.

La corrélation d'images volumiques : un outil puissant de mesure et de comparaison essais / calculs 4Ds

François HILD et l'OR Eikologie

Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay (Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS)

Le développement des matériaux numériques et l'évaluation de leur crédibilité nécessite des démarches de validation à partir d'essais mécaniques. Parmi ces derniers, les essais dits « in situ » (p.ex. dans un tomographe à rayons X) sont une voie possible d'investigation. L'obtention de données 4D (tridimensionnelles en espace et unidimensionnelles en temps) devient alors une opportunité pour une meilleure caractérisation des mécanismes de déformation et leur analyse quantitative.

L'exposé discutera de deux exemples pour lesquels des liens renforcés ont été construits entre mesures de champs de déplacement par corrélation d'images volumiques et modélisations numériques multiéchelles. Le premier concerne la quantification des mécanismes d'endommagement d'un mortier sollicité en flexion 3-points et la modélisation de deux d'entre eux par un modèle de zone cohésive. Le second traite d'un essai de traction d'une fonte à graphite sphéroïdal et l'identification d'une loi plastique de la ferrite.

Mercredi 28 septembre, matin

Modélisation des composites à matrice céramique : jumeaux numériques et approches multiéchelles

Guillaume Couégnat

Université de Bordeaux, CNRS, Laboratoire des Composites ThermoStructuraux, UMR 5801, 33600, Pessac, France

Les composites à matrice céramique (CMC) présentent des propriétés thermomécaniques remarquables, même à haute température. Ces propriétés en font des matériaux de choix pour être utilisés dans les parties chaudes des moteurs d'avion par exemple. Cependant, leur architecture interne complexe et leur variabilité inhérente posent de nombreux défis s'agissant de leur modélisation et de leur simulation. La prédiction de leur comportement thermomécanique, endommageable, nécessite une bonne connaissance de leur structure interne et requiert des modèles réalistes de leur architecture à l'échelle mésoscopique. Nous proposons ici un cadre de modélisation basée image qui fait le lien, via l'échelle méso, entre l'échelle micro, celles des constituants élémentaires, et l'échelle macro de pièces en CMC. Dans un premier temps, des modèles réalistes sont construits aux échelles micro et méso en utilisant des informations basées sur l'image : à la micro-échelle, des cellules représentatives sont générées à partir de micrographies de fils ; à la méso-échelle, des jumeaux numériques de la préforme tissée sont dérivés de micro-tomographies aux rayons X grâce à une procédure originale de segmentation variationnelle.

Les mécanismes élémentaires d'endommagement sont ensuite introduits à l'échelle micro et des tests virtuels sont effectués pour en déduire le comportement effectif des fils, en y intégrant l'effet de leur variabilité. Un pont micro-méso stochastique est construit à partir de cette base d'essais virtuels et utilisé pour effectuer des simulations non-linéaires à la méso-échelle en utilisant les jumeaux numériques préalablement construits. Les résultats ont été validés grâce à des essais in-situ sur mini-éprouvettes et des essais de flexion sur des jonctions CMC tissées. Ils montrent en particulier que la variabilité intra-fil influence manifestement l'initiation des premiers endommagements, mais qu'en fin de compte, la localisation des dommages macro est principalement guidée par l'architecture méso du composite.

Enfin, pour surmonter les ressources de calcul significatives requises par les simulations directes à méso-échelle, nous proposons également une approche de filtrage méso-macro où le comportement des macro-éléments est dérivé de la connaissance du jumeau numérique sous-jacent et calculé localement en utilisant une approximation de type stratifié équivalent. Cette description simplifiée permet de diminuer considérablement la taille du modèle, mais se compare favorablement aux simulations directes à l'échelle méso tant que la taille du filtrage reste similaire à celle d'un fil.

Caractérisation et modélisation de l'interface fibre/matrice

Bénédicte Reine, Ludovic Barrière, Stéphanie Miot

IRT Saint Exupéry, B612, 3 rue Tarfaya, 31400 Toulouse
benedicte.reine@irt-saintexupery.com, ludovic.barriere@irt-saintexupery.com,
stephanie.miot@irt-saintexupery.com

Résumé

Ces travaux portent sur la définition d'une méthodologie permettant de développer un lien entre la caractérisation et la modélisation des propriétés mécaniques d'un composite en tenant compte de la microstructure du matériau et des propriétés des constituants. L'objectif final étant d'intégrer des modèles micromécaniques sur une plateforme numérique existante afin de pouvoir coupler des modèles de comportements matériaux à différentes échelles.

Introduction

Cette étude a pour objectif de développer un lien essais/calculs permettant de lier les propriétés mécaniques d'un composite avec la microstructure du matériau et les propriétés de ses constituants. La première étape a donc été d'identifier les essais qui peuvent être utilisés aux différentes échelles (méso, macro, micro), et d'évaluer leur maturité et leur représentativité (Figure 1). Les modèles développés dans cette étude seront intégrés dans la plateforme VIMS (Virtual testing Integration platform for decision Making Support). Cette plateforme permet la propagation des incertitudes à une échelle macro en s'appuyant sur des modèles de comportement non-linéaires. Un focus sera fait ici sur l'influence de l'interface fibre/matrice. En effet, cette interface joue un rôle important dans le comportement mécanique du composite.

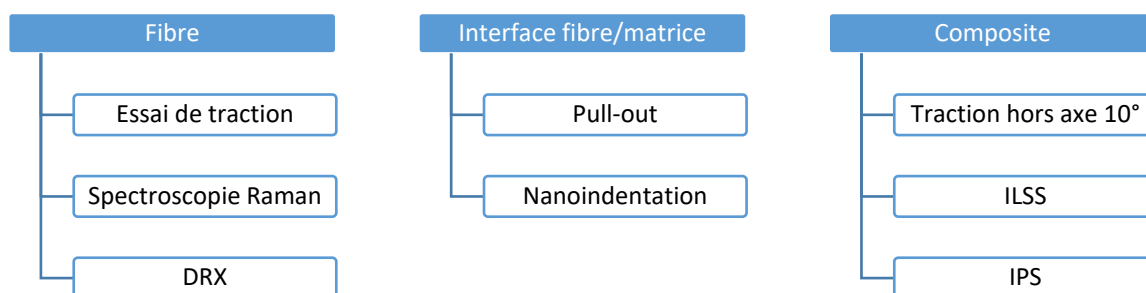


Figure 1 – Identification des essais en fonction des différentes échelles matériau

Expérimental

Les moyens FAVIMAT+ et FIMABOND de TexTechno ont été utilisés pour fabriquer et tester les échantillons. Les essais ont été effectués sur le couple matériau RTM6 / IM7-12K-GP. La Figure 2 représente la courbe idéale d'un essai de pull-out avec les paramètres caractéristiques.

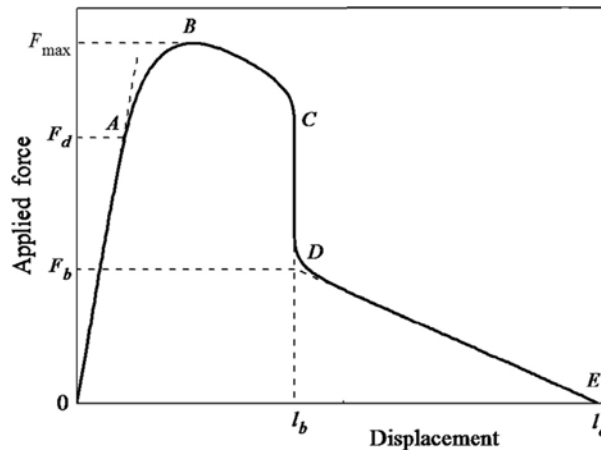


Figure 2 Courbe idéale pull-out [1]

Le Tableau 1 résume les résultats d'essais obtenus pour déterminer la résistance interfaciale apparente de cisaillement τ_{app} , la résistance interfaciale locale de cisaillement τ_d , la contrainte de friction interfaciale τ_f et le taux de restitution d'énergie critique, G_{ic} . Les méthodes pour déterminer ces paramètres ainsi que leur description sont discutées dans la littérature [1].

	τ_{app} (MPa)	τ_d (MPa)	τ_f (MPa)	G_{ic} (J/m ²)
Mean	107.98	88.47	17.55	22.03
STD	26.52	18.43	10.48	11.33
RSD (%)	24.56	20.83	59.73	51.43

Tableau 1 – Résultats après post-traitement

Ces résultats mettent en évidence la variabilité de cet essai et l'importance de la prise en compte des incertitudes dans les modèles. Il n'a pas été trouvé de résultats à comparer sur un couple fibre de carbone/résine époxy dans la littérature.

Modélisation

L'essai de pull-out est complexe et un certain nombre de paramètres sont à prendre en compte pour caractériser l'interface fibre/matrice : la nature des constituants, le diamètre de la fibre, la profondeur d'enrobage, etc. La littérature présente des approches analytiques et numériques pour simuler le comportement mécanique à l'interface [2]. Deux types de modèles peuvent être utilisés : a) un modèle 3D simple avec un modèle d'endommagement cohésif pour étudier l'influence de l'interface/ensimage sur la fibre b) un modèle 2D axisymétrique pour faire une analyse de sensibilité sur la raideur de l'interface, le coefficient de friction, la distribution de la contrainte en cisaillement à l'interface, etc. Les modèles numériques trouvés ne considèrent que des matériaux de type fibre de verre/thermodurcissable ou fibre de carbone/thermoplastique. Un travail est donc à faire pour développer un modèle prenant en compte nos spécificités matériaux en s'appuyant sur les données expérimentales obtenues. De plus, le développement de tels modèles permettra d'approfondir la compréhension de l'influence de l'interface fibre/matrice sur les propriétés mécaniques. L'objectif serait d'identifier les variations de propriétés à l'échelle macro à partir de modèles micro prenant en compte les variabilités de microstructure et de propriétés des constituants.

Conclusions / Perspectives

Cette étude a permis d'identifier les paramètres d'entrée nécessaires aux différents essais identifiés Figure 1, ainsi que les données de sorties et leur variabilité associée. Dans le cas des essais de pull-out, la partie modélisation reste encore à développer. L'objectif à moyen terme est de pouvoir appliquer cette méthodologie sur des fibres de différents types (naturelles, biosourcées, etc). La Figure 3 montre la variabilité de diamètre, d'état de surface d'une fibre de lin. La grande variabilité de ces résultats

associée à la variabilité potentielle de la microstructure du matériau, met en avant l'importance de développer des modèles la prenant en compte.

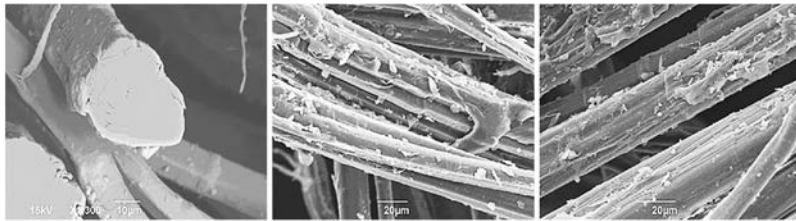


Figure 3 – Exemple de fibre de lin [3]

Références

- [1] S. Zhandarov, E. Mäder, C. Scheffler, G. Kalinka, C. Poitzsch et S. Fliescher, «Investigation of interfacial strength parameters in polymer matrix composites: Compatibility and reproductibility,» *Advanced Industrial and Engineering Polymer Research*, vol. 1, pp. 82-92, 2018.
- [2] D. Singh, A. Vaidya, V. Thomas, M. Theodore, S. Kore et U. Vaidya, «Finite Element Modelling of Fiber-Matrix Interface in Polymer Composites,» *Journal of Composites Science*, vol. 58, 2020.
- [3] A. Amiri, C. A. Ulven et S. Huo, «Effect of chemical treatment of flax fiber and resin manipulation on service life of their composites using time-temperature superposition,» *Polymers*, vol. 7, 2015.

Simulation en Volume Élémentaire Représentatif : des Mathématiques au Numérique

Marc Josien

CEA, Des, Iresne, DEC, Cadarache F-13018 Saint-Paul-lez-Durance, France

La méthode des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER) a connu un essor considérable lors des dernières décennies [4], accompagnée par l'accroissement de la puissance de calcul informatique et le développement du Calcul Haute Performance. Parallèlement, la compréhension mathématique des matériaux à microstructures aléatoires a progressé avec la naissance vers 2015 de la théorie de l'homogénéisation stochastique quantitative [3, 1].

Dans cette présentation, nous proposerons un éclairage mathématique sur la notion de VER, éclairage qui permet de quantifier les erreurs aléatoires et systématiques de la méthode du VER (on étudiera un modèle simple de thermique linéaire). Dans certains cas spécifiques (champs gaussiens), on peut donner une expression asymptotique de ces erreurs [2]. Nous illustrerons ces résultats théoriques par des calculs numériques [5].

Au cours de la présentation, nous introduirons l'application Mérope de la plate-forme PLEIADES (CEA). Celle-ci permet de construire et discrétiser des matériaux numériques, afin de les employer ensuite dans des calculs thermomécaniques. Cette application est typiquement employée pour étudier les combustibles des réacteurs nucléaires, lesquels présentent de fortes hétérogénéités à l'échelle du μm . Nous évoquerons aussi des techniques numériques récentes telles que les voxels composites [6], et leur utilité en particulier pour des matériaux à contraste élevé.

Références

- [1] S. Armstrong, T. Kuusi, and J.-C. Mourrat. *Quantitative stochastic homogenization and large-scale regularity*, Springer, Cham, 2019.
- [2] N. Clozeau, M. Josien, F. Otto, and Q. Xu. submitted.
- [3] A. Gloria, S. Neukamm, and F. Otto. *Invent. Math.*, 199(2) :455–515, 2015.
- [4] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(13–14) :3647–3679, 2003.
- [5] M. Schneider, M. Josien, and F. Otto. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 158 :104652, 2022.
- [6] M. Schneider. *Acta Mechanica*, 232(6) :2051–2100, 2021.

Extension des solveurs FFT aux méthodes multi-grilles locales

L. Gélébart et N.B. NKoumbou-Kaptchouang

Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches Métallurgiques
Appliquées, 91191, Gif-sur-Yvette, France

Très performants, les « solveurs FFT » sont de plus en plus utilisés pour simuler le comportement mécanique de matériaux hétérogènes. Ces solveurs prennent en compte un volume élémentaire parallélépipédique discrétisé de manière régulière sous la forme d'une image 3D. La résolution repose sur l'utilisation d'un opérateur de Green discret évalué dans l'espace de Fourier sous l'hypothèse de Conditions aux Limites (CL) périodiques. Hormis ces deux conditions restrictives (discrétisation régulière et conditions aux limites périodiques), la méthode est très générale et s'applique pour des comportements linéaires ou non-linéaires, sous l'hypothèse des petites perturbations ou non (i.e. grandes transformations). De plus, l'implémentation massivement parallèle de cette méthode permet de repousser les limites (en termes de taille et/ou de temps de calcul) atteintes par les codes de calcul par éléments finis standards (i.e. généralistes). Une telle implémentation est mise à disposition de la communauté au travers du code AMITEX_FFTP [1].

Cependant, la nécessité d'un raffinement constant imposé par l'utilisation d'un solveur FFT périodique peut conduire à des simulations très lourdes dans le cas de simulations avec des tailles d'hétérogénéités très différentes. En effet, la finesse du raffinement est alors imposée par la plus petite hétérogénéité présente dans la cellule. Afin de contourner cette contrainte, on se propose de mettre en place une méthode multi-grilles locale dédiée aux « solveurs FFT » [2]. On considère ici une discrétisation grossière du domaine complet (problème global) et une grille fine décrivant un sous-volume contenant des hétérogénéités de petite taille (problème local). En s'appuyant sur une modification d'un solveur FFT standard [3] pour imposer des Conditions aux Limites (CL) en déplacements (CL de types Dirichlet) où en forces (CL type Neumann), un couplage est établi entre la résolution du problème global et la résolution du problème locale : les CL en forces ou en déplacements sur la grille locale sont imposées par prolongation de la solution globale grossière, puis la solution globale grossière est améliorée par la prise en compte d'une correction, le résidu local [4], évalué à partir d'une restriction de la solution du problème local fin.

Enfin, après avoir mis en place les méthodes et différents tests de validation dans l'environnement « Matlab », les premiers développements visant à introduire ces travaux au sein du code massivement parallèle AMITEX_FFTP seront présentés.

Références

[1] Lionel Gélébart. <https://amitexfftp.github.io/amitex/index.html>. 2022.

[2] Noé Brice Nkoumbou Kaptchouang and Lionel Gélébart. Multiscale coupling of fft-based simulations with the ldc approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 394:114921, 2022.

[3] Lionel Gélébart. A modified fft-based solver for the mechanical simulation of heterogeneous materials with dirichlet boundary conditions. *Comptes Rendus. Mécanique*, 348(8-9):693–704, 2020.

[4] W. Hackbusch. Local Defect Correction Method and Domain Decomposition Techniques. In Klaus Böhmer and Hans J. Stetter, editors, *Defect Correction Methods: Theory and Applications*, Computing Supplementum, pages 89–113. Springer, Vienna, 1984.

Caractérisation et simulation de microstructures de céramiques d' UO_2 présentant un réseau de porosité filamentaire

Léo Moutin^a, Joane Meynard^a, Renaud Masson^a, Vincent Bouineau^a, Christelle Duguay^a, Laurent Fayette^a, Frédéric Adenot^a et Michel Bornert^b

^a CEA, Des, Iresne, DEC, Cadarache F-13018 Saint-Paul-lez-Durance, France

^b Laboratoire Navier, École des ponts, Univ. Gustave Eiffel, CNRS, 6-8 avenue Blaise Pascal, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée Cedex

Les matériaux étudiés ici sont des céramiques de dioxyde d'uranium (UO_2) obtenues par frittage de granulés de poudre compactés. Les céramiques d'intérêt présentent un réseau de porosité très développé qui se caractérise par une porosité fine appelée "porosité filamentaire". Des premiers travaux ont été menés pour caractériser cette porosité, il a notamment été montré dans Meynard (2019) qu'elle était localisée à l'interconnexion entre les anciens granulés, groupements de grains cristallins. Un modèle basé sur des simulations par champ complet avec la méthode FFT (Fast Fourier Transform), une méthode alternative aux éléments finis, a été développé dans Meynard et al. (2022) pour estimer les propriétés effectives d'un solide présentant un réseau de porosités situées aux interconnexions entre les anciens granulés. Ces simulations sont réalisées sur des microstructures virtuelles générées à l'aide d'une méthode également introduite dans Meynard et al. (2022).

Nous présentons ici un processus d'optimisation de cette méthode de génération qui s'appuie sur la caractérisation de céramiques de référence à partir d'images de microscopie optique traitées pour générer des microstructures virtuelles représentatives qui émulent les microstructures des céramiques étudiées. Quatre indicateurs ont été définis pour caractériser le réseau de porosité des céramiques de référence (densité du réseau poreux, répartition spatiale ou encore dimension des pores) et pour qualifier la représentativité des microstructures virtuelles générées.

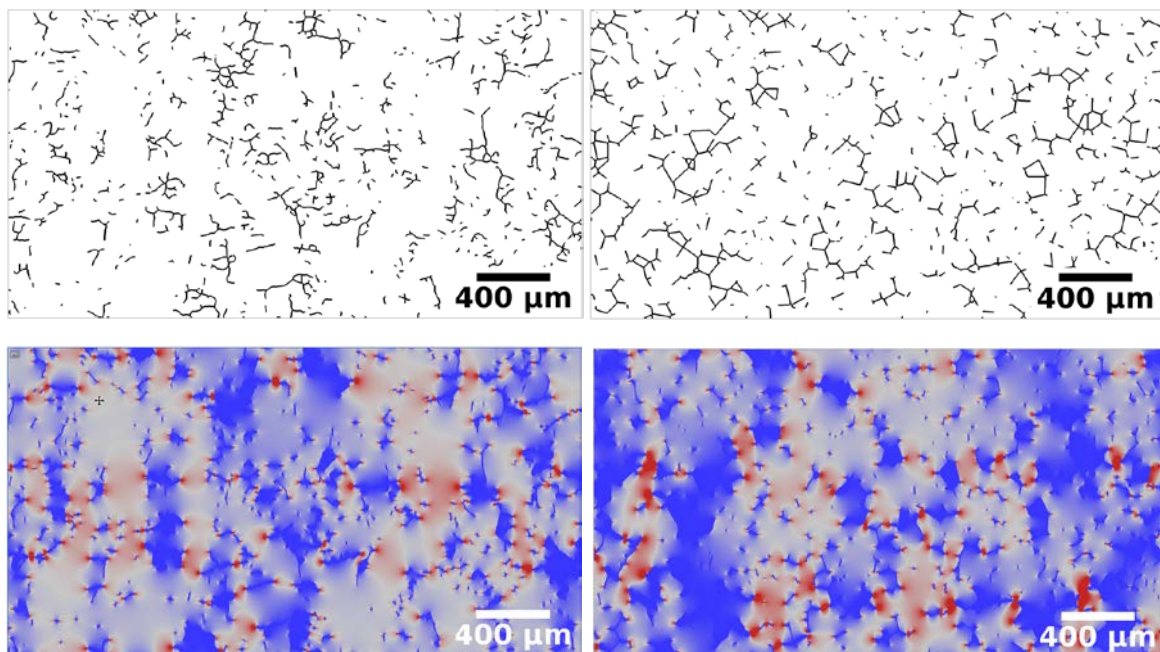


Figure 1: Zoom sur les images squelettisées d'une céramique de référence (gauche) et de la microstructure virtuelle associée à cette céramique (droite) ainsi que les champs de flux thermique obtenus sur ces mêmes microstructures. L'échelle de couleur va du bleu lorsque le flux normalisé est nul au rouge lorsqu'il est égal à 3.

Nous proposons également une méthode originale pour valider la capacité des microstructures virtuelles à émuler celles des céramiques de référence. Le principe est de réaliser des simulations FFT

2D sur des coupes transverses des microstructures virtuelles ainsi que sur les images de microscopie optique traitées des céramiques étudiées afin de comparer leur comportement thermique 2D.

Cette démarche de comparaison des microstructures virtuelles à des céramiques de référence pour calibrer des paramètres de la méthode de génération avait déjà fait l'objet d'une première étude dont l'objectif était d'évaluer l'intérêt de contrôler la distribution de taille des granules. Cette étude est présentée dans Moutin et al. (2022).

Références

- [1] J. Meynard. « Influence de la taille, de la morphologie et de la distribution spatiale des pores sur la conductivité thermique de céramiques UO₂ ». Manuscrit de thèse, 2019.
- [2] J. Meynard, M. Ibrahim, A. Monnier, M. Bornert, E. Castelier, C. Duguay, M. Garajeu, and R. Masson. Effective properties of an isotropic solid weakened by micro-cracks located at inter-granular boundaries. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 158:104647, January 2022. doi: 10.1016/j.jmps.2021.104647. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03379552>.
- [3] L. Moutin, R. Masson, C. Duguay, M. Josien, M. Bornert, V. Bouineau, L. Fayette, and F. Adenot. Conductivité thermique d'une céramique affectée par un réseau de fissures localisées aux joints de granulats : simulations 2D de l'effet d'une distribution bimodale de taille de granulats. 30e Congrès Français de Thermique, May 2022. doi: <https://doi.org/10.25855/SFT2022-113>. URL <https://www.sft.asso.fr/DOEditions/CFT2022/Abstracts/p113.html>. Abstract.

Mercredi 28 septembre, après-midi

Quel apport de l'IA dans l'obtention et le traitement des données expérimentales ?

Emmanuelle Abisset-Chavanne

I2M, ENSAM Paris

Dans cet exposé sera tout d'abord abordé la question de la génération de données massives que ce soit dans les laboratoires de recherche ou dans l'industrie. Une illustration sera proposée via la tomographie multi-spectrale développée pour obtenir une cartographie des matériaux présents dans les pièces et les systèmes. Puis, un rapide retour sur l'IA, ses définitions et surtout ses spécificités dans son utilisation sera proposé. En particulier, l'accent sera mis sur la nécessité de piloter l'utilisation de l'IA par la finalité afin de sélectionner les algorithmes les plus pertinents pour atteindre l'objectif. Différents exemples d'utilisation de l'IA pour le traitement de ces données massives seront ensuite présentés dans le cas de l'identification inverses de propriétés ou de la détection de défauts, permettant d'aborder la question de la pertinence de ces outils comparés aux méthodes plus « physiques ».

Dans un second temps, l'apport de l'IA dans la génération des données pertinentes sera abordé, non pas par les algorithmes d'automatisation et/ou d'apprentissage, mais par l'approche « finalité ». Ainsi, une réflexion autour du pilotage de la mesure par la finalité sera proposée pour alléger les contraintes de stockage et de traitement.

Approches originales pour exploiter efficacement des images CT, MEB ou TEM complexes

Joseph Baptista et Laurent Bernard

Reactiv'IP, 163 cours Berriat, 38000 Grenoble France

Cet exposé présentera différents algorithmes originaux mis à disposition dans la librairie IPSDK pour exploiter au mieux différents type d'images. Que ce soit en Microscopie optique, électronique ou en Micro-tomographie, toute la chaine de traitement est concernée. Nous montrerons qu'il est possible d'intervenir directement sur les radios RX pour supprimer des artefacts ou réhausser des contrastes, mais également au niveau de la segmentation à l'aide d'outils basés sur du machine learning, ou encore en post-traitement, pour séparer efficacement des objets de formes et de tailles différentes, le tout avec des algorithmes extrêmement rapides, capable de digérer des volumes importants de données.

Analyse 3D par tomographie électronique : reconstruction et segmentation de nanobulles d'hélium-3 dans du palladium vieilli sous tritium

B. Evin¹, E. Leroy², W. Baaziz³, M. Segard¹, V. Paul-Boncour², S. Challet¹,
A. Fabre¹, M. Latroche^{2†}, O. Ersen³

¹ CEA, DAM, Valduc, F-21120 Is-Sur-Tille, France

² M2I, ICMPE, CNRS, Université de Paris XII, UMR 7182, F-94320 Thiais, France

³ IPCMS, CNRS, Université de Strasbourg, UMR 7504, 67200 Strasbourg, France

Le stockage de l'hydrogène sur la base d'hydrures métalliques réversibles est particulièrement intéressant pour le tritium, l'isotope radioactif de l'hydrogène. Il assure la sécurité et la compacité du stockage. La décroissance radioactive du tritium s'accompagne de l'apparition d'hélium-3. Insoluble dans la plupart des métaux, il forme des nano-bulles dans la matrice métallique.

Ce phénomène, dit de vieillissement, modifie les propriétés physico-chimiques du tritium. Lorsque la concentration en hélium-3 dans le matériau atteint une valeur critique, l'hélium-3 est massivement relargué en phase gazeuse. La pression peut augmenter rapidement ce qui est dimensionnant pour le dispositif de stockage. Afin de garantir les performances de ce stockage, il est fondamental de comprendre et de pouvoir prédire l'évolution des nanobulles et des matériaux au cours du temps.

L'objectif de ce travail est de renforcer les modélisations du comportement de l'hélium-3 dans le tritium de palladium^{1,2}, déjà étudié auparavant. À cette fin, des données d'entrée et de recalage sont acquises expérimentalement sur des matériaux vieillis sous tritium pour perfectionner la modélisation du vieillissement^{3,4}.

Dans ce contexte, une analyse 3D à l'échelle nanométrique a été mise en place pour caractériser des nanobulles d'hélium-3 dans des poudres de palladium vieilles plusieurs années⁵. L'objectif de ces mesures est de déterminer les caractéristiques structurales et la distribution spatiale des nanobulles.

La tomographie électronique STEM (Scanning Transmission Electron Microscopy) est utilisée pour acquérir des séries d'images sur des nanobulles⁵. Une procédure pour le traitement des données de tomographie (alignement, reconstruction et segmentation) a été mise en place. La segmentation permet l'extraction des données structurales d'intérêt (diamètres, distances, coordonnées, volume) et inaccessibles par les techniques utilisées auparavant de type MET. Les valeurs obtenues sont cohérentes avec des mesures macroscopiques.

L'ensemble de ces données accroît significativement notre connaissance du comportement des nanobulles d'hélium-3. Ces mesures constituent de précieuses données d'entrée et de recalage pour la modélisation du phénomène de vieillissement dans son ensemble^{3,4}.

Références

1. Montheillet, F., Delplanche, D., Fabre, A., Munier, E. & Thiébaud, S. A mechanical analysis of metallic tritide aging by helium bubble growth. *Materials Science and Engineering: A* **494**, 407–415 (2008).
2. Segard, M., Fabre, A., Thiébaud, S. & Montheillet, F. Bubble nucleation process in a metal tritide modeled using a cellular automaton. *Journal of Nuclear Materials* **420**, 388–395 (2012).
3. Segard, M. *et al.* TEM observations on palladium samples aged up to 8 years under tritium. *arXiv:2106.01776 [cond-mat]* (2021).
4. Evin, B. *et al.* Investigation by STEM-EELS of helium density in nanobubbles formed in aged palladium tritides. *Journal of Alloys and Compounds* **878**, 160267 (2021).
5. Evin, B. *et al.* 3D analysis of helium-3 nanobubbles in palladium aged under tritium by electron tomography. *J. Phys. Chem. C* **125**, 25404 (2021).

Comportement mécanique d'un élastomère chargé de billes thermoplastiques creuses

D. Jalocho¹, M. Tignon¹, C. Perrot¹

¹ CEA CESTA, F-33116 Le Barp, France

dimitri.jalocho@cea.fr

Résumé

Pour faire face à certains défis industriels, des matériaux élastomères compressibles sont utilisés, pour leurs propriétés acoustique, hyper élastique ou encore viscoélastique. Une solution technologique permettant de rendre compressible un élastomère est d'inclure des sphères thermoplastiques creuses. L'objectif de cette étude est de déterminer, à l'aide de l'homogénéisation numérique, le comportement mécanique macroscopique de cet élastomère chargé en fonction de ses constituants. Pour ce faire, des microstructures numériques sont générées et modélisées par éléments finis. Après identification et attribution du comportement mécanique de la matrice élastomère et des sphères thermoplastiques, le comportement macroscopique du matériau est obtenu par essais numériques, en fonction de la fraction volumique de charge.

Contexte

Les matériaux élastomères compressibles sont utilisés dans l'industrie pour leurs propriétés mécaniques ou acoustiques. La compressibilité est obtenue par ajout de sphères thermoplastiques creuses dans une matrice élastomère. Afin de réduire le coût et le délai de conception d'un tel matériau, cette étude propose une démarche d'homogénéisation numérique afin de prédire le comportement mécanique macroscopique du composite en fonction des propriétés de la matrice, des sphères, et de leur fraction volumique.

Démarche

D'un côté, des microstructures numériques représentatives de l'élastomère compressible sont générées, sous forme de Volume Élémentaire Représentatif périodiques, en utilisant un algorithme de RSA [1]. La fraction volumique du vide interne des sphères thermoplastiques varie entre 0% (matrice seule) et 30% du volume total. Un maillage de ces microstructures, également périodique, est réalisé, grâce à l'outil NETGEN, et présenté en Figure 1 pour une fraction volumique de 30%. Les sphères sont modélisées collées à la matrice.

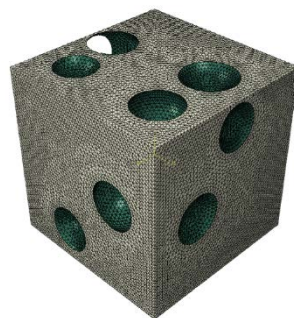


Figure 1 : Maillage de microstructure périodique présentant un taux de vide de 30%

De l'autre côté, les comportements mécaniques des constituants sont identifiés et modélisés. Le comportement des sphères thermoplastiques creuses est considéré comme élastique linéaire, présentant un module d'Young de l'ordre du Giga Pascal et un coefficient de Poisson égal à 0.3. Le comportement de la matrice est identifié à parti d'essais de traction, compression et cisaillement. Il en

résulte une modélisation hyper élastique incompressible par une loi polynomiale d'ordre 3, fonction uniquement du premier invariant I_1 , de la forme suivante [2], avec C_{10} et C_{30} les paramètres matériaux :

$$W(I_1) = C_{10}(I_1 - 3) + C_{30}(I_1 - 3)^3 \quad \text{Eq.1}$$

Résultats et discussions

Afin de valider la modélisation retenue, la Figure 2 présente la comparaison entre les essais numériques obtenus en traction sur la microstructure présentant un taux de vide de 20% et les mesures sur matériau réel. Le code éléments finis ABAQUS est utilisé. Le modèle numérique semble prédictif pour les premiers pourcents de déformation, mais présente une rigidité trop importante par la suite. L'hypothèse d'adhérence parfaite entre la matrice et les sphères n'est plus vérifiée à partir d'un certain seuil de déformation. Il paraît nécessaire de définir plus finement le comportement entre ces deux constituants.

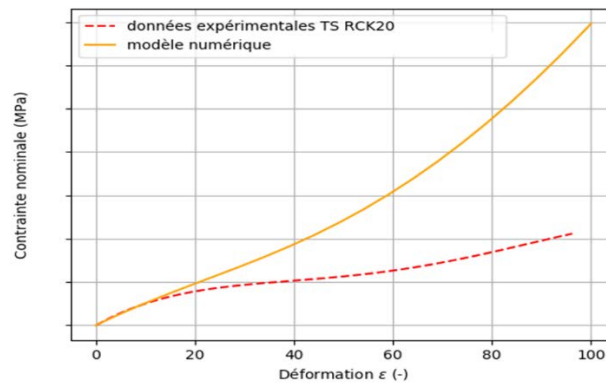


Figure 2 : Comparaison entre prédictions numériques et résultats expérimentaux d'un essai de traction sur le matériau présentant 20% de vide.

Il est proposé d'intégrer au modèle deux phénomènes physiques influent le comportement global du matériau. Il s'agit, d'une part, du décollement progressif entre la matrice et les charges, qui assouplit la rigidité macroscopique du matériau. Les surfaces cohésives sont utilisées pour modéliser cette interaction, Figure 3 (a). D'autre part, le flambage des sphères thermoplastiques est étudié, Figure 3 (b). L'enrichissement de la modélisation numérique requiert l'identification de paramètres supplémentaires, par méthode inverse. Malgré des difficultés de convergence causées par la complexité des modèles, le comportement macroscopique d'élastomères chargés à différentes fractions volumiques peut être obtenu numériquement, dans des plages restreintes.

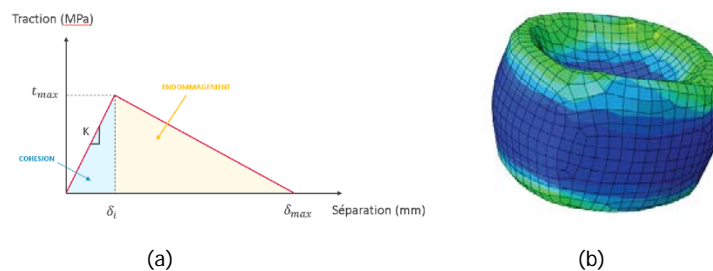


Figure 3 : Modélisation (a) de la décohésion progressive charge-matrice et (b) du flambage d'une coque.

Perspectives

Une méthode de génération de VERs périodiques est développée pour modéliser numériquement les élastomères chargés de sphères thermoplastiques creuses. Après identification et attribution du comportement mécanique de chacun de ses constituants, il paraît nécessaire d'enrichir la modélisation de l'interaction charge-matrice ainsi que le comportement des charges. Une méthode inverse est mise

en place pour identifier les différents paramètres nouvellement intégrés. Le comportement macroscopique des matériaux chargés est ainsi simulé. En perspectives, des alternatives de modélisation sont envisagées pour rendre les simulations plus robustes, comme l'utilisation d'éléments coques ou bien encore le schéma d'intégration Explicit.

Références

- [1] O. Lopez-Pamies et al. The nonlinear elastic response of suspensions of rigid inclusions in rubber:ii a simple explicit approximation for finite concentration suspensions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 61:19–37, 2013.
- [2] J. Simo and T. Hughes. *Computational Inelasticity*. Interdisciplinary Applied Mathematics, 1998

Modélisation basée images de la synthèse de Composites à Matrice Céramique par un procédé à gradient thermique

Gaëtan Mangeon, Bruno Dubroca, Gérard L. Vignoles

Université de Bordeaux, CNRS, Laboratoire des Composites ThermoStructuraux, UMR 5801, 33600, Pessac, France

Ce travail s'inscrit dans le cadre d'un projet visant à développer des tubes radiateurs à combustion pour le traitement thermique des aciers en sidérurgie secondaire. On propose de les faire en Composites à Matrice Céramique en lieu et place des alliages métalliques actuels ; pour y arriver, on développe un procédé d'Infiltration Chimique à partir de la phase Vapeur (CVI) à gradient thermique, grâce à un chauffage micro-ondes direct de la texture fibreuse à infiltrer. Ce procédé est efficace mais délicat à contrôler, d'où un besoin de modélisation numérique.

Le matériau à infiltrer contient plusieurs échelles de porosité à remplir par de la matrice (intra-fil, inter-fil) ; le procédé fait intervenir de l'électromagnétisme, du transfert de chaleur et du transfert de gaz ; enfin, l'architecture du milieu fibreux à infiltrer est complexe, variable et évolue au cours du temps. Par conséquent, l'approche de modélisation numérique présentée ici est multi-échelles, multi-physique et basée images.

On décrira comment les images ont été traitées pour obtenir des domaines de calcul et comment les problèmes physiques permettant d'effectuer la simulation du procédé ont été résolus dans ces domaines. Une question particulièrement importante a été celle du traitement de l'homogénéisation sur des milieux non périodiques, pour laquelle une méthode originale a été développée.

Les auteurs remercient le soutien de la Commission Européenne pour son soutien au projet H2020 « CEM-WAVE » sous le n°958170.

Smart laser-control system for decorating industrial luxury products

A. Capelle², K. Deva Arun Kumar¹, O. Shavdina², B. Aspe¹, M. Depardieu², A.-L. Thomann¹, N. Semmar¹

¹ GREMI - CNRS UMR 7344, Orléans, France

² Décor World Services (DWS), Orléans, France
nadjib.semmar@univ-orleans.fr

This project aims to master light-matter interaction between common lasers and products from the luxury industry which represent scientific interests, like wide-band gap materials and especially glass. A novative approach using machine learning algorithm and computer vision will be developed and implemented. Obtaining a specific and reproducible visual texture is very important in the luxury sector and finding the right set of parameters (laser beam and stage moving) to obtain the desired rendering is often a time-consuming process. It requires a good knowledge of the laser engraving system (engineer work), experience in searching for a desired rendering (artisanal work) which will satisfy customers expectations (artistic work).

In this scope, machine learning algorithm seems to be a convenient tool to link a set of visual characteristics with the agreement of a customer. The visual characteristics are obtained by a set of measurement techniques (characterisation system). The study of light-matter interaction mechanisms will be the link between laser beam characteristics and surface texture characteristics.

This final goal will be achieved by first replacing the customer by a characterization system composed of physical measurements combined with optimisation criteria. Moreover, the training of the algorithm requires a certain quantity of data for learning and testing. The characterization system will then be developed to generate the required quantity of data in a reasonable time.

A front-tracking method to simulate the microstructural evolution in polycrystalline materials during hot metal forming

Elie Delplace, Sebastian Florez, Marc Bernacki

*Mines-ParisTech, Université PSL, CEMEF - Centre de mise en forme des matériaux, CNRS
UMR 7635, CS 10207 rue Claude Daunesse, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France*

Several numerical methods have been developed for the last decades in order to simulate the microstructural evolution in polycrystalline materials during hot metal forming. These methods can be divided into in two types: the front-tracking ones, as vertex methods, and front-capturing methods, including multi phase-fields (MPF) and level-set (LS) approaches. The LS formalism enables to model the main physical mechanisms occurring during thermal and thermomechanical processes [1]. The management of the topological events, as the disappearance of a grain, is implicitly contained in the front-capturing methods, which explains their interest. However, the computational cost of these methods can become prohibitive as the number of grains increases, mainly in 3D. With the LS framework, such simulations can take few minutes for hundreds of grain in 2D, and up to several days (even weeks) for hundreds of thousands of grains in 3D. The reduction of the computational cost was the aim of the development of a new Lagrangian method named ToRealMotion (TRM) [2, 3, 4]. This method, inspired of the vertex method, represents the grains and the grain boundaries with unstructured FE mesh. Since the movement of the interfaces is derived by quantities and attributes defined at the grain boundary network, an interpolation of them is done using Natural Parametric Splines (NPS) in order to compute these quantities. This method also defines some operations on the mesh in order to handle the topological events occurring during the evolution of the microstructure. In context of grain growth or dynamic discontinuous recrystallization, and as illustrated in Figure 1, the method TRM has already shown an important decrease of the computational cost for a comparable accurateness. This new approach will be presented including recent enhancements.

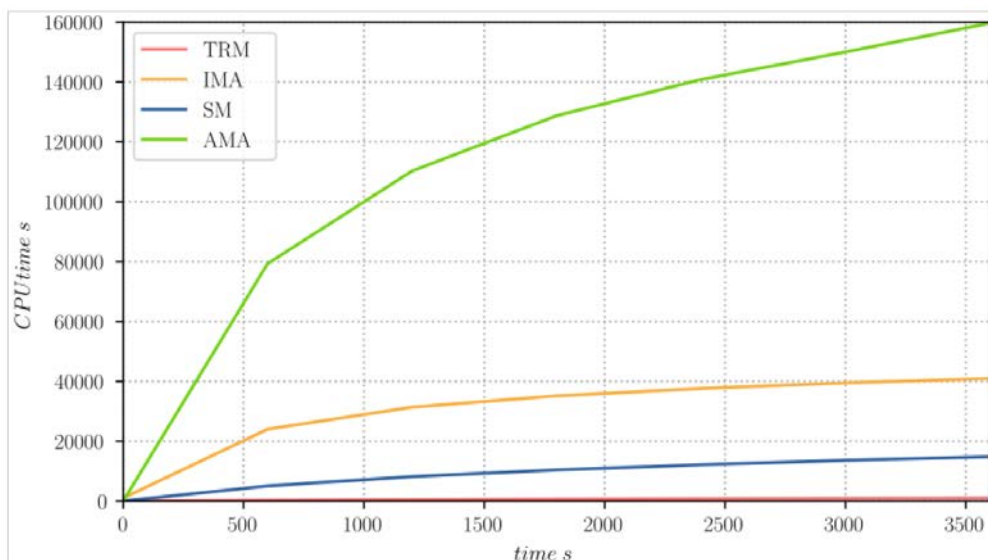


Figure 1: CPU Time used by TRM and 3 FE-LS method to simulate 10000 grains in 2D.

Références

- [1] M. Bernacki, Y. Chastel, T. Coupez, and R. E. Logé. Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials. *Scripta Materialia*, 58:1129–1132, 2008.
- [2] S. Florez, K. Alvarado, D. Pino Muñoz, and M. Bernacki. A novel highly efficient lagrangian model for massively multi-domain simulation applied to microstructural evolutions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 367, 2020.
- [3] S. Florez, J. Fausty, K. Alvarado, B. Murgas, and Marc Bernacki. A 2d front-tracking lagrangian model for the modeling of anisotropic grain growth. *Materials*, 14, 2021.
- [4] S. Florez, K. Alvarado, and M. Bernacki. A new front-tracking lagrangian model for the modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 29, 2021.

Jeudi 29 septembre, matin

Modélisation physique assistée par l'Intelligence Artificielle pour la fabrication additive et la biofabrication

Nicolas Hascoët, Francisco Chinesta, Jean-Yves Hascoët

*ENSAM Paris – PIMM UMR CNRS 8006 - francisco.chinesta@ensam.eu nicolas.hascoet@ensam.eu
Centrale Nantes – GeM UMR CNRS 6183 - jean-yves.hascoet@ec-nantes.fr*

L'émergence de nouveaux procédés de fabrication, tels que les procédés de fabrication additive (WAAM, PBF, LMD, ...) s'accompagne de nouvelles opportunités pour les industries à forte valeur ajoutée telles que l'aéronautique, la construction navale ou le transport terrestre. Dans ce contexte, la simulation thermomécanique de la réalisation de ces composants par fabrication additive métallique porte un enjeu fort associé à ces problématiques. En effet, les temps de fabrication peuvent être longs, coûteux et les géométries à réaliser souvent complexes. Pour améliorer la performance de ces procédés et déployer leur utilisation efficace à échelle industrielle, il est essentiel de pouvoir réduire au maximum les temps d'immobilisation des équipements pour des mises au point du paramétrage du procédé, tout en s'assurant de la conformité des composants réalisés.

De plus, pouvoir agir au cours de la fabrication pour adapter le paramétrage du procédé et ainsi s'assurer que la pièce réalisée répondra au cahier des charges en termes de géométrie, mais également de propriété du matériau constitue un axe de progrès attendu. Pour autant, les solutions de simulation actuelles ne permettent pas de rendre compte des phénomènes physiques complexes mis en jeu lors de la fabrication et il n'est pas possible d'anticiper avec suffisamment de confiance les propriétés qu'aura le composant une fois réalisé. Cette complexité se retrouve davantage lorsque différents types de matériaux et compositions de matériaux entrent en jeu et pour lesquels les propriétés ne sont pas toujours connues ou maîtrisées. Dans le domaine de la BioFabrication, pour des applications médicales de reconstruction par exemple, les propriétés de matériaux restent très peu maîtrisées et difficilement modélisables par simulation.

Des outils numériques tels que la Réduction de Modèles et l'Intelligence Artificielle permettent de répondre à ces deux problématiques de temps de calcul et de complexité en créant des modèles paramétriques par interpolations et extrapolations basés sur la donnée. Ces modèles réduits paramétriques sont construits à partir de peu de données de simulations calibrées pour pouvoir être interrogés et donner une réponse en temps réel. Ceci permet de pouvoir parcourir l'espace des paramètres et visualiser leurs influences sur le résultat souhaité. D'autre part, les modèles d'Intelligence Artificielle permettent de se dispenser d'une modélisation fine voir d'une modélisation non existante en particulier concernant des propriétés thermomécaniques des matériaux peu (voire pas) connues en métallurgie et BioFabrication en s'appuyant sur des données expérimentales. Des applications de modèles paramétriques dépendant de trajectoires complexes, de modèles Deep Learning pour la prédiction de porosités en fabrication additive métallique et de modèles multiparamétriques pour la prédiction de dimensionalités en BioFabrication sont illustrées dans cette présentation.

Identification de lois de comportement en plasticité cristalline par jumeau numérique et apprentissage statistique

Daria Mesbah^{1, 2}, David Ryckelynck², Henry Proudhon², Lionel Gélébart¹

¹Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, 91191 Gif-sur-Yvette

²Mines Paris, Université PSL, Centre des Matériaux (MAT), UMR7633 CNRS, 91003 Evry, France

Résumé

Les lois de comportement microscopiques comme la plasticité cristalline, font intervenir de nombreux paramètres dont la calibration à partir de simulations numériques et de données expérimentales, à l'échelle microscopique, et pas uniquement macroscopique, est une question essentielle. Les progrès réalisés en imagerie des matériaux par rayonnement synchrotron permettent de suivre, in-situ, l'évolution de grandeurs internes telles que l'orientation et la déformation élastique, à l'échelle des grains (DCT et 3DXRD) ou intragranulaire (s3DXRD). Parallèlement, le développement de codes de simulations numériques basés sur des méthodes FFT offre la possibilité de réaliser des simulations de grande taille, sur des jumeaux numériques d'agrégats polycristallins, inenvisageables par des codes éléments-finis standards. Des méthodes d'apprentissage statistique en Computer Vision visent à combiner ces deux approches afin d'optimiser l'identification des paramètres sur les mesures expérimentales, à différentes échelles. La stratégie mise en place s'appuie sur une méthode de super-résolution micromécanique, apprenant le lien entre les états de contraintes obtenues à différentes échelles, de manière à éviter la réalisation de simulations à haute résolution.

Introduction

L'étude de la déformation des matériaux polycristallins à l'échelle macroscopique ne rend pas compte des hétérogénéités de déformations, observées à l'échelle intragranulaire, ce qui a encouragé le développement de lois de comportement microscopique. Parmi celles-ci, les modèles de plasticité cristalline expliquent la déformation par le glissement selon les systèmes cristallographiques. Cela justifie l'introduction d'un nombre important de paramètres à calibrer à partir de données de simulations et d'observations microscopiques. Ces travaux s'appuient sur les progrès réalisés en imagerie par rayonnement synchrotron et en simulations numériques par des méthodes spectrales (FFT), combinées à partir de techniques de Computer Vision.

Alimentation de jumeaux numériques par imagerie synchrotron et simulations FFT

La caractérisation tridimensionnelle des microstructures, par Diffraction Contrast Tomography (DCT) [LU08] et par 3D X-Ray Diffraction (3DXRD) [PO04], permet d'évaluer la déformation des grains au cours d'un essai, en utilisant le caractère diffractant des matériaux polycristallins. En complément, les acquisitions par scanning-3DXRD (s3DXRD) [HA15] offrent la possibilité d'obtenir des cartographies de meilleure résolution, rendant compte des hétérogénéités de déformation au sein d'un grain. Ces images constituent la base expérimentale de la calibration des modèles de plasticité cristalline. Les travaux présentés reposent sur des acquisitions DCT, 3DXRD et s3DXRD réalisées sur la ligne ID11 de l'ESRF (Grenoble), sur une éprouvette de titane, avant et après déformation, constituant la base expérimentale nécessaire pour la calibration des modèles de plasticité cristalline. La reconstruction 3D à partir des acquisitions DCT sert également de données d'entrée de simulations en plasticité cristalline, à partir de méthodes spectrales (FFT), implémentée dans AMITEX1. Ainsi, le jumeau numérique du polycristal est alimenté, d'une part, par une base expérimentale et d'autre part, par des simulations FFT en plasticité cristalline. L'implémentation massivement parallèle des codes FFT offre la possibilité de réaliser des simulations de grande taille, inenvisageables par des codes éléments-finis standards. Enfin, les méthodes FFT présentent également l'avantage de manipuler des images 3D, autant comme données d'entrée que de sortie (champs mécaniques), particulièrement adapté pour des problèmes de Computer Vision, en jeu dans ces travaux.

Super-résolution micromécanique par Computer Vision

Les champs mécaniques, issus des simulations FFT, sont des images 3D, ce qui encourage l'utilisation de techniques d'apprentissage statistique en Computer Vision, afin d'optimiser l'identification des paramètres de plasticité cristalline sur les mesures locales de déformation et de désorientation (s3DXRD). Dans ces travaux, l'apprentissage du lien entre les états de contraintes à différentes échelles s'effectue à travers une méthode de super-résolution micromécanique par un AutoEncodeur MultiModal (MMAE) [LA22]. Cette architecture combine des modèles autoencodeurs entraînés de manière indépendante avec pour objectif d'apprendre à représenter différents modes d'un même élément dans un espace de dimension réduite : l'espace latent. La combinaison de ces espaces latents permet de reconstruire un des modes, en général le plus difficile à obtenir, à partir des autres modes, plus faciles d'accès. Dans ces travaux, le MMAE construit est constitué de 3 modèles autoencodeurs ayant pour objectif d'apprendre la morphologie et l'orientation des grains, l'état de contraintes avec une résolution grossière et l'état de contraintes avec une très haute résolution. Ce dernier correspondant à des résultats de simulations FFT à très haute résolution, est conventionnellement issu d'un calcul champ complet, consommateur en temps, ou d'un Zoom Structural. Le MMAE conçu vise à obtenir l'état de contraintes à très haute résolution tout en s'affranchissant des simulations FFT associées, de manière à accélérer chaque boucle d'optimisation, en jeu dans la calibration des lois de comportement microscopiques.

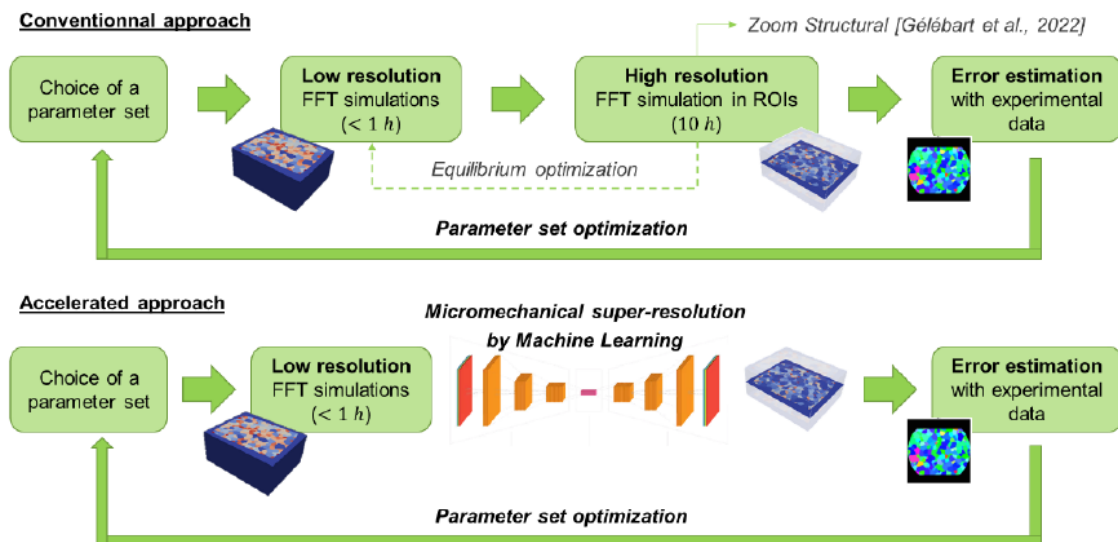


Figure 1 - Calibration de modèles microscopiques par apprentissage statistique.

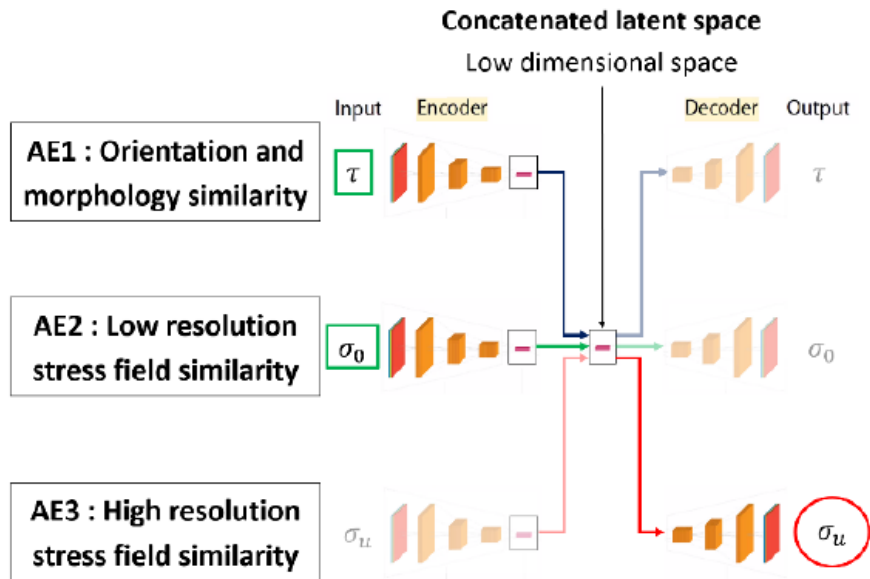


Figure 2 - AutoEncodeur MultiModal (MMAE) pour la prédiction d'un état de contraintes à haute résolution

Références

- [HA15] Hayashi, Y., Hirose, Y., and Seno, Y. (2015) Polycrystal orientation mapping using scanning three-dimensional X-ray diffraction microscopy. *Journal of Applied Crystallography*, 48(4):1094–1101.
- [LA22] Launay, H., Ryckelynck, D., Lacourt, L., Besson, J., Mondon, A., and Willot, F. (2022). Deep multimodal autoencoder for crack criticality assessment. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 123(6):1456–1480.
- [LU08] Ludwig, W., Schmidt, S., Lauridsen, E. M., and Poulsen, H. F. (2008). X-ray diffraction contrast tomography: a novel technique for three-dimensional grain mapping of polycrystals.I. Direct beam case. *Journal of Applied Crystallography*, 41(2):302–309.
- [PO04] Poulsen, H. F. (2004). Three-dimensional X-ray diffraction microscopy: mapping polycrystals and their dynamics. Number v. 205 in *Springer tracts in modern physics*. Springer, Berlin ; New York. ocm56492448.

A level-set numerical framework for the modeling of microstructural evolutions in the context of multiphase polycrystalline materials

N. Chandrappa, M. Bernacki

Mines-ParisTech, PSL-Research University, CEMEF – Centre de mise en forme des matériaux, CNRS UMR 7635, CS 10207 rue ClaudeDaunesse, Sophia Antipolis, France

It has been well established that the metallic material properties have a direct correlation with the underlying microstructure. When a material is subjected to thermomechanical treatments (TMTs) in the context of metal forming, several microstructural changes [1] could occur in the form of recovery, recrystallization (ReX), grain growth (GG), phase transformation (PT) which in-turn modify the material's macroscopic properties. Considering the large-scale use of metallurgical products in various strategic industries (nuclear, aerospace, automotive, oil & gas, defense and renewable energies et cetera), comprehensive understanding and modeling of microstructural mechanisms during TMTs is of prime importance to be able to have a control over their material properties. There is then a growing demand to develop more physically realistic numerical models capable of precisely predicting the microstructural evolution and in-turn determine the in-service material performances. Thanks to the explosion of computer capacities, mesoscopic modeling techniques for metallic materials at the solid-state are now available. These lower scale approaches, the so-called full-field models, are based on a full description of the microstructure topology and have demonstrated an exciting potential for an extensive range of microstructure evolutions like the precise modeling of recrystallization (ReX) in dynamic (DRX) or post-dynamic (PDRX) conditions, grain growth (GG), diffusive solid-solid phase transformation (DSSPT), spheroidization and sintering.

The main numerical frameworks involved are Monte Carlo Potts (MC) [2], Cellular Automata (CA) [3], Phase Field (PF) or Multiphase Field (MPF) [4, 5], Front-Tracking [6, 7]/Vertex [8], and Level-Set (LS) models [9, 10]. These numerical methods are currently used and developed by many researchers and regularly compared for particular metallurgical mechanisms. However, in the current state of the art, most of the numerical predictions are either based on a monophasic microstructural evolution, or only based on phase transformation without considering other phenomena such as ReX or GG. Such predictions are insufficient since most materials of industrial purpose are not monophasic, especially when they undergo complex thermomechanical treatments, and where microstructural mechanisms could be concomitant. So, a global mesoscopic numerical approach allowing to model all these mechanisms in a unified framework remains to be developed. One of the objectives of this work is to implement such a unified framework.

In the context of full field numerical modeling of diffusive solid-solid phase transformation (DSSPT), PF methods [11,12] are popular and extensively used due to their thermodynamic consistency and the ability to model arbitrary complex morphological changes. However, in the context of industrial processes where high plastic deformation can be achieved, PF, CA or MC methods do not provide easily an appropriate framework to perform simulations of dynamic recrystallization concomitant with phase transformation in multiphase materials. On the other hand, level-sets have been successfully used to simulate DRX [13] and GG phenomena [14] in a monophasic material. Interestingly, there aren't any LS based models reported in the context of DSSPT. So, the perspective of this work is to explore the potential of LS methods for the modeling of DSSPT. We thus propose a global finite-element (FE) LS formalism capable of simulating diffusive phase transformation and ReX in the context of large plastic deformation in a multiphase polycrystalline while considering the contributions of both grain and phase interfaces.

Figure 1 shows the representative simulation of DSSPT at different times in a biphasic 2D polycrystal for austenite to ferrite phase transformation in steels.

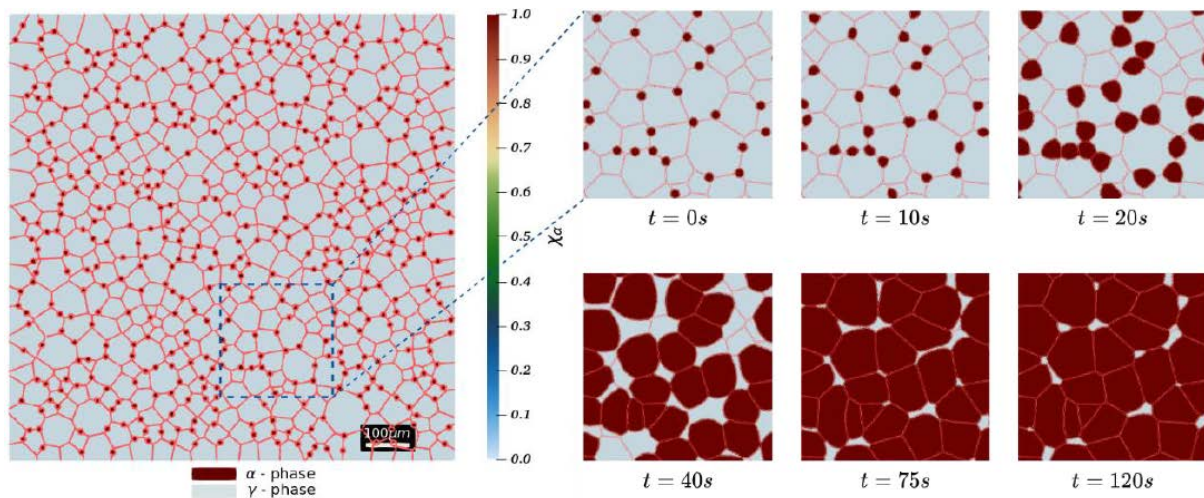


Figure 1: Snapshots of phase evolution in the considered 2D biphasic polycrystal

A generalized framework based on level-sets is developed to simulate diffusive solid-solid phase transformation while also capable of considering the contributions from other concomitant mechanisms such as recrystallization and grain growth. The obtained steady state characteristics were in good agreement with the ThermoCalc [15] estimations. Without major modifications, this framework is also capable of simulating other diffusive solid-state phenomena such as Ostwald Ripening. Implementing different nucleation criteria as a function of the cooling rate is one of the perspectives. Simulations with a more physical description of the grain boundary energy and the mobility accounting for anisotropy is a potential prospect. It is also possible to adapt the current framework to simulate DSSPT in a multi-component system by considering the effects of substitutional elements on the transformation kinetics.

Références

- [1] J. W. Martin, J. W. Martin, R. D. Doherty, and B. Cantor, *Stability of microstructure in metallic systems*. Cambridge University Press, 1997.
- [2] A. Rollett, D. J. Srolovitz, R. Doherty, and M. Anderson. Computer simulation of recrystallization in non-uniformly deformed metals, *Acta Metallurgica*, vol. 37, no. 2, pp. 627–639, 1989.
- [3] D. Raabe. Cellular automata in materials science with particular reference to recrystallization simulation, *Annual Review of Materials Research*, vol. 32, no. 1, pp. 53–76, 2002.
- [4] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seesselberg, R. Prieler, and J. Rezende. A phase field concept for multiphase systems, *Physica D : Nonlinear Phenomena*, vol. 94, pp. 135–147, 1996.
- [5] N. Moelans, B. Blanpain, and P. Wollants. Quantitative analysis of grain boundary properties in a generalized phase field model for grain growth in anisotropic systems, *Physical Review B*, vol. 78, no. 2, p. 024113, 2008.
- [6] S. Florez, K. Alvarado, D. P. Muñoz, and M. Bernacki, A novel highly efficient lagrangian model for massively multidomain simulation applied to microstructural evolutions, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 367, p. 113107, 2020.
- [7] S. Florez, K. Alvarado, B. Murgas, N. Bozzolo, D. Chatain, C.E. Krill III, M. Wang, G.S. Rhorer, and M. Bernacki. Statistical behaviour of interfaces subjected to curvature flow and torque effects applied to microstructural evolutions, *Acta Materialia*, In press, 2021.
- [8] L. Barrales Mora, G. Gottstein, and L. Shvindlerman, Three-dimensional grain growth: Analytical approaches and computer simulations, *Acta Materialia*, vol. 56, no. 20, pp. 5915–5926, 2008.

- [9] M. Bernacki, Y. Chastel, T. Coupez, and R. Logé, Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, vol. 58, no. 12, pp. 1129–1132, 2008.
- [10] M. Bernacki, R.E. Logé, T. Coupez. Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials, *Scripta Materialia*, 2011.
- [11] G. Pariser, P. Schaffnit, I. Steinbach, W. Bleck. Simulation of the γ - α -transformation using the phase-field method, *Steel research*, vol. 72, no. 9, pp. 354–360, 2001.
- [12] M. Militzer, M. Mecozzi, J. Sietsma, S. Van der Zwaag. Three-dimensional phase field modelling of the austenite-to-ferrite transformation, *Acta materialia*, vol. 54, no. 15, pp. 3961– 3972, 2006.
- [13] L. Maire, Full field and mean field modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization in 3D – Application to 304L steel. Theses, Université Paris sciences et lettres, Nov. 2018.
- [14] M. Bernacki, R. E. Logé, and T. Coupez, “Level set framework for the finite element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials,” *Scripta Materialia*, vol. 64, pp. 525–528, Mar. 2011.
- [15] “Thermo-calc software.” <http://www.thermocalc.se/>.

Influence de la structure polycristalline des matériaux métalliques sur la localisation de la déformation plastique

J.L. Dequiedt^{1,2} et C. Denoual^{1,2}

¹CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France.

² Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, F-91680 Bruyères-le-Chatel, France.

e-mail: jean-lin.dequiedt@cea.fr, christophe.denoual@cea.fr

La localisation de la déformation plastique dans des enveloppes métalliques en expansion dynamique s'analyse à l'échelle macroscopique comme la conséquence du développement de modes d'instabilité de la structure (voir [1] pour des travaux récents sur le sujet). Toutefois, la prise en compte de l'échelle de la microstructure (agrégat polycristallin) et de son incidence sur le processus est accessible grâce à la plasticité cristalline. Des simulations de plaques en traction ont été réalisées au moyen du code aux EF Coddex développé au CEA/DAM [2]. Elles mettent en évidence une organisation de la déformation plastique qui évolue depuis l'échelle de quelques grains vers l'apparition de motifs de plus grande taille (Fig. 1) ; certains de ces motifs donneront naissance aux strictionnements marqués conduisant à la ruine de la plaque. L'incidence de la vitesse de sollicitation sur la chronologie de ces phénomènes a pu également être évaluée.

Par ailleurs, les résultats expérimentaux montrent que la propension du matériau à développer de la localisation plastique est sensible à des caractéristiques physiques, résultant notamment de la gamme de mise en forme de l'édifice, telles que la taille et la forme des grains, la texture ou la densité de dislocations initiale. Ces caractéristiques ont pu être prises en compte dans les simulations polycristallines et leur influence mieux comprise.

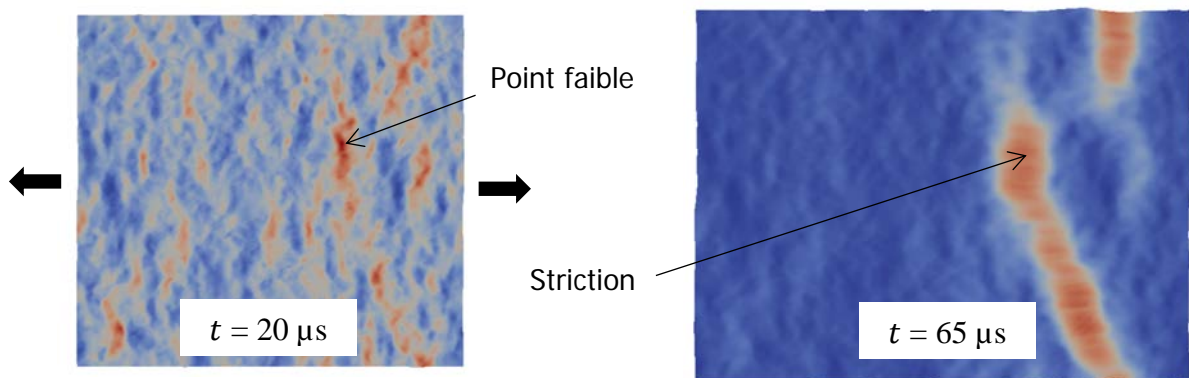


Fig. 1. Cartes de déformations dans une plaque de 4000 grains en sollicitation uniaxiale ($\dot{F}_{XX} = 5000 \text{ s}^{-1}$).

Références

- [1] M. Xavier, C. Czarnota, D. Jouve, S. Mercier, J.L. Dequiedt, A. Molinari, Eur. J. Mech. A Solids, 79, 1-19 (2020).
- [2] J.L. Dequiedt, C. Denoual, Int. J. Solids Struct., 210-211, 183-202 (2021).

Étude locale du maillage lors de la transition α - ϵ du fer sous pression

R. Freville^{1,2}, N. Bruzy^{1,2} et A. Dewaele^{1,2}

¹CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France.

² Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, F-91680 Bruyères-le-Chatel, France.

Le fer est l'un des métaux les plus abondants sur Terre, il s'agit notamment du constituant principal du manteau terrestre. L'étude de ses changements de phase sous pression et sous température présente un réel intérêt par exemple en géophysique. En particulier, à température ambiante et vers 13 GPa, le fer subit une transition d'une phase cubique centrée (α) vers une phase hexagonale compacte (ϵ). Elle est très étudiée en tant que transition martensitique.

Cette transition a été caractérisée par différentes techniques -diffraction aux rayons X (XRD) en cellule à enclumes de diamants (CED) ou tomographie en presse Paris-Edimbourg par exemple [1][2]. Ces études ont notamment montré la réversibilité quasi-totale de cette transition. Il existe en effet une faible proportion de l'échantillon (~5 %) qui ne retourne pas à son orientation initiale. L'objectif de cette étude est de proposer différentes mesures in situ (XRD, suivi optique de la transition) et ex situ (analyse au MEB et EBSD) pour déterminer l'origine de ces zones et obtenir localement des informations sur la structure cristalline et les déformations mises en jeu.

Les transitions directe ($\alpha \rightarrow \epsilon$) et inverse ($\epsilon \rightarrow \alpha$) ont été étudiées sur des échantillons de fer (diamètre 110 μm , épaisseur 10 μm) chargés en CED. Le premier échantillon a permis une comparaison entre une étude in situ par diffraction et une étude ex situ par post-traitement numérique sur les cartographies issues de l'analyse EBSD. Dans les deux cas, les nouvelles orientations observées peuvent s'expliquer par l'apparition de maillage. Les autres échantillons ont servi à réaliser un suivi optique de la transition avec corrélation d'image pour obtenir les états (déplacements et déformations) locaux notamment au niveau de ces zones maillées [3].

Références

[1] A. Dewaele, C. Denoual, S. Anzellini, F. Occelli, M. Mezouar, P. Cordier, S. Merkel, M. Véron et E. Rausch, *Physical Review B*, 2015.

[2] E. Boulard, C. Denoual, A. Dewaele, A. King et Y. Le Godec, «Following the phase transitions of iron in 3D with X-ray tomography and diffraction under extreme conditions», *Acta Materiala*, 2020.

[3] N. Bruzy, M. Coret, B. Huneau, L. Stainier, C. Denoual, et al. « Real time imaging of strain fields induced by the ferrite-to-austenite transformation in high purity iron ». *Materials Today Communication*, Elsevier, 2020, 24.

Jeudi 29 septembre, après-midi

Méthode de « champ de phase » en science des matériaux

Marc Bernacki

CEMEF, Mines Paristech Sofia Antipolis

La physique des milieux hétérogènes englobe un nombre toujours plus vaste de sujets théoriques et technologiques. Cette notion sous-tend au difficile exercice de décrire, dans les systèmes physiques d'intérêts, l'ensemble des interfaces présentes, synonymes en général, de discontinuités topologiques, morphologiques et des propriétés. Par ailleurs, ces interfaces peuvent être mues par leur propre cinétique inhérente à une recherche d'équilibre thermodynamique.

Depuis 50 ans, l'approche « champ de phase » a été enrichie sur le plan théorique et numérique afin de répondre au besoin de description de ces problèmes d'interfaces dans les simulations. Il est aisé de comprendre par la nature multiéchelles et multiphysiques des problématiques d'interfaces que des approches « champ de phase » soient aujourd'hui utilisées aux échelles atomistique, mésoscopique et macroscopique pour un spectre d'applications très large en mécanique du solide, des fluides et en science des matériaux.

Cette présentation s'attachera à décrire succinctement les bases théoriques des approches « champ de phase » et leurs évolutions dans l'état de l'art en se « limitant » à la métallurgie computationnelle à l'échelle mésoscopique pour laquelle les applicatifs sont déjà légion : solidification, recristallisation et croissance de grains, changement de phase à l'état solide, densification en métallurgie des poudres, mûrissement d'Ostwald, globularisation, endommagement...

Ces approches seront également introduites vis-à-vis de leur originalité par rapport aux autres méthodes numériques existantes : formalisme de type « capture d'interfaces » versus « suivi d'interfaces » et description d'interfaces « diffuses » plutôt que « nettes ».

Enfin, une discussion sur l'implémentation pratique de ces méthodes, le choix et/ou l'acquisition des paramètres nécessaires et leur coût numérique sera introduite.