



Contribution à la modélisation des procédés de mise en forme par solidification : application au soudage et à la fabrication additive

Gildas Guillemot

► To cite this version:

Gildas Guillemot. Contribution à la modélisation des procédés de mise en forme par solidification : application au soudage et à la fabrication additive. Matériaux. Université de Lille, 2024. <tel-05561028>

HAL Id: tel-05561028

<https://lilloa.hal.science/tel-05561028v1>

Submitted on 20 Mar 2026

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.



Copyright - All rights reserved



*Manuscrit présenté en vue de l'obtention
de l'Habilitation à Diriger des Recherches de l'Université de Lille*

*-
Sciences de l'Ingénieur*

Ecole Doctorale 'Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes' (ENGSYS)

Domaine : 'Mécanique, Génie Civil, Énergétique, Matériaux' (MGCEM)

Spécialité : 'Génie des matériaux'

Discipline : 'Chimie des matériaux'

Contribution à la modélisation des procédés de mise en forme par solidification

Application au soudage et à la fabrication additive

présenté par

Gildas Guillemot

Maître Assistant, Mines Paris – PSL
CEMEF – Centre de Mise en Forme des Matériaux
CNRS UMR 7635, Sophia Antipolis

soutenue le 3 juin 2024,

Devant le jury composé de :

Aude Simar	Professeure à l'Université Catholique de Louvain	Présidente
Muriel Carin	Professeure à l'Université Bretagne Sud	Rapporteure
Éric Hug	Professeur à l'Université de Caen	Rapporteur
Mathis Plapp	Directeur de recherche CNRS	Rapporteur
Maxence Bigerelle	Professeur à l'Université Polytechnique Hauts-de-France	Examineur
Denis Najjar	Professeur à Centrale Lille Institut	Garant

Sommaire

Introduction	1
---------------------	---

Chapitre 1 – Notice individuelle :

1.1	Curriculum Vitae	8
1.2	Activité d’enseignement	10
i.	Formations dispensées	10
ii.	Stage et suivi d’étudiants	11
1.3	Activité d’encadrement	12
i.	Post-doctorants	12
ii.	Doctorants	12
iii.	Mastères Spécialisés MaPMod	16
iv.	Projets de Master, Stages de formation ingénieur	17
1.4	Responsabilités administratives	19
1.5	Responsabilités scientifiques	20
i.	Montages de projets et contrats	20
ii.	Commissions savantes	20
1.6	Expertises scientifiques	21
i.	Participations à des comités de suivi de thèse (CSI)	21
ii.	Participations à des jurys de thèse	21
iii.	Activités de relectures	22
1.7	Collaborations internationales	23

Chapitre 2 – Production Scientifique :

2.1	Publications scientifiques avec comité de lecture	27
i.	Rang A [RA]	27
ii.	Rang B [RB]	31
2.2	Conférences et Communications scientifiques	32
i.	Conférences internationales [CI]	32
ii.	Conférences nationales [CN]	42
iii.	Communications nationales [CO]	46
2.3	Contributions aux ouvrages scientifiques	51
i.	Ouvrages à diffusion internationale [OI]	51
ii.	Ouvrages à diffusion nationale [ON]	51
2.4	Séminaires	52
i.	Séminaires de recherche [SR]	52
ii.	Séminaires d’enseignement [SE]	53
2.5	Vulgarisation scientifique	54
i.	Publication [VP]	54
ii.	Conférence [VC]	54
iii.	Média [VM]	54

Chapitre 3 – Caractérisation des surfaces et interfaces :

3.1	Introduction	56
3.2	Activité de recherche	57
i.	Propriétés mécaniques des surfaces	57
•	Contexte - Dureté des Matériaux	58
•	Modèle de dureté multicouches	59
•	Modèle de dureté composite	60
•	Pertinence des modèles de dureté sur films minces	63
ii.	Caractérisation géométrique des surfaces	66
•	Contexte - Analyse multi-échelle	66
•	Méthodes de bootstrap	68
•	Traitements par ondelettes	68
•	Echelles pertinentes de mesure	70
iii.	Corrosion par piqures	74
•	Contexte – Corrosion des alliages métalliques	75
•	Analyse probabiliste	75
•	Prédiction des défauts extrêmes par méthode GLD	77
3.3	Bilan et perspectives	82
i.	Synthèse	82
ii.	Bilan et diffusion	84
iii.	Perspectives	87

Chapitre 4 – Procédés de soudage par fusion :

4.1	Introduction	92
4.2	Activité de recherche	93
i.	Procédé de soudage hybride arc-laser – projet SIHYFE	93
•	Contexte	93
•	Modélisation Level-Set du procédé	94
•	Evolution mécanique des pièces	99
ii.	Evolution microstructurale – projet CSC + NEMESIS	101
•	Contexte	101
•	Modélisation	103
4.3	Bilan et perspectives	112
i.	Synthèse	112
ii.	Bilan et diffusion	114
iii.	Perspectives	115

Chapitre 5 – Procédés de fabrication additive :

5.1	Introduction	118
5.2	Activité de recherche	122
i.	Fabrication Additive sur lit de poudre – Description du procédé	122
ii.	Initiation des activités de modélisation – Projet CEFALE	124
	• Bilan de conservation – énergie	126
	• Bilan de conservation – quantité de mouvement	127
	• Evolution matière	128
	• Présentation des résultats marquants	129
iii.	Application aux alliages métalliques – Projet SAFRAN	132
	• Modélisation des processus de vaporisation	133
	• Validations expérimentales	136
iv.	Modélisation des évolutions microstructurales – Projet CETIM	140
5.3	Bilan et perspectives	145
i.	Synthèse	145
ii.	Bilan et diffusion	146
iii.	Perspectives	149

Chapitre 6 – Couplages thermodynamiques :

6.1	Introduction	152
i.	Besoins de couplages thermodynamiques	153
ii.	Développement de l'outil PhysalurgY	156
6.2	Activité de recherche	160
i.	Description thermodynamique – Méthodologie	160
ii.	Suivi du développement des précipités	163
iii.	Cinétique de croissance dendritique	171
iv.	Introduction des effets cinétiques	182
6.3	Bilan et perspectives	188
i.	Synthèse	188
ii.	Bilan et diffusion	189
iii.	Perspectives	191

Conclusions & Perspectives	195
---------------------------------------	------------

Références Bibliographiques	203
------------------------------------	------------

Introduction

« On ne peut apercevoir à la fois
le commencement et la fin. »

*Hérodote, Livre VII (Polymnie), 51,
c. 440 av. J.-C.*

Le thème de recherche que constitue la « Science des Matériaux », et les différentes disciplines qu'elle regroupe, apparaît comme un domaine d'étude particulièrement riche et actif. Le nombre de matériaux disponibles pour l'ingénieur varie, ainsi, selon les sources et les auteurs, de 100 000 à plus de 200 000 [Bre13, Ash17, Mat24]. Ce chiffre est considérable et sans cesse croissant, porté par les projets de recherche actuels, tel que le Materials Genome Initiative [Pab19, MGI21] visant à faciliter le développement de nouveaux alliages, et leur diffusion industrielle, aidé, en cela, par l'exploitation des bases de données thermodynamiques [Agr23]. De même, la recherche de nouveaux matériaux est soutenue par les avancées récentes observées dans d'autres disciplines scientifiques, en particulier liées à l'*intelligence artificielle* [Lu17, Jos18, Che23a], ces méthodologies semblant parfaitement adaptées et performantes pour de telles études [Wei19]. Des démarches de travail collaboratives apparaissent aussi [Hu22] pour archiver et échanger les résultats de ces recherches, en cherchant également à améliorer les matériaux actuels. Enfin, si l'on doit discuter des procédés industriels émergents, la fabrication additive, souvent qualifiée de '*quatrième révolution*' [Tom22], travaille à la mise en forme de ces nouveaux matériaux, mais cherche, aussi, progressivement, à les créer, en réponse aux besoins exprimés. Ainsi, des travaux relatifs à leur architecture ou leur microstructure [Li19] sont développés, en s'appuyant, notamment, sur les outils de la simulation numérique [Bay21, Wu23]. En ce qui concerne l'état de l'art expérimental, les moyens actuels de caractérisation fine de la nature et des propriétés des matériaux, contribuent, encore, à développer nos connaissances de leurs évolutions durant les procédés d'élaboration et de mise en forme, participant, à leur maîtrise, à des échelles sans cesse plus petites. On peut, en ce sens, citer les moyens et méthodes de rayonnement synchrotron [Wri20], contrôle ultrasonore [Hub16, Civ23], nanoindentation [Puc23, Ros23] ou sonde atomique tomographique [Mar13], pour ne mentionner que quelques techniques d'investigation récentes.

La « Science des Matériaux » apparaît, à travers le paragraphe précédent, relatif à la recherche et l'amélioration des matériaux, au croisement de nombreuses disciplines scientifiques, touchant autant à des aspects théoriques, expérimentaux, numériques ou technologiques. Le développement de collaborations et de synergies bénéficie ainsi grandement à ce domaine d'étude, et aux progrès observés actuellement. Mes activités de recherche personnelles, développées depuis mon doctorat [Gui04], et mon parcours, se retrouvent pleinement dans cette démarche de travail diversifiée, consistant à associer différentes thématiques de recherche, complémentaires, dans un objectif de bénéfice mutuel. En particulier, le portage et la participation, régulière, à des projets collaboratifs, autant à l'échelle française qu'internationale, m'ont permis de progresser dans cette vision, et de m'intéresser à des sujets d'études variés, touchant autant aux domaines expérimentaux, théoriques que numériques. Cette vision et ces objectifs seront illustrés, dans ce mémoire d'*Habilitation à Diriger des Recherches*, dans la présentation donnée de mes activités passées et actuelles. De même, les perspectives, régulièrement tracées, de ces travaux chercheront à illustrer ma volonté de poursuivre mes activités à travers le développement de mes collaborations actuelles, mais avec le souhait, également, de rechercher de nouveaux partenariats portant les activités projetées.

Un bref résumé de mon parcours, qui sera détaillé dans le premier chapitre de ce mémoire (*Chapitre 1*), est rappelé ici. Mes activités de recherche personnelles ont débuté avec mon doctorat (2000 – 2004) réalisé au Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie (LSG2M, Ecole des Mines de Nancy) sur un sujet portant sur la formation des structures de grains dans les alliages à solidification dendritique et la modélisation de ces évolutions par une approche couplant méthode automates cellulaires et résolution éléments finis (méthodologie CAFE). Ces travaux se sont réalisés sous la direction du Pr. H. Combeau et de Ch.-A. Gandin. Par la suite, j’ai réalisé un post-doctorat d’une année au Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF) (Septembre 2004-Aout 2005) (Mines de Paris – PSL, site de Sophia Antipolis), sous la supervision de Ch.-A. Gandin et M. Bellet, avant d’obtenir un poste de Maître de Conférences, en septembre 2005, dans l’équipe ‘Caractérisation et Propriétés de la Pêrisurface’ (CPP) basée au Centre de Lille de l’Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers (ENSAM). L’équipe CPP, dirigée par le Pr. A. Iost, constituait l’une des quatre équipes du Laboratoire de Métallurgie Physique et de Génie des Matériaux (LMPGM). Ses activités étaient attachées à l’étude et à la caractérisation géométrique, mécanique et physique des surfaces. En ce sens, elles portaient sur l’étude des propriétés des interfaces (matière \ matière ou matière \ gaz) et l’amélioration de leur intégrité. Les applications de ces travaux se sont révélées riches et fructueuses, à travers les problématiques d’étude, relatives à la dureté des matériaux revêtus ou traités, la rugosité des surfaces parachevées ou la mesure des défauts en corrosion par piquuration. Ces différentes activités se trouveront détaillées dans le chapitre consacré à la *Caractérisation des surfaces et interfaces* (*Chapitre 3*). Par la suite, les membres de cette équipe ont intégré, en 2010, l’équipe de recherche ‘Freinage Contact Surface’ (ER5), du Laboratoire de Mécanique de Lille (LML). Ses activités portaient sur l’étude des phénomènes induits par le frottement et les couplages liant propriétés géométriques, thermiques et mécaniques. À ce titre, cette équipe présentait, déjà, un grand nombre de compétences que les membres de l’équipe CPP sont venus enrichir.

J’ai, ensuite, eu l’opportunité de revenir au CEMEF, en avril 2011, sur un poste de Maître Assistant, ouvert dans ce laboratoire. Mon activité était initialement placée entre les équipes de recherche ‘Structures et Propriétés dans les Procédés de Solidification’ (SP2), dirigée par Ch. A. Gandin (DR CNRS), et ‘Thermomécanique et Plasticité’ (TMP), dirigée par le Pr. M. Bellet, du Pôle ‘Alliages Métalliques’ du CEMEF. À la suite du regroupement de ces équipes, cette activité se déroule actuellement dans l’équipe ‘Métallurgie, Mécanique, Structures et Solidification’ (2MS). Sur cette période de recherche au CEMEF, Ch. A. Gandin et M. Bellet ont été les directeurs des thèses que j’ai eu l’opportunité de co-encadrer. De même, j’ai participé, avec eux, au suivi de différents étudiants inscrits dans le Mastère Spécialisé MaPMod de notre laboratoire.

L’activité de recherche que je portais, dans ces équipes SP2 et TMP, à mon arrivée, était relative à l’étude et la maîtrise des procédés de soudage, et des phénomènes liés ; cette thématique étant commune à ces deux équipes. Plus concrètement, elle s’est focalisée sur la modélisation thermo-mécanique des procédés de soudage par fusion et le suivi des évolutions microstructurales des alliages. Cette thématique a été développée depuis mon arrivée, régulièrement, et plus particulièrement à travers différents travaux de doctorants. J’ai ainsi bénéficié de la dynamique déjà existante au CEMEF, dès mon arrivée (doctorat O. Desmaison),

avant de pouvoir, par la suite, contribuer plus personnellement à leur portage, notamment par la coordination du projet ANR NEMESIS (AAPG 2017, 2018 – 2022) et au financement dont j'ai bénéficié (doctorat C. Xue). Ces travaux m'ont donné l'occasion, également, de m'intéresser, ensuite, à l'exploitation des microstructures formées en soudage, particulièrement pour les applications liées au Contrôle Non Destructifs (CND) dans le domaine nucléaire. Les résultats les plus marquants de ces activités seront présentés dans le chapitre consacré aux '*Procédés de soudage par fusion*' (Chapitre 4).

Ces activités autour de la modélisation des procédés de soudage se sont, dans une continuité assez naturelle, étendues aux procédés voisins de la fabrication additive (FA) par fusion (L-PBF, WAAM, WLAM). Il est apparu, en effet, opportun de bénéficier des outils numériques précédemment développés, et des compétences acquises, pour nous diriger, sur cette base, vers de nouvelles thématiques de recherche, associées au thème porteur que constituent les procédés FA, au regard des besoins industriels actuels. À cet effet, différentes collaborations ont été montées, et plus particulièrement, le projet CEFAL (Institut Carnot M.I.N.E.S, porté par M. H. Berger, C. Colin (CMAT – Centre des Matériaux, Evry) et M. Bellet (CEMEF) qui a permis, en 2014, d'initier une activité autour de la maîtrise de ces procédés auquel j'ai pu contribuer. Ce projet a permis, de manière opportune, de développer, dans les deux centres, les compétences, expérimentale et numérique, associées, à l'échelle du cordon, à l'étude des procédés L-PBF et au contrôle de l'apparition des défauts. Cet enrichissement de nos activités SP2\TMP est apparu naturelle et en lien direct avec la volonté du CEMEF de participer au développement des procédés de mise en forme industriels innovants, qui constitue l'une de ses identités les plus remarquables. Les travaux initiés nous ont conduit à proposer de premières modélisations des procédés FA, basées sur l'utilisation de méthodes Level Set (LS) pour le suivi du cordon de matière déposée (doctorat Q. Chen), ces travaux ayant été très correctement diffusés dans la littérature. Nos activités se sont, ensuite, poursuivies dans un contexte industriel fort, à travers plusieurs doctorats CIFRE. D'une part avec Safran Additive Manufacturing (SAM-C), autour de la modélisation du procédé L-PBF appliqué aux alliages d'intérêt aéronautique (alliage Inconel - In718 \ In738 et titane - Ti6Al4V), en lien direct avec les besoins exprimés par Safran. D'autre part avec le CETIM dans le cadre d'un projet portant sur la modélisation des évolutions microstructurales, également en fabrication additive L-PBF. Le chapitre consacré aux '*Procédés de fabrication additive*' reviendra sur ces activités, à travers différents projets collaboratifs, conduits successivement, destinés à la prédiction des évolutions thermomécanique et microstructurale des pièces réalisées en FA (Chapitre 5). De plus, il doit être mentionné que les activités réalisées autour des '*Procédés de Soudage et de Fabrication Additive*' ayant été les plus développées, notamment en termes de partenariat académique et industriel, le titre de ce mémoire est relatif à ces seules activités, car résumant bien, à mon sens, le fil conducteur des travaux que j'ai conduits durant les dernières années.

En dernier lieu, il est nécessaire de rappeler que les travaux de modélisation numérique, précédemment cités, se sont réalisés en s'appuyant, régulièrement, sur l'utilisation de l'outil de calcul des équilibres thermodynamiques Thermo-Calc et les bases de données thermodynamique associées dont nous disposons (approche CALPHAD). Dans ce cadre, j'ai ainsi pris part, au cours des années passées, au développement d'une librairie de calcul, nommée

PhysalurgY (PY), regroupant un certain nombre d'outils numériques destinés à la prédiction des transformations de phases dans les alliages métalliques, et au suivi de leur développement, à différentes échelles tant spatiales et temporelles. Ces développements ont été, initialement, réalisés en réponse au besoin de stabiliser des travaux internes de doctorants SP2, dans un cadre uniformisé. Nous avons eu, par la suite, la volonté, dans notre équipe, d'étendre les applications de ces outils numériques, limités initialement à la tabulation des propriétés thermodynamiques. De nouveaux outils ont été développés, destinés à déterminer les cinétiques de croissance des phases métalliques lors des étapes de solidification (*dendritique \ eutectique*) ou lors des transformations solide\solide (*croissance de précipités individuels ou de populations de précipités*), et ce par différentes approches numériques. Des applications, très diversifiées, de ces outils, ont été proposées, confrontées valablement tant aux solutions de produits concurrents qu'à des mesures expérimentales. Il doit être souligné que cette activité a donné lieu à des collaborations internationales dynamiques, concrétisées, très récemment (2023), par l'obtention d'un prix de la meilleure publication dans le journal Calphad. Les développements liés à cette librairie seront présentés dans un dernier chapitre intitulé '*Couplages thermodynamiques*' (*Chapitre 6*) à travers une présentation d'une liste restreinte d'outils PhysalurgY, des modèles résolus et des applications réalisées.

Enfin, une conclusion sera apportée à ces travaux, dans une dernière partie, à travers un bilan des activités réalisées, des résultats obtenus et de leur valorisation. De même, cette partie conclusive visera à rappeler, de mon côté, des perspectives à ces activités, à fixer mes objectifs personnels pour les années à venir, et à détailler la manière de les atteindre en précisant les moyens nécessaires pour cela.

Chapitre 1

—

Notice individuelle

« Malgré le risque, Gosseyn ne fut pas surpris de constater qu'ils progressaient. Selon une curieuse loi psychologique, ceux qui avaient un but se trouvaient protégés de ceux qui n'en avaient pas. La chose importante était de ne pas soulever de réactions d'opposition. »

*The World of Null-A, Alfred Elton van Vogt,
1945 (Traduction Boris Vian, 1953)*

Table des matières

1.1	Curriculum Vitae	8
1.2	Activité d'enseignement	10
i.	Formations dispensées	10
ii.	Stage et suivi d'étudiants	11
1.3	Activité d'encadrement	12
i.	Post-doctorants	12
ii.	Doctorants	12
iii.	Mastères Spécialisés MaPMod	16
iv.	Projets de Master, Stages de formation ingénieur	17
1.4	Responsabilités administratives	19
1.5	Responsabilités scientifiques	20
i.	Montages de projets et contrats	20
ii.	Commissions savantes	20
1.6	Expertises scientifiques	21
i.	Participations à des comités de suivi de thèse (CSI)	21
ii.	Participations à des jurys de thèse	21
iii.	Activités de relectures	22
1.7	Collaborations internationales	23

1.1 Curriculum Vitae

Etat Civil

Gildas Guillemot

[REDACTED]
[REDACTED]
[REDACTED]
[REDACTED]
[REDACTED]

Tel : +33 (0)4 93 67 89 27

Mail : Gildas.Guillemot@minesparis.psl.eu

Formation et diplômes

Docteur en Science et Ingénierie des Matériaux

de l'Institut National Polytechnique de Lorraine (INPL)

(7 Juillet 2004)

Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie (LSG2M) – UMR 7584

Intitulé du doctorat : *Formation de Structures de Grains dans des Alliages à Solidification Dendritique – Modélisation Couplée Automates Cellulaires et Eléments Finis*

Doctorat réalisé sous la direction du Pr. Hervé Combeau (2000-2004), Projet CETSOL

Diplômé Ingénieur Civil des Mines de Nancy

(Septembre 2000)

Elève à l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Nancy (1997 – 2000)

Option principale 'Science des Matériaux'

Diplôme d'Etudes Approfondies (DEA) Science et Ingénierie des Matériaux

(Septembre 2000)

de l'Institut National Polytechnique de Lorraine

Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie (LSG2M) – UMR 7584

Intitulé du stage : *Développement d'un modèle couplant une méthode éléments finis en suivant un front de croissance dendritique colonnaire*

Stage réalisé sous la direction du Dr. Charles-André Gandin (1999 – 2000)

Maîtrise de Mathématiques de l'Université Henri Poincaré de Nancy

(Juin 1999)

Intitulé du mémoire de Maitrise : *Modélisation et simulation de la croissance d'un film de diamants et étude des paramètres de surface des films obtenus / Comparaison des résultats avec les valeurs théoriques calculées dans le cadre d'un modèle de croissance simplifié*

Laboratoire de Science et Génie des Surfaces (LSGS) – UMR 7570

Stage réalisé sous la direction du Dr. Silvère Barrat (1998 – 1999)

Expériences professionnelles

Depuis Avril 2011

Maître Assistant de l'Institut Mines Telecom (IMT), rattaché à Mines Paris - PSL
(Poste obtenu en détachement de Arts et Métiers ParisTech

- Intégration définitive au 1^{er} Novembre 2015 à l'IMT)

Grade de classe normale (2015 – 2023) et hors classe (2023 –)

Laboratoire d'appartenance :

Centre de Mines en Forme des Matériaux (CEMEF) – UMR 7635
Mines Paris – PSL, Site de Sophia Antipolis

Septembre 2005 – Mars 2011

Maître de Conférences à Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille / Section CNU 33

Laboratoire d'appartenance :

Septembre 2009 – Mars 2011 :

Laboratoire de Mécanique de Lille (LML) – UMR 8107
Université des Sciences et des Technologies de Lille 1 (USTL), Villeneuve d'Ascq

Septembre 2005 – Août 2009 :

Laboratoire de Métallurgie Physique et Génie des Matériaux (LMPGM) – UMR 8517
Université des Sciences et des Technologies de Lille 1 (USTL), Villeneuve d'Ascq

Septembre 2004 – Août 2005

Ecole des Mines de Paris, site de Sophia Antipolis

Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF – UMR 7635)

Post-doctorat entre dans les groupes Thermo-Mécanique et Plasticité (TMP) et Métallurgie, Structure et Rhéologie (MSR)

Modélisation de la formation des structures de grains en solidification et confrontation aux résultats expérimentaux obtenus au sol et en microgravité.

Seconde partie du projet de recherche CETSOL de l'Agence Spatiale Européenne (ESA)

1.2 Activité d'enseignement

i. Formations dispensées

Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille, en tant que Maître de Conférences

- *Séances d'études dirigées et travaux pratiques dans le cadre des enseignements 'Matériaux' donnés aux étudiants de première et deuxième année*

Elaboration, transformation et caractérisation des matériaux métalliques : Effet des trempes sur les aciers, fragilisation, évolution de la résilience, préparations et observations métallographiques des aciers et alliages d'aluminium, Description et analyse des diagrammes de phases, Essais mécaniques de traction et analyse des courbes, Détermination des propriétés rhéologiques.

- *Enseignements spécifiques*

Etudiants de première année

Choix des Matériaux à travers la démarche d'Ashby
(Estimation et optimisation des indices de performances à travers les propriétés recherchées).

Etudiants de deuxième année

Détermination des contraintes résiduelles développées en surface des matériaux métalliques
(Effets des procédés industriels de soudage, grenaillage, trempe, usinage ...)

Des enseignements spécifiques sur les procédés de soudage, et la caractérisation des pièces soudées, ont également été donnés, lors des enseignements réalisés sur les procédés industriels.

Mines ParisTech & Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis, en tant que Maître Assistant

- Mastère Spécialisé *Digital Materials and Advanced Processes Modelling* (MaPMod) :
 - Cours 'Materials Physics' (~ 15 h / an)
 - Cours 'Diffusive Phase Transformations' (~ 12 h / an)
- Formation doctorale 1^{re} Année (CEMEF) :
 - Encadrement d'étudiants en Travaux Dirigés *Mécanique des Milieux Continus* (CMHT)
 - Formation élargie à Polytech Inum, Master M2R Physique, Master M2R Mécanique Numérique SeaTech de l'Université de Nice, Mastère MaPMod et première année de Doctorat (~ 8 h / an)
- Cours Matériaux pour l'Ingénieur (MPI) (1A) :
 - Responsable de Petite Classe pour des groupes d'étudiants de première année (~15 h)
 - Suivi de groupes pour des sessions Poster (~6 h) :
- Enseignement Spécialisé 'Impression 3D métallique' :
 - Cours Modélisation et Simulation Numérique des Procédés FA (~ 2 h)
 - Organisation et encadrement de mini-projets étudiants (~9 h)
- Participation régulière aux jurys d'évaluation CEMEF :
 - Étudiants de doctorat (1^{re} année / travail bibliographique et bilan activité 1A)
 - Étudiants du précédent Mastère Compumech (Jury final / Formation 2010-2011) et de l'actuel Mastère MaPMod (Jury Intermédiaire)

Enseignement :		Implication :
Mastère Spécialisé MaPMod et Formation Doctorale (CEMEF)		27 h
Etudiants Ingénieur Ecole des Mines	1A	21 h
	2A	11 h

Activité d'enseignement Mines Paris – PSL \ Implications annuelles récentes

ii. Stage et suivi d'étudiants

Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille, en tant que Maître de Conférences

Dans le cadre de la formation spécialisée 'Transports Terrestres' (TETRA), destinée aux étudiants de troisième année de Arts et Métiers ParisTech, et réalisée au centre de Lille, j'ai proposé différents sujets en stage diplômant, sur plusieurs années, qui m'ont conduit à réaliser de nombreux encadrements d'étudiants. Les projets ont porté, en particulier, sur le développement d'un montage d'essai et la proposition d'une méthodologie fiable, caractérisant les propriétés mécaniques des aciers innovants à travers des essais de Small Punch Test, croisés avec des essais de dureté. Ces projets se sont réalisés en partenariat avec ArcelorMittal Maizières (Centre de recherche de ArcelorMittal – Maizières-lès-Metz).

D'autres stages ont également été proposés, dans le cadre des formations de l'Université de Lille (USTL) (développement d'essais de corrosion fiabilisés) et du master E2D2 (analyse MEB et reconstruction de microstructure virtuelles sur matériaux SMC).

Mines ParisTech & Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis, en tant que Maître Assistant

Les stages proposés et développés dans mon établissement actuel se sont, en particulier, réalisés dans le cadre de la formation de Mastère spécialisé MaPMod, à travers les projets industriels obtenus (financements CNIM, Industeel, Safran, Ponticelli ...). Les étudiants ont pris part à une formation en Matériaux, Procédés et Modélisation de six mois, suivie par une période équivalente de stage au CEMEF, sur un projet industriel spécifique.

Cependant, d'autres stages ont, également, été organisés, en particulier pour développer des projets plus amont, que notre équipe 2MS souhaitait investiguer, notamment sur la modélisation des transformations de phase par approche en 'Suivi de Front' dans le cadre de l'outil PhysalurgY. Des formations spécifiques intéressantes et de bon niveau ont été identifiées, telle que l'Enseirb-Matmeca (Bordeaux) pour développer ces activités.

Ce bilan est détaillé, plus complètement, ci-après, en complément des encadrements réalisés des étudiants doctorants et des post-doctorants de notre équipe.

1.3 Activité d'encadrement

Statut :		Encadrement :
Projet formation Elèves	1A	6
Stage Ingénieur	2A	2
	3A	7
Stage Master	M2	6
Corps des Mines		2
Mastère spécialisé (MaPMod)		9
Doctorant	<i>Soutenus</i>	16
	<i>En cours</i>	4
Post-doctorant		2

Activité d'encadrement
Arts et Métiers Paris Tech, Mines ParisTech et Mines Paris – PSL

i. Post-doctorants

Marie Bedel :

Caractérisation expérimentale de gouttes solidifiées rapidement et de sprays d'alliages aluminium-cuivre-scandium par radiation neutronique et rayonnements X synchrotron.

Equipe Microstructures de croissance auto-organisées / Laboratoire IM2NP – Université Aix-Marseille & Equipe Structures et Propriétés dans les Procédés de Solidification (SP2) / CEMEF – Mines ParisTech (Février 2014 – Août 2015)

Oriane Senninger :

Modélisation des structures de solidification eutectiques dans les alliages multicomposés par approche couplée thermodynamique.

Equipe Structures et Propriétés dans les Procédés de Solidification (SP2) / CEMEF – Mines ParisTech (Février 2017 – Août 2018)

ii. Doctorants

► Soutenus :

Benaamer Bounichane : (taux d'encadrement de 25 %)

Nouvelles méthodes d'analyse des états de surface : de la caractérisation à la recherche de paramètres pertinents

Laboratoire Roberval – UTC, Septembre 2006 – Décembre 2009

Thèse de doctorat de l'UTC (Financement CETIM)

Compiègne, le 3 décembre 2009, *Directeur de Thèse : M. Bigerelle*

Adil Jarrah : *(taux d'encadrement de 25 %)*

Développement de méthodes statistiques et probabilistes en corrosion par piqûres pour l'estimation de la profondeur maximale : application à l'aluminium A5

Hautes études d'ingénieur (HEI), Février 2006 – Décembre 2009

Thèse de Doctorat Arts et Métiers ParisTech, en Mécanique et Matériaux (Bourse HEI)

Lille, le 8 décembre 2009, *Directeur de Thèse : A. Iost*

Zahra Khawaja : *(taux d'encadrement de 25 %)*

Analyse des états de surfaces en science des matériaux : Caractérisation multi-échelles par ondelette et détermination de l'anisotropie des surfaces

Laboratoire Roberval – UTC, Décembre 2009 – Décembre 2012

Thèse de Doctorat de l'UTC (Projet FONCRUG 3D – Région Picardie)

Compiègne, le 21 janvier 2014, *Directeur de thèse : M. Bigerelle*

Olivier Desmaison : *(taux d'encadrement de 30 %)*

Modélisation numérique d'un procédé de soudage hybride arc / laser en approche Level Set : application au soudage multi-passes de tôles d'acier de forte épaisseur

CEMEF, Septembre 2010 – Septembre 2013

Thèse de Doctorat Mines ParisTech (Projet ANR SISHYFE)

Sophia Antipolis, le 16 décembre 2013, *Directeur de thèse : M. Bellet*

Shijia Chen : *(taux d'encadrement de 50 %)*

Three dimensional Cellular Automaton-Finite Element (CAFE) modeling for the grain structures development in Gas Tungsten / Metal Arc Welding processes

CEMEF, Mai 2011 – Mai 2014

Thèse de Doctorat Mines ParisTech (China Scholarship Council – CSC)

Sophia Antipolis, le 4 juillet 2014, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Valentine Legrand : *(taux d'encadrement de 70 %)*

Modélisation des processus de précipitation et prédictions mécaniques résultantes dans les alliages d'aluminium à durcissement structural – Application au soudage par Friction Malaxage de tôles AA2024

CEMEF, Octobre 2012 – Décembre 2015

Thèse de Doctorat Mines ParisTech

(Chaire 'Matériaux pour l'aéronautique et le nucléaire' Daher \ Mines Paris \ Mines Nantes)

Sophia Antipolis, le 8 décembre 2015, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Qiang Chen : *(taux d'encadrement de 30 %)*

Thermomechanical numerical modeling of additive manufacturing by selective laser melting of powder bed - Application to ceramic materials

CEMEF, Octobre 2014 – Avril 2018

Thèse de Doctorat PSL (Financement CARNOT, Projet CEFALE),

Sophia Antipolis, le 10 Avril 2018, *Directeurs de thèse : M. Bellet, Ch.-A. Gandin*

Romain Fleurisson : *(taux d'encadrement de 50 %)*

Modélisation multi-échelle parallélisée pour la prédiction de structures de grains dendritiques couplant les éléments finis, un automate cellulaire et un réseau de paraboles

CEMEF, Octobre 2015 – Septembre 2018

Thèse de Doctorat PSL (Projet ESA-MAP CETSOL),

Sophia Antipolis, le 26 Aout 2019, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Adrian Pineau : *(taux d'encadrement de 50 %)*

Modélisation 3D de structures de grains par une approche automate cellulaire. Application à la compétition de croissance dendritique et à la cristallisation du silicium polycristallin

CEMEF, Mars 2016 – Février 2019

Thèse de Doctorat PSL (Projet ANR CRYALID),

Sophia Antipolis, le 21 Novembre 2019, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Shaojie Zhang : *(taux d'encadrement de 30 %)*

Numerical simulation of mechanical interactions between liquid and solid phases in solidification processes

CEMEF, Octobre 2016 – Septembre 2019

Thèse de Doctorat PSL (Projet ESA – CCEMLCC),

Sophia Antipolis, le 25 Février 2020, *Directeurs de thèse : Ch.-A. Gandin, M. Bellet*

Hanadi Ettroudi : *(taux d'encadrement de 30 %)*

Modélisation numérique multi-échelle des structures de solidification, de la macroségrégation et de la Transition Colonnaire-Equiaxe

CEMEF, Octobre 2016 – Septembre 2019

Thèse de Doctorat PSL (Projet FUI SOFT-DEFIS),

Sophia Antipolis, le 1er Juillet 2021, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Vincent Maguin : *(taux d'encadrement de 50 %)*

Simulation multiphysique de la macroségrégation et de la formation des freckles lors de la solidification d'aubes de turbines monocristallines

CEMEF, Octobre 2016 – Septembre 2019

Thèse de Doctorat PSL (Contrat CIFRE SAFRAN \ PFX – Projet 'Freckles'),

Sophia Antipolis, le 16 Décembre 2020, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Alexis Queva : *(taux d'encadrement de 50 %)*

Simulation numérique multiphysique du procédé de fusion laser de lit de poudre : Application aux alliages métalliques d'intérêt aéronautique

CEMEF, Octobre 2017 – Septembre 2020

Thèse de Doctorat PSL (Contrat CIFRE SAFRAN),

Sophia Antipolis, le 19 Juillet 2021, *Directeur de thèse : M. Bellet*

Chengdan Xue : (*taux d'encadrement de 20 %*)

Modeling of Grain Structure and Hot Cracking for Arc Welding Processes

CEMEF, Octobre 2018 – Septembre 2021

Thèse de Doctorat PSL (Projet ANR NEMESIS),

Sophia Antipolis, le 15 Mars 2022, *Directeurs de thèse : Ch.-A. Gandin, M. Bellet*

Lucas Ravix : (*taux d'encadrement de 25 %*)

Maîtrise du procédé WAAM - Phénomènes physique et modélisation

CEMEF, Octobre 2018 – Septembre 2021

Thèse de Doctorat PSL (Projet ANR MACCADAM),

Sophia Antipolis, le 2 Septembre 2022, *Directeurs de thèse : Ch.-A. Gandin, M. Bellet*

Théophile Camus : (*taux d'encadrement de 25 %*)

Modélisation des microstructures générées en fabrication additive par procédé LPBF d'un alliage base nickel

CEMEF, Novembre 2019 – Juin 2023

Thèse de Doctorat PSL (Contrat CIFRE CETIM),

Sophia Antipolis, le 23 Mai 2023, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

► **En cours :**

Paul Martin : (*taux d'encadrement de 30 %*)

Prédiction de la fissuration à chaud pour des superalliages base nickel mis en forme par LPBF

CEMEF, Octobre 2021 – Septembre 2024

Thèse de doctorat PSL (Contrat CIFRE SAFRAN – Projet NILS),

Soutenance prévue fin 2024, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Zichen Kong : (*taux d'encadrement de 20 %*)

Fabrication additive laser / fil : simulation multiphysique du procédé - CFD et microstructure

CEMEF, Novembre 2022 – Octobre 2025

Thèse de doctorat PSL (Projet ANR COLUMBO),

Soutenance prévue fin 2025, *Directeur de thèse : Ch.-A. Gandin*

Sylvain Ducottet : (*taux d'encadrement de 25 %*)

Fabrication additive LPBF : simulation numérique de la précipitation dans les superalliages

CEMEF, Octobre 2023 – Septembre 2026

Thèse de Doctorat PSL (Contrat CIFRE SAFRAN – Projet NILS),

Soutenance prévue fin 2026, *Directeurs de thèse : M. Bellet, Ch.-A. Gandin*

Racha Hammoud : (*taux d'encadrement de 25 %*)

Sélection des microstructures de solidification

CEMEF, Octobre 2023 – Septembre 2026

Thèse de Doctorat PSL (Contrat doctoral Mines Paris PSL),

Soutenance prévue fin 2026, *Directeur de thèse : M. Bellet*

iii. Mastères Spécialisés MaPMod

(co-encadrement réalisé avec les enseignants-chercheurs de l'équipe 2MS - CEMEF)

Adrien Blazy : *Optimisation du procédé de soudage par faisceau d'électrons*, CNIM – CEMEF, Mines ParisTech (Octobre 2012 – Septembre 2013)

Elena Vakhitova : *Metallurgical evolution in superaustenitic steel (UR28) during solidification processing*, Industeel (site du Creusot) – CEMEF, Mines ParisTech (Octobre 2014 – Septembre 2015)

Mehdi Jebali : *Thermo-hydraulic modeling of Laser Beam Melting (LBM) process: Application to IN738 Alloy*, SAFRAN – CEMEF, Mines Paris – PSL (Octobre 2018 – Septembre 2019)

Iliasse Karroumi : *Simulation du procédé de fusion laser - Mise en œuvre d'un acier à outil sensible à la fissuration à chaud*, CETIM – CEMEF, Mines Paris – PSL (Octobre 2018 – Septembre 2019)

Houssam Bekkis : *Modeling of eutectic growth using thermodynamic coupling*, CEMEF, Mines Paris – PSL (Novembre 2020 – Octobre 2021)

Anas Rassane : *Numerical modeling of orbital TIG welding process*, Ponticelli – CEMEF, Mines Paris – PSL (Novembre 2021 – Octobre 2022)

Mourad Elayeb : *Numerical chaining between finite element multiphysics simulations* (Projet FE-MULTI), Safran PFX – CEMEF, Mines Paris – PSL (Octobre 2023 – Septembre 2024)

Mohamed Ennaki : *Modelling of rapid solidification paths* (Projet PY-PATH), Safran Additive Manufacturing (SAMC) – CEMEF, Mines Paris – PSL (Octobre 2023 – Septembre 2024)

Natalia Rojas Londoño : *Kinetics of phase transformations in welded steels* (Projet KIFE), Arcelor Mittal Montataire – CEMEF, Mines Paris – PSL (Octobre 2023 – Septembre 2024)

iv. Projets de Master, Stages de formation ingénieur

► **Au niveau d'Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille :**

• **Projets ingénieur 1A :**

- *Projet de recherche d'UEC 'Initiation à la recherche' – Arts et Métiers ParisTech :*

En partenariat avec le centre de recherche technique de Belchamp–Montbéliard de PSA :

Groupe de 6 étudiants : *Caractérisation et intégrité des revêtements de type Diamond Like Carbon (DLC), appliqués au domaine automobile*

• **Projets ingénieur 3A :**

- *Projet de fin d'étude ingénieur dans l'axe Tetra (Transports terrestres) :*

En partenariat avec le Centre de Recherche ArcelorMittal Maizières :

Florian Baratto : *Développement d'une installation de Punch-Test pour la caractérisation des aciers automobiles* (Septembre 2007 – Juin 2008)

Gaétan Starzyk : *Mise en place d'une démarche pour la détermination, par essais de punch-test, des propriétés mécaniques d'aciers pour l'automobile* (Septembre 2007 – Juin 2008)

Nicolas Charoy : *Détermination des propriétés mécaniques d'aciers innovants pour l'automobile : essais et fiabilité* (Septembre 2009 – Janvier 2010)

Marc Moura : *Détermination des lois de comportement des aciers innovants pour l'automobile : Essais croisés et Pertinence des paramètres* (Septembre 2010 – Janvier 2011)

• **Master M2 :**

- *Projet de Stage M2 Génie Civil – USTL*

Ziad Iman : *Détermination de la profondeur maximale des piqûres de corrosion – Application aux tôles d'aluminium* (Mars 2008 – Juillet 2008)

- *Projet de Stage M2 Matériaux, Procédés, Textile – ENSAIT*

Dorothée Berquet : *Composites à renforts non-tissés à base de fibres végétales* (Mars 2008 – Aout 2008)

- *Projet de Master M2 E2D2 (Energie Electrique et Développement Durable) :*

En partenariat avec la société 'Poudres Métalliques du Québec' (QMP)
(Productrice de matériaux magnétiques composites SMC)

Iñigo Capellán Pérez : *Reconstruction de la loi de comportement magnétique macroscopique d'un SMC (Soft Magnetic Composite) à partir d'imagerie en microscope électronique* (Septembre 2008 – Juin 2009)

► **Au niveau de Mines ParisTech & Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis :**

• **Stages étudiants 2A :**

Rémi Lecardonnel : *Modélisation de la diffusion dans les alliages métalliques multicomposés*, en partenariat avec le Centre des Matériaux d'Evry (Mines ParisTech, Site d'Evry), stage de deuxième année de l'Enseirb-Matmeca (Juin – Septembre 2015)

Vincent Le Maout : *Modélisation des processus de solidification par méthodes de suivi de front Application aux alliages métalliques industriels*, stage de deuxième année de l'Enseirb-Matmeca (Mai – Septembre 2016)

• **Stages Ingénieur 3A :**

Adrien Blazy : *Soudage par faisceau d'électrons des alliages d'aluminium - Etude métallurgique des défauts*, CNIM – CEMEF Mines ParisTech, stage Ingénieur Polytech'Paris - UPMC, Spécialité Matériaux (Avril – Septembre 2012)

Grégoire Dumas : *Modélisation de la solidification dans les superalliages base-nickel pour les nouvelles aubes de turbines haute-pressure*, en partenariat avec Safran, stage de troisième année de l'Ecole Polytechnique (Mars – Aout 2016)

Louis Zolla : *Mise en place d'un procédé END basé sur la méthode d'imagerie ultrasonore TFM*, Stage d'Option Mines de Paris / Mécanique et Matériaux, EDF (Janvier – Juillet 2018)

• **Corps des Mines :**

Gaëtan Lafforgue-Marmet, Antoine Berthier : *Modélisation du développement des microstructures en soudage TIG - Validation des modèles de croissance des grains dendritiques*, Stage du Corps des Mines, Projet PESTO, Mines ParisTech, Sophia Antipolis (Octobre – Novembre 2016)

• **Master M2 :**

Carole Sarkis : *Modélisation numérique de la croissance des grains en soudage dans la zone affectée thermiquement*, stage Ingénieur Université de Rennes I, Master II de Mathématiques - UPMC, spécialité matériaux (Avril – Septembre 2012)

Anas Rassane : *Simulation du procédé LPBF à l'échelle mésoscopique - Analyse thermique des dépôts et cordons*, Double diplôme Master Arts et Métiers Bordeaux – Ingénieur ENSAM Meknès (Avril – Septembre 2021), Soutenance le 3 Septembre 2021

Israe Bentaleb : *Modélisation de la formation de défaut de manque de fusion en soudage TIG orbital*, Stage, Double diplôme Master Arts et Métiers Bordeaux – Ingénieur ENSAM Meknès (Mars – Septembre 2023), Soutenance le 4 Septembre 2023

1.4 Responsabilités administratives

○ Conseil, représentation et animation

Au niveau d'Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille :

- Membre suppléant nommé du Conseil de Centre de Lille de 'Arts et Métiers Paris Tech' et participation régulière (~ 4 réunions / an) au conseil, en charge des actions de développements du centre
- Représentant nommé des enseignants du Centre de Lille au Groupe de Promotion des Arts et Métiers (GPAM) et organisation des manifestations internes et externes de promotion de l'établissement (Septembre 2006 – Juin 2009)

Au niveau de Mines ParisTech & Mines Paris – PSL :

- Animateur du Pôle Alliages Métalliques (PAM) créé en mars 2014, et regroupant les groupes SP2, TMP et MSR du CEMEF. Organisation régulière des réunions des permanents et des réunions générales (~ 4 réunions / an) pour la présentation des activités de recherche des stagiaires, mastères, doctorants et post-doctorants des trois équipes (*Animateur sur la période 2014 - 2021*)
- Membre du conseil du département 'Mécanique et Matériaux' de l'Ecole des Mines de Paris – PSL (2017 – 2024)

○ Pédagogique

Au niveau d'Arts et Métiers ParisTech – Centre de Lille :

- Responsable de la discipline 'Matériaux' des enseignements de première et seconde année du Centre de Lille d'Arts et Métiers Paris Tech (Unité d'enseignement disciplinaire (UED) et transversaux)
- Responsable de l'Unité d'Enseignement Capacité (UEC) 'Interactions Matériaux Procédés Processus' (IMP) de première année

Au niveau du CEMEF – Mines ParisTech et Mines Paris - PSL :

- Responsable du cours 'Materials Physics' associé à la formation doctorale CEMEF (1A) et à la partie Enseignement du Mastère Spécialisé 'MaPMod'
- Responsable du cours d'Enseignement Spécialisé (ES) de deuxième Année 'Impression 3D métallique' :
- Organisation des enseignements (24 h) réalisés par des enseignants du CEMEF et du CMAT autour de la présentation des Procédés Additifs industriels, notamment LPBF et Cold Spray
- Organisation de séances de Mini-Projets au CMAT (Evry)

1.5 Responsabilités scientifiques

i. Montages de projets et contrats

- Porteur du projet de recherche ANR NEMESIS, sélectionné lors de l'AAPG 2017 (48 Mois – 671 k€) : *La métallurgie numérique au service des procédés de soudage à l'arc : Des matériaux virtuels pour maîtriser les défauts*
- Responsable scientifique pour les activités CEMEF des projets de recherche ANR :
 - o MACCADAM, sélectionné lors de l'AAPG 2017 (48 Mois – 710 k€) : *Matériaux à caractéristiques contrôlées élaborés par fabrication additive arc-métal* (port. F. Deschaux-Beaume, LMGC)
 - o CUMBO, sélectionné lors de l'AAPG 2021 (48 Mois – 794 k€) : *Caractérisation et contrôlabilité multi-échelles par ultrasons-laser des composants WLAM : vers une surveillance en ligne basée sur la physique et augmentée par l'apprentissage automatique* (port. J. Laurent, CEA LIST)
 - o FALSTAFF, sélectionné lors de l'AAPG 2022 (48 Mois – 796 k€) : *Fabrication additive d'alliages magnétiques à faibles pertes par feuillette 3D* (port. S. Bouvier, Université de Technologie de Compiègne)
- Participation active aux projets ANR :
 - o Sishyfe (09-MAPR-0019) : *Développement d'un outil numérique prédictif : Application au cas de la simulation du soudage hybride sur épaisseurs moyenne à forte* (port. P. Sallamand, ICB)
 - o Crysalid (AAPG 2014, 42 mois) : *Cristallisation du Silicium à partir de germes, effet des Impuretés Légères et des Défauts* (port. N. Mangelinck-Noël, IM2NP)
 - o TheCap (AAPG 2022, 60 mois) : *Thermochemistry of ingot Casting Powders* (port. Ch. A. Gandin, CEMEF)
- Développement de la librairie PhysalurgY (équipe 2MS) basée sur les couplages thermodynamiques Thermo-Calc (Code déposé auprès de l'APP par Armines) (<https://physalurgy.cemef.minesparis.psl.eu>)

ii. Commissions savantes

Je suis, ou ai été, actif dans les différents groupes et commissions suivantes :

- GDR (Groupement de Recherche) Solidification des Alliages Métalliques (SAM)
- GDR Thermodynamique des Matériaux à Haute Température (TherMatHT)
- et Association Française de Thermodynamique des Matériaux (AFTherMat)
- GDR Alliages Métalliques par/pour la fabrication additive (ALMA)
- GIS (Groupement d'intérêt scientifique) Hautes énergies en fabrication additive (HEAD)
- Réseau Nationale de la Métallurgie (RNM)
- Commission Soudage par Friction Malaxage (FSW) commune à l'AFM et la SF2M
- Commission Soudage de l'AFM (Présentations régulières des activités)
- Association Française du Titane, POLE EMC2

1.6 Expertises scientifiques

i. Participations à des comités de suivi de thèse (CSI)

Kevin Marchais :

Analyse numérique de l'étalabilité d'une poudre métallique : Application au procédé de fabrication additive Laser Beam Melting, comité le 6 Juillet 2021

Doctorat Paris HESAM, Directeur de thèse : I. Iordanoff

Nathan Haglon :

Contribution à l'étude de la soudabilité, par faisceau Laser, d'alliages métalliques complexes élaborés par la métallurgie des poudres dans le but d'assembler les alliages de Titane et l'acier inoxydable 316L, comité le 11 Juillet 2023

Doctorat Université de Bourgogne - Franche-Comté, Directeurs : R. Bolot et I. Tomashchuk

ii. Participations à des jurys de thèse

Alexis Chiocca (Examineur) :

Etude de l'influence des écoulements dans le bain de fusion sur les mécanismes de solidification en soudage sur l'alliage Cu30Ni,

Soutenue le 24 Juin 2016

Laboratoire de Mécanique et de Génie Civil (LMGC) - Université de Montpellier,

Directeurs de thèse : Pr. Frédéric Deschaux-Beaume et Cyril Bordreuil

Quentin Levices (Examineur) :

Étude de l'influence des éléments d'addition Si, Mo, Cr et des vitesses de refroidissement sur les microstructures et les propriétés mécaniques de fontes GS à haute teneur en silicium,

Soutenue le 14 Décembre 2021, (Financement PTP Industry)

Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle (LaMcube) - Ecole Centrale Lille,

Spécialité : mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces,

Directeur de thèse : Pr. Denis Najjar

iii. Activités de relectures

Je réalise régulièrement des relectures d'articles et de proceedings pour des conférences. En particulier, j'ai eu l'occasion de fournir une évaluation dans les cadres suivants :

Conférences : MCWASP La métallurgie, quel avenir !

Journaux :

Acta Materialia	Journal of Manufacturing Processes
Additive Manufacturing	Materials
Applied Mathematical Modelling	Materials Design
Applied Sciences	Materials Research Express
Computational Materials Science	Metallurgical and Materials Transactions A
International Journal of Heat and Mass Transfer	Metallurgical Research & Technology
International Journal of Material Forming	Metals
Journal of Crystal Growth	Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering

J'ai également été sollicité pour expertise par l'ANRT, dans le cadre de deux dossiers scientifiques associés à des projets CIFRES.

1.7 Collaborations internationales

Un certain nombre de collaborations académiques, réalisées à l'échelle internationale, et ayant donné lieu à différentes communications, doivent, également, être rappelées. En particulier, on pourra retenir les travaux développés avec les équipes suivantes :

- ▶ Equipe du Pr. P. Voorhees (Northwestern University, Evanston, Illinois, États-Unis) :
 - Modèles de croissance des interfaces en situation hors-équilibre, dans le cadre de l'étude des mécanismes de la solidification rapide
 - Revue critique des modèles rapportés dans la littérature et proposition de nouvelles approches, considérant les processus de diffusion interfaciaux
 - Nouvelles méthodologies d'estimation des compositions interfaciales, couplées aux calculs thermodynamiques (logiciel Thermo-Calc).
 - Applications aux alliages modèles (Ag-Cu) et industriels (316L, IN718)
 - Bilan des activités¹ :
 - 3 articles internationaux [RA42, RA44, RA46], et prix du 'Best Paper Award' du journal CALPHAD, décerné en 2023 [RA42]
 - 9 conférences internationales : [CI81, CI88, CI90, CI91, CI93, CI98, CI100, CI101, CI102]
- ▶ Equipe du Pr. A. Karma (Northeastern University, Boston, Massachusetts, États-Unis) :
 - Comparaison critique de modèle de croissance CAFE avec les approches de résolution par méthode en champs de phase, applications sur des alliages modèles
 - Collaboration parallèle avec D. Tourret (IMDEA Materials Institute, Madrid, Espagne)
 - Détermination des désorientations de joints de grains obtenues par les deux méthodologies pour des compétitions de croissance entre grains divergents\convergeants
 - Recherche de solutions analytiques aux expressions des angles de désorientations
 - Etude de l'effet des tailles de cellules CA sur les évolutions de ces désorientations, notamment en croissance divergente
 - Détermination des tailles de cellules pertinentes, liées à la distance entre bras dendritiques secondaires libres de leur développement, au regard des calculs en champs de phase
 - Recherche de lois d'échelle, pour les distances entre branches secondaires, le long des bras primaires en croissance libre
 - Bilan des activités :
 - 2 articles internationaux [RA29, RA40]
 - 2 conférences internationales : [CI71, CI82]

¹ Les références des communications se rapportent au chapitre suivant '2 - Production Scientifique'.

- Equipe du Pr. M. Apel (Access, Aix-la-Chapelle, Allemagne)
 - Séjour de deux semaines (10 / 21 Novembre 2014) à Access
 - Découverte et exploitation des outils de calcul en champs de phase couplés aux calculs Thermo-Calc (outil Micress®, *The Microstructure Evolution Simulation Software*)
 - Discussion, échange et présentation mutuelle des activités de recherche dans le domaine de la simulation micro- des processus de solidification
- Bilan des activités :
 - 1 conférence internationale : [CI32]
 - Contribution, avec Ch.-A. Gandin, à l'ouvrage 'Handbook of Software Solutions for ICME', dirigé par G. J. Schmitz, pour la section 3.5.6 Cellular Automaton Methods [OI1]

Chapitre 2

—

Production Scientifique

« Ecrire, et ne pas publier,
est un état bien agréable. »

*Service inutile,
Henry de Montherlant, 1935*

Table des matières

2.1	Publications scientifiques avec comité de lecture	27
i.	Rang A [RA]	27
ii.	Rang B [RB]	31
2.2	Conférences et Communications scientifiques	32
i.	Conférences internationales [CI]	32
ii.	Conférences nationales [CN]	42
iii.	Communications nationales [CO]	46
2.3	Contributions aux ouvrages scientifiques	51
i.	Ouvrages à diffusion internationale [OI]	51
ii.	Ouvrages à diffusion nationale [ON]	51
2.4	Séminaires	52
i.	Séminaires de recherche [SR]	52
ii.	Séminaires d'enseignement [SE]	53
2.5	Vulgarisation scientifique	54
i.	Publication [VP]	54
ii.	Conférence [VC]	54
iii.	Média [VM]	54

Indicateur :	Nombre :
Publications scientifiques avec comité de lecture	
Rang A [RA]	46
Rang B [RB]	3
Conférences et Communications scientifiques	
Conférences internationales [CI]	102
Conférences nationales [CN]	32
Communications nationales [CO]	44
Contributions aux ouvrages scientifiques	
Ouvrages à diffusion internationale [OI]	2
Ouvrages à diffusion nationale [ON]	1
Séminaires	
Séminaires de recherche [SR]	10
Séminaires d'enseignement [SE]	7
Vulgarisation scientifique	
Publication [VP]	1
Conférence [VC]	1
Média [VM]	1

Bilan quantitatif de la production scientifique

La liste détaillée des publications, conférences et communications scientifiques est accessible :

Sur le site HAL : <https://cv.hal.science/gildas-guillemot>

Sur le site Orcid : <https://orcid.org/0000-0002-3337-3917>

Sur le site Scopus : <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=14064868200>

Sur le site 'Google Scholar' : <https://scholar.google.fr/citations?user=JuCZDJcAAAAJ>

Les noms des étudiants encadrés ont été soulignés dans les références indiquées ci-après.

2.1 Publications scientifiques avec comité de lecture

i. Rang A [RA]

- [1] S. Barrat, G. Guillemot, L. Patte, E. Bauer-Grosse, Three-dimensional diamond growth film simulations : correlations between nucleation and surface parameters, **Diamond and Related Materials** 8, 1999, 150-154
- [2] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, B. Appolaire, N. T. Niane, Boundary layer correlation for dendrite tip growth with fluid flow, **Materials Science and Engineering A** 342, 2003, 44-50
[+Erratum in **Materials Science and Engineering A** 354, 2003, 387]
- [3] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, R. Heringer, A New Cellular Automaton – Finite Element Coupling Scheme for Alloy Solidification, **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering** 12 (3), 2004, 545-556
- [4] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, Modeling of macrosegregation and solidification grains structures with a coupled cellular automaton – finite element model, **ISIJ International** 46, 2006, 880-895
- [5] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Interaction between single grain solidification and macrosegregation: Application of a cellular automaton - Finite element model, **Journal of Crystal Growth** 303 (1), 2007, 58-68
- [6] M.-N. Avettand-Fenoel, C. Cordier-Robert, G. Guillemot, F. Goodwin, J. Foct, Feature of solid-liquid metals reaction revealed by conversion electron Mössbauer spectrometry, **Hyperfine Interactions** 190 (N°1-3), 2009, 29-36
- [7] K. Rahmoun, A. Iost, V. Keryvin, G. Guillemot, N.E. Chabane Sari, A multilayer model for describing hardness variations of aged porous silicon low-dielectric-constant thin films, **Thin Solid Films** 518 (1), 2009, 213-221
- [8] G. Guillemot, A. Iost, D. Chicot, Comments on the paper “Modification of composite hardness models to incorporate indentation size effects in thin films”, D. Beegan, S. Chowdhury and M.T. Laugier, *Thin Solid Films* 516, 2008, 3813–3817, **Thin Solid Films** 518 (8), 2010, 2097-2101
- [9] A. Jarrah, J.-M. Nianga, A. Iost, G. Guillemot, D. Najjar, On the detection of corrosion pits interactions using two-dimensional spectral analysis, **Corrosion Science** 52 (2), 2010, 303-313
- [10] B. Tlili, N. Mustapha, C. Nouveau, Y. Benlatreche, G. Guillemot, M. Lambertin, Correlation between thermal properties and aluminum fractions in CrAlN layers deposited by PVD technique, **Vacuum** 84 (9), 2010, 1067-1074
- [11] A. Jarrah, M. Bigerelle, G. Guillemot, D. Najjar, A. Iost, J.-M. Nianga, A generic statistical methodology to predict the maximum pit depth of a localized corrosion process, **Corrosion Science** 53 (8), 2011, 2453-2467
- [12] A. Iost, G. Guillemot, Y. Rudermann, M. Bigerelle, A comparison of models for predicting the true hardness of thin films, **Thin Solid Films** 524, 2012, 229-237

- [13] M. Bigerelle, G. Guillemot, Z. Khawaja, M. El Mansori, J. Antoni, Relevance of Wavelet Shape Selection in a Complex Signal, **Mechanical Systems and Signal Processing** 41, 2013, 14-33
- [14] Ch.-A. Gandin, T. Carozzani, H. Digonnet, S. Chen, G. Guillemot, Direct Modeling of Structures and Segregations Up to Industrial Casting Scales, **JOM** (The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society - TMS) 65 (9), 2013, 1122 – 1130
- [15] G. Guillemot, M. Bigerelle, Z. Khawaja, 3D Parameter to Quantify the Anisotropy Measurement of Periodic Structures on Rough Surfaces, **Scanning** 36, 2014, 127-133
- [16] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, 3D Coupled Cellular Automaton (CA)–Finite Element (FE) Modeling for Solidification Grain Structures in Gas Tungsten Arc Welding (GTAW), **ISIJ International** 54, 2014, N° 2, 401-407
- [17] O. Desmaison, M. Bellet, G. Guillemot, A Level Set Approach for the simulation of the Multipass Hybrid Laser / GMA Welding Process, **Computational Materials Science** 91, 2014, 240-250
- [18] S. Tabibian, E. Charkaluk, A. Constantinescu, G. Guillemot, F. Szymtyka, Influence of process-induced microstructure on hardness of two Al-Si alloys, **Materials Science and Engineering A** 646, 2015, 190-200
- [19] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Analytical model for equiaxed globular solidification in multicomponent alloys, **Acta Materialia** 97, 2015, 419-434 [+Corrigendum in **Acta Materialia** 122, 2017, 513-514]
- [20] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional cellular automaton-finite element modeling of solidification grain structures for arc-welding processes, **Acta Materialia** 115, 2016, 448-467
- [21] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Three-dimensional finite element thermomechanical modeling of additive manufacturing by selective laser melting for ceramic materials, **Additive Manufacturing** 16, 2017, 124-137
- [22] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, An analytical model with interaction between species for growth and dissolution of precipitates, **Acta Materialia** 134, 2017, 375-393
- [23] G. Zimmermann, L. Sturz, H. Nguyen-Thi, N. Mangelinck-Noël, YZ Li, Ch.-A. Gandin, R. Fleurisson, G. Guillemot, S. Mcfadden, R. Patrick Mooney, P. Voorhees, A. Roósz, A. Rónaföldi, C. Beckermann, A. Karma, C.-H. Chen, N. Warnken, A. Saad, G.-U. Grün, M. Grohn, I. Poitault, T. Pehl, I. Nagy, D. Todt, O. Minster, W. Sillekens, Columnar and Equiaxed Solidification of Al-7 wt.% Si Alloys in Reduced Gravity in the Framework of the CETSOL Project, **JOM** 69-8, 2017, 1269-1279
- [24] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bernacki, M. Bellet, Macroscopic thermal finite element modelling of additive metal manufacturing by selective laser melting process, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering** 331, 2018, 514-535

- [25] B. Tlili, C. Nouveau, G. Guillemot, A. Besnard, A. Barkaoui, Investigation of the Effect of Residual Stress Gradient on the Wear Behavior of PVD Thin Films, **Journal of Materials Engineering and Performance** 27 (2), 2018, 457–470
- [26] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical modelling of the impact of energy distribution and Marangoni surface tension on track shape in selective laser melting of ceramic material, **Additive Manufacturing** 21, 2018, 713-723
- [27] Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical modelling of fluid and solid thermomechanics in additive manufacturing by powder-bed fusion: Continuum and level set formulation applied to track- and part-scale simulations, Computational methods in welding and additive manufacturing / Simulation numérique des procédés de soudage et de fabrication additive, **Comptes Rendus Mecanique** 346 (11), 2018, 1055-1071
- [28] O. Senninger, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modeling of eutectic growth kinetics with thermodynamic couplings, **Acta Materialia** 161, 2018, 110-126
- [29] A. Pineau, G. Guillemot, D. Tournet, A. Karma, Ch.-A. Gandin, Growth competition between columnar dendritic grains – Cellular automaton versus phase field modeling, **Acta Materialia** 155, 2018, 286-301
- [30] L. Moniz, Q. Chen, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, C. Colin, J.-D. Bartout, M.-H. Berger, Additive manufacturing of an oxide ceramic by laser beam melting—Comparison between finite element simulation and experimental results, **Journal of Materials Processing Technology** 270, 2019, 106-117
- [31] S. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, A partitioned two-step solution algorithm for concurrent fluid flow and stress–strain numerical simulation in solidification processes, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering** 356, 2019, 294-324
- [32] A. Pineau, G. Guillemot, G. Reinhart, G. Regula, N. Mangelinck-Noël, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional cellular automaton modeling of silicon crystallization with grains in twin relationships, **Acta Materialia** 191, 2020, 230-244
- [33] G. Reinhart, D. Grange, L. Abou-Khalil, N. Mangelinck-Noël, N.T. Niane, V. Maguin, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Nguyen-Thi, Impact of solute flow during directional solidification of a Ni-based alloy: In-situ and real-time X-radiography, **Acta Materialia** 194, 2020, 68-79
- [34] A. Queva, G. Guillemot, C. Moriconi, C. Metton, M. Bellet, Numerical study of the impact of vaporisation on melt pool dynamics in Laser Powder Bed Fusion - Application to IN718 and Ti–6Al–4V, **Additive Manufacturing** 35, 2020, 101249
- [35] D. Jacquin, G. Guillemot, A review of microstructural changes occurring during FSW in aluminium alloys and their modelling, **Journal of Materials Processing Technology** 288, 2021, 116706
- [36] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Morphological stability of spherical particles - Extension of the Mullins-Sekerka criteria to multi-component alloys under a non-stationary diffusive regime, **Acta Materialia** 205, 2021, 116539

- [37] D. Grange, A. Queva, G. Guillemot, M. Bellet, J.-D. Bartout, C. Colin, Effect of processing parameters during the laser beam melting of Inconel 738: Comparison between simulated and experimental melt pool shape, **Journal of Materials Processing Technology** 289, 2021, 116897
- [38] S. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, A Partitioned Solution Algorithm for Concurrent Computation of Stress–Strain and Fluid Flow in Continuous Casting Process, **Metallurgical and Materials Transactions B** 52 (2), 2021, 978–995
- [39] Y.A. Mayi, A. Queva, M. Dal, G. Guillemot, C. Metton, C. Moriconi, P. Peyre, M. Bellet, Multiphysics simulation of single pulse laser powder bed fusion: comparison of front capturing and front tracking methods, **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow** 32 (6), 2021, 2149-2176
- [40] E. Dorari, K. Ji, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, A. Karma, Growth competition between columnar dendritic grains – The role of microstructural length scales, **Acta Materialia** 223, 2022, 117395
- [41] C. Xue, N. Blanc, F. Soulié, C. Bordreuil, F. Deschaux-Beaume, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Structure and texture simulations in fusion welding processes – comparison with experimental data, **Materialia** 21, 2022, 101305
- [42] G. Guillemot, O. Senninger, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Thermodynamic coupling in the computation of dendrite growth kinetics for multicomponent alloys, **CALPHAD** 77, 2022, 102429, **Best Paper Award for papers published in the CALPHAD Journal (year 2023): <https://calphad.org/calphad-awards>**
- [43] R. Fleurisson, O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Hybrid Cellular Automaton - Parabolic Thick Needle model for equiaxed dendritic solidification, **Journal of Materials Science & Technology** 124, 2022, 26-40
- [44] C. A. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. W. Voorhees, The thermodynamics of non-equilibrium interfaces during phase transformations in concentrated multicomponent alloys, **Acta Materialia** 241, 2022, 118407
- [45] Th. Camus, D. Maisonnnette, O. Baulin, O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional modeling of solidification grain structures generated by laser powder bed fusion, **Materialia** 30, 2023, 101804
- [46] P. Martin, G. Guillemot, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Kinetic effects during the plane-front and dendritic solidification of multicomponent alloys, **Acta Materialia** 263, 2024, 119473

ii. Rang B [RB]

- [1] N. Hammouda, H. Chadli, G. Guillemot, K. Belmokre, The Corrosion Protection Behaviour of Zinc Rich Epoxy Paint in 3% NaCl Solution, **Advances in Chemical Engineering and Science** 1, 2011, 51-60
- [2] G. Guillemot, A. Iost, A. Van Gorp, S. Allain, Caractérisation des aciers innovants par essais mécaniques croisés, **Matériaux et Techniques** 99 (2), 2011, 227-238
- [3] S. Aissat, A. Iost, G. Guillemot, Y. Benarioua, M. Mechmeche, Characterization of mechanical properties by nanoindentation of a treatment of diffusion and a coating for the improvement wear resistance of low carbon steels [Caractérisation des propriétés mécaniques par nanoindentation d'un traitement de diffusion et d'un revêtement pour l'amélioration de la résistance à l'usure des aciers bas carbone, Proceedings Journées d'Etudes Nationales de Mécanique, JENM'2011, Ouargla. 07-08 Mars, 2011], **Mécanique et Industries** 12 (5), 2011, 379-387

2.2 Conférences et Communications scientifiques

i. Conférences internationales [CI]

- [1] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Stochastic Modelling of Columnar Solidification Grain Structures, in Computational Modelling and Simulation of Materials II, ed. P. Vincenzini, Techna srl., (2002) 239 – 250, "International Conference on Modern Materials & Technologies (CIMTEC) 3rd Forum on New Materials", Florence, Italy, 14-19 July 2002
- [2] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, R. Heringer, New Coupling Scheme for a Heat Flow Cellular Automaton – Finite Element Model Applied to Alloy Solidification, International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting (LMPC), Nancy, France, 21-24 September 2003
- [3] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, Modeling of Macrosegregation and Solidification Grain Structures with a Coupled Cellular Automaton – Finite Element Method, Solidification Processes and Microstructures : A Symposium in Honor of Prof. W. Kurz, 2004 TMS Annual Meeting, Charlotte, North Carolina, USA, 14-18 March 2004
- [4] Columnar-to-Equiaxed Transition in SOLidification Processing (CETSOL): a project of the European Space Agency - Microgravity Applications Promotion (ESAMAP) programme, Ch.-A. Gandin, B. Billia, G. Zimmermann, D. J. Browne, M.-D. Dupouy, G. Guillemot, H. Nguyen-Thi, N. Mangelinck, G. Reinhart, L. Sturz, S. Mc Fadden, J. Banaszek, Y. Fautrelle, K. Zaidat, A. Ciobanas, in Solidification and Gravity IV, Ed A Roósz, M. Rettenmayr, Z. Gácsi, Materials Science Forum 508 (2006) 393. Trans Tech Publ Ltd (Aedermannsdorf, CH) Solidification and Gravity 04 (Miskolc, HU) 6-9 September 2004
- [5] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, H. Combeau, Modelling of grain structure and segregation in casting, 150th ISIJ Meeting, High Temperature Processes, Recent advances in control of solidification structure, 28-30 September 2005, Hiroshima, Japan, Current advances in materials and processes (CAMP-ISIJ), Vol.18 (2005), N° 4, 884-885 (*Conférence invitée*)
- [6] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Influence of Macrosegregation on Developing Grain Structures: A Comparison of Predictions with Experimental Observations, Solidification Modelling and Microstructure Formation: A Symposium in Honor of Prof. John Hunt: Columnar to Equiaxed Transition, TMS Annual Meeting, San Antonio, TX, Etats-Unis, 14 Mars 2006 (*Conférence invitée*)
- [7] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Interactions between columnar solidification and segregation: A Comparison of the Predictions of the CAFE Model with In-situ observations, TMS Pub. 'Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP) XI', 307-314, 28 May-2 June 2006, Opio, France
- [8] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Modeling of solidification structures with a cellular automation method, 5th International Workshop on Modeling in Crystal Growth, 10-13 September 2006, Bamberg, Germany (*Conférence invitée*)

- [9] M.-N. Avettand-Fenoel, C. Cordier-Robert, G. Guillemot, F. Goodwin, J. Foct, Feature of solid-liquid metals reaction revealed by conversion electron Mössbauer spectrometry, Conférence ISIAME (International Symposium on the Industrial Applications of the Mössbauer Effect) 2008, Budapest - Hongrie, 17-22 August 2008
- [10] A. Jarrah, J.M Nianga, A. Iost, G. Guillemot, D. Najjar, Extreme Values Models for the estimation of the maximum depth in pitting corrosion: Simulations & Experiments, EUROCORR 2008, Edimbourg, Royaume-Uni, 7-11 September 2008
- [11] M. Bigerelle, B. Bounichane, G. Guillemot, K. Anselme, A new Multiscale Methodology to Characterize the Surface Morphological Properties according to their biological functionalities, International Conference on Bioengineering & Biomaterials, 18,19 & 20 March 2009, Meknes, Morocco
- [12] Z. Khawaja, G. Guillemot, M. El Mansori, M. Bigerelle, Pertinence du choix de l'ondelette pour caractériser et modéliser les surfaces abrasées (Relevance of the choice of wavelet to characterize and model the abraded surface), 21^e JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie), 2009, 5-6 mai 2009 – Compiègne – France– ‘Conception, Fabrication et Durabilité’, Presses des Mines, Collection Sciences de la matière, 151-158
- [13] G. Guillemot, M. Bigerelle, J. Antoni, K. Anselme, Order of surfaces and tool machining processes (Interaction outil-matière et ordre d'une surface), 21^e JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie) 2009, ‘Conception, Fabrication et Durabilité’, Presses des Mines, Collection Sciences de la matière, 141-150, 5-6 May 2009 – Compiègne – France
- [14] B. Bounichane, W. Jomaa, G. Guillemot, N. Ben Fredj, M. Bigerelle, Caractérisation Multi-Echelle de l'usinabilité de l'acier AISI 304L (Multi-scale characterization of machinability of steel AISI 304L), 21^e JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie) 2009, 5-6 May 2009 – Compiègne – France – ‘Conception, Fabrication et Durabilité’, Presses des Mines, Collection Sciences de la matière, (2012), 111-118
- [15] M. Bigerelle, A. Iost, T. Coorevits, H. Zahouani, K. Anselme, M. El Mansori, D. Najjar, G. Guillemot, B. Hagege, A. Jourani, P. Revel, P.E. Mazeran, B. Bounichane, A. Van Gorp, F. Hennebelle, A. Gautier, S. Gilgean, Un système expert d'analyse de surfaces en tribologie projet Fondation CETIM (A software analyses system for surface roughness analyses CETIM projet foundation), 21^e JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie) 2009, 5-6 Mai 2009 – Compiègne – France– ‘Conception, Fabrication et Durabilité’, Presses des Mines, Collection Sciences de la matière, 93-102
- [16] Z. Khawaja, G. Guillemot, M. El Mansori, M. Bigerelle, Pertinence du choix de l'ondelette pour caractériser et modéliser les surfaces abrasées, 22^e JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie) 2010, 27 et 28 May 2010, Albi, France
- [17] Z. Khawaja, G. Guillemot, P.-E. Mazeran, M. El Mansori, M. Bigerelle, The wavelet theory and the belt finishing process – Influence of the wavelet shape on the surface roughness parameter values, Advances in Materials and Processing Technologies (AMPT) 2010, 24-27 October 2010, Arts et Métiers ParisTech, Paris, France

- [18] Y. Benlatreche, C. Nouveau, R. Marchal, G. Guillemot, L. Imhoff, A. Fabre, M. Roumie, I. Rahil, Physical and mechanical properties of CrVN ternary system for wood machining applications, Advances in Materials and Processing Technologies (AMPT) 2010, 24-27 October 2010, Arts et Métiers ParisTech, Paris, France
- [19] B. Tlili, C. Nouveau, G. Guillemot, L. Imhoff, A. Favre, M. Roumie, I. Rahil, Elaboration, characterization of CrN- based coatings, Advances in Materials and Processing Technologies (AMPT) 2010, 24-27 October 2010, Arts et Métiers ParisTech, Paris, France, Proc. published in AIP Conference Proceedings, Volume 1315, 2010, 1311-1316
- [20] G. Guillemot, M.-N. Avettand-Fènoël, A. Iost, J. Foct, A Cellular Automaton / Finite Element model for predicting grain texture development in galvanized coatings, Advances in Materials and Processing Technologies (AMPT) 2010, 24-27 October 2010, Arts et Métiers ParisTech, Paris, France, Proc. published in AIP Conference Proceedings, Volume 1315, 2010, 727-732
- [21] Z. Khawaja, G. Guillemot, P.-E. Mazeran, M. El Mansori, M. Bigerelle, Wavelet theory and belt finishing process, influence of wavelet shape on the surface roughness parameter values, Metrology and Properties of Engineering Surfaces 2011, Twickenham Stadium, Angleterre, 12-15 April 2011, Proc. published in Journal of Physics: Conference Series, Volume 311 (1), 2011, Article number 012013
- [22] G. Guillemot, M. Bigerelle, J. Antoni, K. Anselme, How to characterize the regularity of surface topographies?, Metrology and Properties of Engineering Surfaces 2011, Twickenham Stadium, Angleterre, 12-15 April 2011, Proc. published in Journal of Physics: Conference Series, Volume 311 (1), 2011, Article number 012012
- [23] Z. Khawaja, G. Guillemot, M. El Mansori, M. Bigerelle, Décomposition en ondelettes et procédé d'abrasion. Influence du choix d'ondelette dans l'estimation des paramètres de rugosité et de l'échelle pertinente d'analyse, JIFT (Journées Internationales Francophones de Tribologie) 2011, Obernai, 11-13 May 2011
- [24] Z. Khawaja, G. Guillemot, M. El Mansori, M. Bigerelle, Relevance of Wavelet Choice to Characterize and Model the Abrasive Surfaces, 38th LEEDS-Lyon Symposium on Tribology - Energy and Health, 6-9 September 2011
- [25] G. Guillemot, A. Van Gorp, T. Coorevits, A. Iost, Estimation of the Constitutive Law by Dual Small Punch Test and Instrumented Indentation, The 4th International Conference on Advanced Materials and Structures (AMS 2011), 27-28 October 2011, Timisoara, Romania, published in Advanced Materials and Structures IV, Solid State Phenomena, Vol. 188, 2012, 193-198
- [26] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, A Multi-Physic Level Set Approach for the Simulation of the Hybrid Laser / GMAW Process, IWS conference, 10th International Seminar Numerical Analysis of Weldability, Schloss Seggau, Graz, Autriche, 24-26 September 2012, Eds. C. Sommitsch, N. Enzinger, GMAW process, 10th International Seminar on Numerical Analysis of Weldability (2012), Seggau, Austria. Technical University of Graz, 725-736

- [27] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, Numerical modelling of hybrid arc/laser welding: a coupled approach to weld bead formation and residual stresses, Proceedings International Conference on Joining Materials - JOM17, International Conference on Joining Materials, Denmark, 2013, 5-8 May 2013
- [28] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Cellular Automaton - Finite Element Modeling of Solidification Grain Structures - Extensions for Welding Processes, CSSCR 2013, 3rd International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining, KTH and Aalto University, Stockholm, May 20-23, 2013 (*Conférence invitée*)
- [29] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Coupled Cellular Automaton – Finite Element in a Level Set Approach for the Modeling of Multi-Pass Gas Metal Arc Welding Process, Euromat 2013, Seville 8-13 September 2013
- [30] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Analytical multicomponent microsegregation model for equiaxed globular growth with diffusion interaction between species, 4th International Conference on Advances in Solidification Processes, Beaumont Estates, Old Windsor, Royaume-Uni, 8-11th July 2014
- [31] Ch.-A. Gandin, A. Saad, S. Chen, G. Guillemot et M. Bellet, 3D Multiscale Modelling of Solidification Structures, 4th International Conference on Advances in Solidification Processes, Beaumont Estates, Old Windsor, Royaume-Uni, 8-11th July 2014
- [32] T. Carozzani, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Digonnet, J. Eiken et M. Apel, Quantitative Comparison of Dendritic Solidification Simulated by a CAFE and a Phase-Field Model, 4th International Conference on Advances in Solidification Processes, Beaumont Estates, Old Windsor, Royaume-Uni, 8-11th July 2014
- [33] K. Rahmoun, A. Iost, V. Keryvin, G. Guillemot, J.-C. Sangleboeuf, M. Guendouz, L. Haji, Vickers Microhardness of Oxidized and Nonoxidized Porous Silicon, 1st North African Workshop on Dielectric Materials for Photovoltaic Systems (NAWDMPV), 26-27 October 2014, Tlemcen, Algérie
- [34] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, J.-J. Rousse, J. Vaudour, Modeling of Microstructural Evolution during Friction Stir Welding, 2015 TMS Annual Meeting & Exhibition, Symposium Friction Stir Welding and Processing, 15-19 March 2015, Orlando, FL, USA
- [35] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot Analytical model for equiaxed globulitic solidification in multicomponent alloys, International Congress & Exhibition “Non-Ferrous Metals and Minerals”, Session "Casting of non-ferrous metals and alloys", International Business Center “Siberia” (Krasnoyarsk, RUS) 14-17 September 2015, **Best report nomination of the “Casting of non-ferrous metals and alloys” session.**

- [36] G. Guillemot, O. Desmaison, S. Chen, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, A multi-physic CAFE approach for the simulation of grain structure development in GMAW processes, 11th International Seminar ‘Numerical Analysis of Weldability’ (Graz – Seggau, Austria), 27-30 September 2015, Mathematical Modelling of Weld Phenomena 11 (part. II - Microstructure Modelling in WM and HAZ), Eds. C. Sommitsch, N. Enzinger and P. Mayr, Verlag der Technischen Universität Graz (2016) 157-171.
- [37] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, Microstructural evolution during friction stir welding on AA2024 aluminium alloys - Application to the prediction of the mechanical properties, 11th International Seminar ‘Numerical Analysis of Weldability’ (Graz – Seggau, Austria), 27-30 September 2015, Mathematical Modelling of Weld Phenomena 11 (part. VII - Solid State and Friction Stir Welding), Eds. C. Sommitsch, N. Enzinger and P. Mayr, Verlag der Technischen Universität Graz (2016) 497-513. **(Keynote)**
- [38] Q. Chen, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Finite Element Modeling of Additive Manufacturing by Selective Laser Melting, CSSCR 2016, 4th International Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining, Xi’an, China, May 11-15, 2016 (*Conférence invitée*)
- [39] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modeling of Diffusion limited Growth in Multicomponent Systems, Thermec 2016, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials, Processing, Fabrication, Properties, Applications, Graz, Autriche, 29 May-3 June 2016
- [40] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Finite element modeling of deposition of ceramic material during SLM additive manufacturing, MATEC Web of Conferences 80, 08001 (2016), 12th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes (Numiform 2016), MS8: Numerical Modeling of Additive Manufacturing, Univ. de Technologie de Troyes, Troyes, 4-7 July 2016
- [41] A. Pineau, R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Multiscale modeling of dendritic microstructure, 8th International Conference on Multiscale Material Modeling, Dijon, France, October 9-14, 2016
- [42] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Analytical model with interaction between species for growth and dissolution of precipitates, CALPHAD XLVI International Conference, Saint-Malo, France, 11-16 June 2017
- [43] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Finite Element Modeling of Ceramic Deposition by LBM (SLM) Additive Manufacturing, 14th U.S. National Congress on Computational Mechanics, Montreal, Canada, 17th-20th July 2017
- [44] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Multicomponent Microsegregation Model with Diffusion Interaction between Species – Application to Microstructure Evolution, 6th Decennial International Conference on Solidification Processing, Beaumont Estate, Old Winsor, UK, 25th-28th July 2017

- [45] Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Macroscopic Finite element thermal modelling of selective laser melting for IN718 real part geometries, Additive Manufacturing for Products and Applications (AMPA), ETH Zürich, 13th-15th September 2017
- [46] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Finite Element Modeling of Ceramic Deposition by LBM (SLM) Additive Manufacturing, Additive Manufacturing for Products and Applications (AMPA), ETH Zürich, 13th-15th September 2017
- [47] R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Multiscale modelling of dendritic growth by a combination of three methods, EUROMAT 2017, Thessaloniki, Greece, 17-22 September 2017
- [48] R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Multiscale Modeling of Dendritic Grain Structures by Coupling DNN-CAFE Methods, TMS Conference, 11-15 March 2018, Phoenix, Arizona
- [49] A. Pineau, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Modeling of Twin Growth during Directional Solidification of Polycrystalline Silicon, TMS Conference, 11-15 March 2018, Phoenix, Arizona
- [50] G. Reinhart, L. Abou -Khalil, N. Mangelinck-Noël, H. Nguyen-Thi, V. Maguin, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, V. Fernandez, E. Boller, D. Grange, N. T. Niane, Application of Fast X-ray Radiography to the In Situ and Real-time Observation of Ni-based Alloy Directional Solidification, TMS Conference, 11-15 March 2018, Phoenix, Arizona, USA
- [51] O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Eutectic structure modeling using thermodynamic couplings, CALPHAD XLVII Conference, International Conference On Computer Coupling Of Phase Diagrams And Thermochemistry, 27 May - 1 June 2018, Juriquilla Hotel, Querétaro. México
- [52] M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Y. Zhang, Q. Deng, L. Shao, J. Yu, S. Zhong, Studies in additive manufacturing, and related collaborations with SJTU/SPEIT, Invited Conference, 3rd International Academic Development Workshop of Shanghai Jiao Tong University and ParisTech, Shanghai, 30-31 May 2018 (*Conférence invitée*)
- [53] S. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, A Partitioned Two-Step Resolution Algorithm for Solid-Mush-Liquid Interaction Modelling in Solidification Processes, 6th European Conference on Computational Mechanics (ECCM 6), 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD 7), 11 – 15 June 2018, Glasgow, UK
- [54] G. Guillemot, V. Legrand, Ch.-A. Gandin, Microstructural evolution in Friction Stir Welding processes - Application to the prediction of the mechanical properties of AA2024 Aluminium Alloys, Thermec'2018, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials – Processing, Fabrication, Properties, Applications, July 9-13, 2018, Paris, France
- [55] R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Cellular automaton - Parabolic thick needle modelling of dendritic grain structures, Thermec'2018, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials – Processing, Fabrication, Properties, Applications, July 9-13, 2018, Paris, France

- [56] G. Zimmermann, L. Sturz, Y.Z. Li, H. Nguyen-Thi, N. Mangelinck-Noël, R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, S. McFadden, R.P. Mooney, P. Voorhees, A. Roos, C. Beckermann, A. Karma, N. Warnken, E. Perchat, G.-U. Grün, M. Grohn, I. Poitault, D. Toth, W. Sillekens, Columnar and equiaxed solidification within the framework of the ESA MAP project CETSO, 7th International Conference on Solidification and Gravity, Miskolc - Lillafüred, Hungary, Sept. 3 - 6, 2018
- [57] S. Zhang, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, A partitioned solution algorithm for fluid flow and stress-strain computations applied to continuous casting, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Vol. 529, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche
- [58] A. Queva, M. Bellet, G. Guillemot, C. Moriconi, C. Metton, Numerical simulation at the mesoscopic scale of additive manufacturing by Laser Beam Melting of metallic alloys - Application to aeronautical materials, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche
- [59] V. Maguin, G. Guillemot, V. Jaquet, N. T. Niane, L. Rougier, D. Daloz, J. Zollinger, Ch.-A. Gandin, Finite diffusion microsegregation model applied to multicomponent alloys, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering, 529, 2019, 012029, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche
- [60] Q. Chen, L. Moniz Da Silva Sancho, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, J.-D. Bartout, M.H. Berger, C. Colin, Level-set modelling of Laser Beam Melting process applied to ceramic materials - Comparison with experimental results, IOP Conference Series : Materials Science and Engineering, 529, 2019, 012002, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche, *Poster*, **Best poster award**
- [61] Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Thermo-mechanical modeling of additive manufacturing by powder bed fusion at part scale, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche
- [62] H. Etttroudi, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, G. Guillemot, Modeling of Columnar-to-Equiaxed Transition in steel Ingots using Finite Element method, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche, *Poster*

- [63] O. Senninger, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modeling of eutectic growth kinetics with thermodynamic couplings, Joint 5th Int. Conf. on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) & 5th Int. Symposium on Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting and Refining (CSSCR-5), 17-21 Juin 2019, Salzbourg, Autriche, *Poster*
- [64] H. Etttroudi, G. Guillemot, H. Combeau, M. Založnik, Ch.-A. Gandin, Finite element modeling of solidification grain structures, EUROMAT 2019, European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes, 1-5 September 2019, Stockholm, Sweden
- [65] L. Moniz, M.-H. Berger, J.-D. Bartout, C. Colin, Q. Chen, M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Alumina-Zirconia eutectics processed using selective laser melting and ultra-high solidification rates, DSEC VI, Directional Solidified Eutectic Ceramic workshop, 10 - 13 September, 2019 | University of Salerno
- [66] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modelling of grain structure for additive manufacturing, II International Conference on Simulation for Additive Manufacturing, Sim-AM 2019, Pavia, Italy, 11-13 September 2019
- [67] A. Queva, Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Modelling and Simulation of Laser Beam Melting Additive Manufacturing process, Transvalor International Simulation Day 2019, 17 October 2019
- [68] A. Pineau, G. Guillemot, G. Reinhart, G. Regula, N Mangelinck-Noël et Ch-A Gandin, 3D cellular automaton modelling of silicon crystallization including grains in twin relationship, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Volume 861, 012052, MCWASP XV: International Conference on Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes 22-23 June 2020, Jönköping, Suède
- [69] S. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin et M. Bellet, Concurrent and coupled resolution of fluid flow and solid deformation in solidification processes, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Vol. 861, 012068, MCWASP XV: International Conference on Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes 22-23 June 2020, Jönköping, Suède
- [70] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Thermomechanical simulation of powder bed fusion at part scale by super-layer deposition technique based on level-set method - WCCM-ECCOMAS CONGRESS, 11-15 Janvier 2021
- [71] E. Dorari, K. Ji, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, A. Karma, Grain competition in polycrystalline columnar dendritic solidification: Scale bridging between phase field and cellular automaton methods, TMS Conference, Annual Meeting & Exhibition 2021, 15-18 Mars 2021
- [72] Ch.-A. Gandin, V. Maguin, G. Guillemot, C. Xue, M. Bellet, R. Fleurißon, Y. Wu, O. Senninger, Coupling of solidification grain structures with heat and mass transfers, TMS Conference, Annual Meeting & Exhibition 2021, 15-18 Mars 2021
- [73] T. Camus, G. Guillemot, O. Senninger, Ch.-A. Gandin, Microstructure Modelling for Additive Manufacturing, Workshop “Simulation for Metal Additive Manufacturing”, online event organized by Empa, Dübendorf, Switzerland, 23 Avril, 2021

- [74] Ch.-A. Gandin, T. Camus, G. Guillemot, O. Senninger, Modelling challenges for solidification grain structures in additive manufacturing components, Euromech colloquium 613: Microstructures and Micromechanisms in metal Additive Manufacturing, EUROMECH, 7-9 Juillet 2021
- [75] M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Y. Zhang, Numerical modeling of additive manufacturing : thermomechanical aspects, COMPLAS 2021 - 16th Int Conf on Computational Plasticity, Fundamentals and applications, Barcelona, and virtual mode, 7-9 September 2021
- [76] T. Camus, Ch.-A. Gandin, D. Maisonnnette, G. Guillemot, O. Senninger, P. Le Borgne, Modelling of microstructures development in laser powder bed fusion process - Application on an IN718 nickel-base superalloy, European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021, 13 – 17 Septembre 2021
- [77] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Grain structure simulation in Gas Tungsten Arc Welding (GTAW) by coupled Cellular Automaton (CA)–Finite Element (FE) method and fluid flow modeling, European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021, 13 – 17 Septembre 2021
- [78] L. Ravix, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Wire Arc Additive Manufacturing process : Physical phenomena and Modelling, European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021, 13 – 17 Septembre 2021 (*Poster*)
- [79] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, A strain based hot cracking numerical simulation of gas tungsten arc welding process on stainless steel AISI 321, European Congress And Exhibition On Advanced Materials And Processes – EUROMAT 2021, 13 – 17 Septembre 2021 (*Poster*)
- [80] M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Y. Zhang, Numerical modeling of additive manufacturing : some thermomechanical aspects, 9th Int. Conf. on modeling and simulation of metallurgical processes in steelmaking, Vienna (Austria), full virtual mode, 5th-7th October 2021
- [81] C. Hareland, G. Guillemot, O. Senninger, Ch.-A. Gandin, P. Voorhees, Predicting the columnar-to-equiaxed transition during additive manufacturing of concentrated multicomponent alloys, 2022 TMS Annual Meeting & Exhibition, Anaheim, California, USA, February 27–March 3, 2022
- [82] E. Dorari, A. Karma, K. Ji, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Growth Competition between Columnar Dendritic Grains – The Role of Microstructural Length Scales, TMS Conference, Anaheim, California, USA, 3 Mars 2022
- [83] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Modelling and simulation process applied to L-PBF of metals at macroscale, AMS Conference, CETIM, Senlis, 13-14 Avril 2022
- [84] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, P.-E. Lhuillier, A. Schumm, J. Dalphin, Z. Aghenzour, Grain structure modeling in fusion welding processes using a coupled CAFE approach – Application in NDT methods, 5th LUS4Metals Conference, 5–6 Mai 2022, Gif-sur-Yvette, France

- [85] P.E. Lhuillier, A. Schumm, Y. Gelebart, J. Dalphin, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, C. Xue, Modeling method for the simulation of austenitic weld ultrasonic inspection - realistic prediction of echoes and structural noise in weld inspection, 5th LUS4Metals Conference, 5–6 Mai 2022, Gif-sur-Yvette, France
- [86] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Multi-physical modelling of 3D additive manufacturing, 1st Symposium Advances In Additive Manufacturing AIAM 2022, 11 Mai 2022
- [87] T. Camus, O. Senninger, G. Guillemot, D. Maisonnnette, Ch.-A. Gandin, Modelling of microstructures development in laser powder bed fusion process – Application to IN718 superalloy, 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-6), 20–24 Juin 2022, Le Bischenberg, France
- [88] G. Guillemot, O. Senninger, C. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Kinetics of dendrites – Coupling with CALPHAD calculations, 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-6), 20–24 Juin 2022, Le Bischenberg, France
- [89] Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Thermo-mechanical modelling of Powder Bed Fusion at Part Scale by a Super-Layer Deposition, 6th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-6), 20–24 Juin 2022, Le Bischenberg, France
- [90] C. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. Voorhees, A Computational Tool For Microstructure Development In Multicomponent Alloys During Additive Manufacturing, 7th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2023), May 21–25, 2023, Caribe Royale, Orlando, Florida, USA
- [91] G. Guillemot, C. Hareland, P. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Kinetics Phase Diagram for Dendrite Tip Kinetics, Frontiers in Solidification: an MPMD Symposium Honoring Jonathan Dantzig – Dendrite Growth & Rapid Solidification, TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition, San Diego, California, USA, March 19–23, 2023 (*Conférence invitée*)
- [92] T. Camus, D. Maisonnnette, O. Baulin, O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Simulation of microstructures produced by Laser Powder Bed Fusion, Additive Manufacturing of Metals: Applications of Solidification Fundamentals – Physics-based and Data-based modeling II, TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition, San Diego, California, USA, March 19–23, 2023
- [93] C. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. Voorhees, The effects of non-equilibrium interfaces and partial solute drag on morphological stability, Additive Manufacturing of metals: Applications of Solidification Fundamentals – Physics-based and Data-based modeling II, TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition, San Diego, California, USA, March 19–23, 2023
- [94] P. Martin, F. Pichot, N. Leriche, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Microsegregation Model Dedicated to Rapid Solidification – Application to Multicomponent Alloys of Industrial Interest, Additive Manufacturing of metals: Applications of Solidification Fundamentals – Poster Session, TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition, San Diego, California, USA, March 19–23, 2023 (*Poster*)

- [95] O. Senninger, H. Bekkis, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modeling of eutectic growth kinetics with thermodynamic couplings for multicomponent alloys, Directionally Solidified Eutectics Conference - VII, 25-27 May 2023, Istanbul, Turquie (*Conférence invitée*)
- [96] Ch.-A. Gandin, O. Senninger, G. Guillemot, Non-equilibrium phase diagram and dendrite tip growth kinetics for multicomponent alloys coupled with CALPHAD data, Solidification of Containerless Undercooled Melts - A workshop devoted to Dieter Herlach and Markus Rettenmayr, 25-26 Mai 2023, Institute of Materials Physics in Space at DLR, Cologne, Allemagne (*Conférence invitée*)
- [97] P. Martin, G. Guillemot, M. Bellet, F. Pichot, N. Leriche, Y. Mayi, Ch.-A. Gandin, Solidification path for rapid solidification - Application to multicomponent alloys for L-PBF, Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP XVI) Conference, Banff, Alberta, Canada, 18-23 Juin 2023
- [98] C. Hareland, G. Guillemot, P. Martin, Ch.-A. Gandin, P. W. Voorhees, A CALPHAD model of non-equilibrium plane-front and dendritic growth in concentrated multicomponent alloys, 50th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, CALPHAD, June 25th – 30th, 2023, Cambridge, MA, USA
- [99] T. Camus, D. Maisonnnette, O. Senninger, O. Baulin, O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Simulation of L-PBF grain structures, THERMEC'2023, July 3-7, Vienne, Autriche (*Conférence invitée*)
- [100] C. Hareland, G. Guillemot, P. Martin, Ch.-A. Gandin, P. Voorhees, A CALPHAD Model for Rapid Solidification in Industrial Alloys, 2024 TMS Annual Meeting & Exhibition, Symposium Computational Thermodynamics and Kinetics, 3–7 Mars 2024, Hyatt Regency, Orlando, Florida, USA
- [101] P. Martin, G. Guillemot, C.A. Hareland, P.W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Modeling of solidification microstructures with non-equilibrium effects at interfaces with Calphad data, CALPHAD 2024, 51th International Conference on Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 26 – 31 Mai 2024, Mannheim, Germany
- [102] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, P. Martin, P. W. Voorhees, C. A. Hareland, Phase selection in 316L processed by laser-powder bed fusion, “Materials in an Explosively Growing Informatics World” (CIMTEC Conference), 20-24 Juin 2024, Montecatini Terme, Italy

ii. Conférences nationales [CN]

- [1] G. Guillemot, M.N. Avettand-Fènoël, A. Iost, J. Foct, Modélisation des processus de germination / croissance des grains de zinc pour l'étude du procédé de galvanisation, Matériaux 2006, Dijon, France - Proceedings Matériaux 2006, CM-03-992, 13-17 Novembre 2006
- [2] M. Bigerelle, A. Iost, T. Coorevits, H. Zahouani, K. Anselme, M. El Mansori, D. Najjar, G. Guillemot, B. Hagege, A. Jourani, P. Revel, P.E. Mazeran "Mesure de la Pertinence de la Physique Multi-échelle Génie Logiciel et Mesures Statistiques Projet CETIM" Workshop « caractérisation multi-échelle de la rugosité-Analyse d'images de topographie, Chasseneuil-futuroscope, Poitiers, 11 Octobre 2007

- [3] G. Guillemot, M.-N. Avettand-Fènoël, A. Iost, J. Foct, A coupling model for predicting grain texture development in galvanizing process, Journées Annuelles de la SF2M 2008, Paris, Arts et Métiers, 5 Juin 2008
- [4] K. Rahmoun, A. Iost, V. Keryvin, G. Guillemot, M. Guendouz, L. Haji, N.E. Chabane Sari, Determination of Vickers Microhardness of Oxidized and Nanoxidized Porous Silicon, Indentation 2008, Récents développements, analyse numériques et expérimentales, applications. Rennes, 7-8 Octobre 2008
- [5] I. Capellan Perez, G. Guillemot, A. Benabou, S. Clénet, Détermination de la Loi de Comportement Macroscopique des SMC à Partir d'Imagerie au MEB : Etude de l'Influence des Conditions d'Observation, MGE 2010 (Matériaux pour le Génie Electrique), Montpellier, 30 Aout-1^{er} Septembre 2010
- [6] A. Jarrah, G. Guillemot, D. Najjar, A. Iost, M. Bigerelle, J-M. Nianga, Statistique des valeurs extrêmes pour l'estimation de la profondeur maximale en corrosion par piqûres, Matériaux 2010, 18-22 Octobre 2010, Nantes, France
- [7] G. Guillemot, A. Iost, A. Van Gorp, S. Allain, Caractérisation des aciers innovants par essais mécaniques croisés, Matériaux 2010, 18-22 Octobre 2010, Nantes, France
- [8] M. Nasser, A. Chamekh, G. Guillemot, M. Nasri, A. Iost, Modélisation du comportement élastoplastique d'un revêtement Fe-Zn (GA) par nanoindentation : approche inverse basée sur les plans d'expériences et les algorithmes génétiques multiobjectifs, 20^e congrès français de mécanique, Besançon, Association Française de Mécanique, 29 août au 2 septembre, 2011
- [9] Z. Khawaja, G. Guillemot, M. Bigerelle, Anisotropy Measurement of Periodic Structures, International Conference on Surface Metrology, ICSM'2012, Annecy-Mont Blanc, France, 21-23 Mars 2012
- [10] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, Avancées en modélisation de la formation du cordon de soudure et des écoulements en zone fondue, 10^e Colloque Modélisation et Simulation Numérique du Soudage, 10 ans de progrès en SNS, Maison de la mécanique, Paris La Défense - 22 Mars 2012
- [11] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, Modelling of the bead formation during multi pass hybrid laser/gas metal arc welding, Séminaire européen recherche-industrie et Ecole CNRS sur les applications des lasers de puissance, LASERAP, Ile d'Oléron, 1-5 Octobre 2012, Proc. published on internet:
https://docs.google.com/file/d/0B8_nHgriy_TUQkJiZUhMVUluM0E/edit (2012) 155-161
- [12] O. Desmaison, M. Bellet, G. Guillemot, A Level-Set approach for the modelling of hybrid arc/laser welding process – Application for high thickness steel sheets joining, Journées Annuelles de la SF2M, Colloque 'Assemblage', Ecole Centrale de Lille, Villeneuve d'Ascq, 29-31 Octobre 2013, Proc. published on MATEC Web of Conferences, Volume 7, 2013, Article number 02003

- [13] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, A coupled Cellular Automaton – Finite Element approach for the modelling of grain structure development in TIG welding, Journées Annuelles de la SF2M, Colloque ‘Assemblage’, Ecole Centrale de Lille, Villeneuve d’Ascq, 29-31 Octobre 2013, Proc. published on MATEC Web of Conferences, Volume 7, 2013, Article number 02002
- [14] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, Modélisation microstructurale de la précipitation en soudage par friction malaxage Application à l’alliage d’aluminium 2024 (CM-13-639), Matériaux 2014, 13 - Procédés d’assemblage ~ 9^e Journée Nationale du Soudage, Montpellier, 24-28 Novembre 2014
- [15] S. Chen, O. Desmaison, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Modélisation des structures de solidification en soudage MIG - Développement d’une approche couplée Automates Cellulaires – Eléments Finis (CM-13-794), Matériaux 2014, 13 - Procédés d’assemblage ~ 9^e Journée Nationale du Soudage, Montpellier, 24-28 Novembre 2014
- [16] G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Simulation directe par couplage CAFE de la structure de solidification primaire en soudage multipasse, 13^e colloque modélisation et simulation numérique du soudage, "modélisation du soudage de grands composants" (Paris, FR), 26 Mars 2015
- [17] V. Legrand, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Evolution microstructurale en soudage par friction malaxage – Application à la prédiction des propriétés mécaniques, 14^e Colloque ‘Modélisation et Simulation Numérique du Soudage’, Comment les Modèles et leurs Caractérisations Expérimentales influencent les résultats d’une simulation numérique, Paris, Maison de la mécanique, 17 Mars 2016
- [18] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, M. Bellet, L. Fourment, Ch.-A. Gandin, Evolution microstructurale en soudage par friction malaxage - Application à la prédiction des propriétés mécaniques dans les tôles AA2024, Conférence ‘La métallurgie, quel avenir !’ – Session ST1 : Procédés de fabrication innovants : Fabrication Voie Solide, Ecole des Mines, Saint-Etienne, 27 Juin-1^{er} Juillet 2016
- [19] Q. Chen, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Modélisation numérique du procédé de fabrication additive SLM appliqué aux céramiques alumine/zircone - Etude de l’évolution de la formation du dépôt de matière, Conférence ‘La métallurgie, quel avenir !’ – Session ST1 : Procédés de fabrication innovants : Fabrication additive, Ecole des Mines, Saint-Etienne, 27 Juin-1^{er} Juillet 2016
- [20] Y. Zhang, M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Macroscopic finite element thermal modelling of laser beam melting of Inconel 718, 1st Int. Congress on Welding and Additive Manufacturing and associated non destructive testing (ICWAM), Metz, France, 17-19 May 2017
- [21] Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Macro- and meso-scale finite element modelling of the laser beam melting process, 2nd Int. Conf. on Metallic Materials and Processes (MMP2017), Deauville, France, 25-27 October 2017

- [22] Q. Chen, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical simulation of additive manufacturing processes by Laser Beam Melting: Thermomechanical features, Journée SNS – CFV, Synergies de Simulation entre Fabrication Additive et Soudage, EDF Laboratoire, Paris-Saclay, 26 Juin 2018
- [23] Q. Chen, L. Moniz Da Silva Sancho, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, J.-D. Bartout, M.-H. Berger, C. Colin, Modélisation par approche level-set du procédé de fabrication additive LBM appliqué aux matériaux céramiques, Matériaux 2018, 19-23 Novembre 2018, Strasbourg, France
- [24] S. Chen, O. Desmaison, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Modélisation du développement des microstructures dans les procédés de soudage à l’arc - Approche couplée Automates Cellulaires-Eléments Finis, Matériaux 2018, 19-23 Novembre 2018, Strasbourg, France
- [25] O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Détermination de la cinétique de croissance des structures eutectiques – Un modèle basé sur le couplage thermodynamique, Matériaux 2018, 19-23 Novembre 2018, Strasbourg, France
- [26] H. Ettroudi, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, Modélisation par éléments finis des structures de solidification dans des lingots d’acier, Matériaux 2018, 19-23 Novembre 2018, Strasbourg, France
- [27] V. Maguin, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, N-T. Niane, V. Jaquet, Modèle de microségrégation à diffusion finie - Application à la détermination des chemins de solidification des alliages multicomposés base Nickel et validation, Matériaux 2018, 19-23 Novembre 2018, Strasbourg, France
- [28] G. Guillemot, Y. Zhang, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Q. Chen, A. Queva, Modelling and Simulation in Additive Manufacturing processes, CSMA Junior workshop – 14^e colloque national en calcul des structures, Porquerolles, 12 Mai 2019 (*Conférence invitée*)
- [29] A. Queva, M. Bellet, G. Guillemot, C. Moriconi, Thermohydraulic numerical simulation of additive manufacturing by Laser Beam Melting of metallic powder bed - Application to aeronautical alloys, CSMA Conference, CSMA 2019 – 14^e colloque national en calcul des structures, Giens, 13 – 17 Mai 2019
- [30] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, P.-E. Lhuillier, A. Schumm, J. Dalphin, Z. Aghenzour, A. Impériale, A. Gardahaut, N. Leymarie, Modélisation par approche CAFE des évolutions microstructurales dans les procédés de soudage par fusion - Application aux méthodes CND, Matériaux 2022 – Colloque 13 Genèse et Evolution des Microstructures, Poster, 24-28 Octobre 2022, Lille
- [31] T. Camus, O. Senninger, G. Guillemot, D. Maissonnette, Ch.-A. Gandin, Modélisation du développement des microstructures en procédé laser sur lit de poudre – Application au superalliage IN718, Matériaux 2022 – Colloque 13 Genèse et Evolution des Microstructures, Session 10 : Microstructure et propriétés : Solidification, Fabrication additive - Jeudi 27 Octobre 2022, 24-28 Octobre 2022, Lille

[32] T. Camus, O. Senninger, G. Guillemot, D. Maisonnnette, Ch.-A. Gandin, Modélisation des microstructures obtenues en fabrication additive par fusion laser sur lit de poudre d'un alliage base Nickel - (CETIM /CMFM), NRC 22 – Nafems Regional Conference – France, Cetim, 23 – 24 Novembre 2022

iii. Communications nationales [CO]

[1] M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Etude des procédés de solidification et de soudage, Présentation devant la direction de l'Institut des Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes (INSIS) du CNRS, Sophia Antipolis, 9 Mars 2012

[2] M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Etude des procédés de solidification et de soudage, Comité Industriel d'Orientation du Cemef, 5 Avril 2012

[3] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, Modeling of the bead formation during multi passes gas metal arc welding, Journées de l'Ecole Doctorale Sciences Fondamentales et Appliquées (SFA), Université de Nice – Sophia Antipolis, 15 Mai 2012

[4] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin. Computation of Phase Transformation during Welding Processes, Journées de l'Ecole Doctorale Sciences Fondamentales et Appliquées, Nice (SFA), Université de Nice – Sophia Antipolis, 15 Mai 2012

[5] G. Guillemot, Simulation numérique du soudage des alliages de Titane - Revue bibliographique, Association Titane, Sous-commission 'soudage des alliages de Titane', 21 Septembre 2012, Arts et Métiers, CER de Paris

[6] S. Gastebois, V. Legrand, L. Fourment, E. Massoni, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Simulation numérique du procédé de Soudage par Friction Malaxage appliqués aux alliages aéronautiques, Commission FSW (Lille, FR), 25 Janvier 2013

[7] V. Legrand, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, J.-J. Rousse, J. Vaudour, Modélisation microstructurale de la précipitation en soudage par friction malaxage - Application à l'alliage d'aluminium AA2024-T3, Commission FSW (Lille, FR), 23 Janvier 2015

[8] M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, T. Koshikawa, H. Yamamura, M. Bobadilla, Simulation numérique des interactions mécanique/solidification, Journées Annuelles du GDR 'Solidification des Alliages Métalliques', Université Pierre et Marie Curie, Paris, 10-11 Décembre 2015

[9] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, M. Bellet, Illustrated Overview of Modeling Methodologies for Structures and Segregations in Solidification Processing, THERCAST® International User Meeting (Cannes, FR), 30-31 Mars 2015

[10] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Modélisation numérique thermomécanique et microstructurale du procédé de fabrication additive SLM - Application aux matériaux céramiques, Journée de présentations des contributions au projet Carnot "ACLAME", Paris, 19 Janvier 2016 à Paris

[11] Q. Chen, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, G. Guillemot, Finite element thermomechanical modeling of deposition of ceramic material during SLM additive manufacturing process - Project CEFALE Carnot, Colloque des doctorants de l'EDSFA, Nice, 13 Mai 2016

- [12] Q. Chen, Y. Zhang, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Simulation Numérique du Procédé SLM Développement de modèles multi-physiques, Réunion du projet ACLAME - Action Concertée des Laboratoires Matériaux des Ecoles des Mines sur les procédés de fabrication additive, Centre de recherche des Mines de Douai, Rencontre « La Fabrication Additive pour l'Industrie », 3 Septembre 2016, Douai, France
- [13] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Diffusion limited growth in multicomponent alloys, Computational Thermodynamics and Kinetics Seminar, Thermocalc, 20 Octobre 2016, Paris, France
- [14] Q. Chen, Y. Zhang, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Numerical simulation of SLM process - Development of multiphysics models, Poster présenté aux Journées Annuelles du GDR "Solidification des Alliages Métalliques", Université de Grenoble, Grenoble, 5-6 Décembre 2016
- [15] A. Pineau, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Modelling of Grain Boundary Groove for Twinning Nucleation During Directional Solidification of Silicon, Poster présenté aux Journées Annuelles du GDR "Solidification des Alliages Métalliques", Université de Grenoble, Grenoble, 5-6 Décembre 2016
- [16] R. Fleurisson, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, 2D isothermal Dendritic Needle Network using the Finite Element method, Poster présenté aux Journées Annuelles du GDR "Solidification des Alliages Métalliques", Université de Grenoble, Grenoble, 5-6 Décembre 2016
- [17] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, Evolution microstructurale en soudage par friction malaxage - Application à la prédiction des propriétés mécaniques, Commission FSW (Lille, FR), 10 Mars 2017
- [18] A. Pineau, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Modeling polycrystalline silicon growth using a cellular automata approach, Ecole thématique Solidification, GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM), Oléron, 25-30 Juin 2017
- [19] H. Ettroudi, Ch.-A. Gandin, H. Combeau, G. Guillemot, 3D Modeling of Columnar-to-Equiaxed Transition in steel Ingots using Finite Element method, Ecole thématique Solidification, GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM), Oléron, 25-30 Juin 2017
- [20] Q. Chen, Y. Zhang, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Numerical simulation of SLM process Development of multiphysics models, Ecole thématique Solidification, GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM), Oléron, 25-30 Juin 2017
- [21] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Utilisation de modules cinétiques spécifiques pour traiter les transformations contrôlées par la diffusion, Réunion GDR TherMatHT, 23 Mars 2018
- [22] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Cinétique de croissance instationnaire pour système multicomposé avec diffusion croisée – solution analytique et couplage CALPHAD, Atelier Thermodynamique des Verres – 11 Octobre 2018, Campus de La Doua, Université Claude Bernard – Lyon 1

- [23] M. Bellet, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Y. Zhang, Simulation numérique de la fabrication additive par fusion sélective de lit de poudre : aspects thermomécaniques, Séminaire invité à l'Ecole Polytechnique, laboratoire LMS et Projet FAPS (Fabrication additive Paris-Saclay), 15 Novembre 2018 (*Communication invitée*)
- [24] G. Guillemot, V. Legrand, Ch.-A. Gandin, Microstructural evolution in Friction Stir Welding processes – Application to the prediction of the mechanical properties of AA2024 Aluminium Alloys, Groupe Thermodynamique des verres du GDR TherMatHT, Faculté des Sciences St Jérôme, Marseille, 4 février 2019
- [25] M. Bellet, Q. Chen, A. Queva, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Y. Zhang, Modélisation et simulation numérique thermomécanique en fabrication additive, Invited conference, Madamdays "Modelling and Design for Additive Manufacturing", International workshop, IREPA Laser, Strasbourg, 10-11 April 2019
- [26] Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Thermo-mechanical modeling of additive manufacturing: continuum or particles with level set formulation applied to track and part scale simulations, Forum Teratec 2019, Ecole Polytechnique, 11-12 Juin 2019
- [27] J.-D. Bartout, C. Colin, M. Bellet, Aéronautique : l'aube céramique à la portée de la fabrication additive, Research Day Mines ParisTech, 2 Juillet 2019
- [28] I. Karroumi, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, D. Maisonnète, B. Verquin, Simulation du procédé de fusion laser - Application à l'acier outil H13 sensible à la fissuration à chaud, Evénement AFH, Digiteo, Saclay, 11 Septembre 2019
- [29] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Dendrite growth kinetics in multicomponent system - Development of cross-diffusion model with thermodynamic coupling (PY \ KIND), 4^e Atelier thermodynamique des verres - GDR TherMatHT – USTV Marcoule – 11 Octobre 2019
- [30] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Y. Zhang, O. Senninger, M. Bellet, Modélisation de la solidification: procédés et microstructures, Séminaire technique, EDF Lab les Renardières, département « Matériaux et Mécanique des Composants », Moret sur Loing-Orvanne, France, 14 Octobre 2019
- [31] G. Guillemot, O. Senninger, Ch.-A. Gandin, Simulation des procédés industriels - Exploitation des données thermodynamiques & couplage numérique, Journée GDR TherMatHT – RNM (Réseau National de la Métallurgie), FIAP, Paris – 14 Octobre 2019
- [32] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Stabilité morphologique d'un grain équiaxe en croissance diffusive pour un alliage multicomposé - Extension du critère de Mullins et Sekerka, Journées Annuelles du GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM) - 15, 16 et 17 octobre 2019, Amphi Charpak - Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie – Paris
- [33] G. Reinhart, L. Abou-Khalil, N. Mangelinck-Noël, H. Nguyen-Thi, V. Maguin, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, V. Fernandez, E. Boller, D. Grange, V. Jaquet, N. T. Niane, Etude de la solidification des alliages métalliques par radiographie X synchrotron et application aux alliages à base Nickel, Journées Annuelles du GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM) - 15, 16 et 17 octobre 2019, Amphi Charpak - Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie – Paris

- [34] L. Ravix, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Master Wire Arc Additive Manufacturing process: Physical phenomena and Modeling (Projet ANR MACCADAM), Journées Annuelles du GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM) - 15, 16 et 17 octobre 2019, Amphi Charpak - Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie – Paris, *Poster*
- [35] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Projet ANR-NEMESIS: La métallurgie numérique au service des procédés de soudage à l'arc: Des matériaux virtuels pour maîtriser les défauts, Journées Annuelles du GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM) - 15, 16 et 17 octobre 2019, Amphi Charpak - Sorbonne Université, Campus Pierre et Marie Curie – Paris, *Poster*
- [36] Y. Mayi, A. Queva, C. Moriconi, C. Metton, P. Peyre, M. Dal, M. Bellet, G. Guillemot, Simulation multi-physique du procédé LBM, Journée Doctorants AFH, 7 Novembre 2019, DOSEO, Gif-Sur-Yvette
- [37] M. Bellet, M. Jebali, A. Queva, G. Guillemot, D. Grange, C. Colin, J.-D. Bartout, Simulation numérique du procédé LBM d'alliage métallique à l'échelle des cordons et validation expérimentale, Séminaire de Fabrication Additive des Matériaux Métalliques, Centre des Matériaux Mines ParisTech, Evry, 26 novembre 2019 (*Conférence invitée*)
- [38] G. Guillemot, D. Jacquin, Article de revue - Modélisation des évolutions microstructurales en soudage FSW dans les alliages d'aluminium, Commission FSW, Réunion virtuelle, 22 Février 2021
- [39] M. Bellet, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Simulation numérique du procédé LPBF (Laser Powder Bed Fusion) à différentes échelles, SF2M Section Sud-Est, Journée Poudre et Fabrication additive, 12 mai 2022, Présentation en virtuel
- [40] Ch.-A. Gandin, M. Bellet, G. Guillemot, O. Senninger, Y. Zhang, Keynote 1 : Modeling of additive manufacturing at multiple scales, 38^e journées de printemps, Fatigue et Fabrication additive, Paris, 17-19 Mai 2022
- [41] P.E. Lhuillier, A. Schumm, Y. Gélébart, Z. Aghenzour, J. Dalphin, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, C. Xue, Modélisation de l'inspection ultrasonore des soudures austénitiques avec prise en compte de la microstructure de solidification obtenue par simulation numérique du soudage, Journée COFREND, Marseille, 6-8 Juin 2023
- [42] T. Camus, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, O. Senninger, D. Maisonnnette, O. Baulin, Three-dimensional modelling of solidification grain structures generated by laser powder bed fusion - Application to Inconel 718 Nickel-based superalloy, Journées GDR ALMA, INSA Rouen, 27-29 Juin 2023
- [43] C. Xue, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, P.-E. Lhuillier, A. Schumm, J. Dalphin, Z. Aghenzour, Grain structure modeling in fusion welding processes using a coupled CAFE approach - Application in NDT methods, Mines Paris - Research Day, Science et Industrie, 4 juillet 2023

[44] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Y. Zhang, O. Senninger, T. Camus, A. Queva, Q. Chen, S. Chen, Microstructure evolution in Laser Powder Bed Fusion process, Workshop IMT ‘Défis matériaux’, Considérer les multi-matériaux de la chimie et physico-chimie à leur fonctionnalité, Mines Paris, Site de Sophia Antipolis, 5-6 Décembre 2023

2.3 Contributions aux ouvrages scientifiques

i. Ouvrages à diffusion internationale [OI]

- [1] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, 3.5.6 – Cellular Automaton Methods, in 3.5 – Models for Microstructure Evolution, *in* 3 – Microstructure Modelling, Handbook of Software Solutions for ICME, Editor(s) : Georg J. Schmitz, Ulrich Prahl, Eds. Wiley-Vch, (Weinheim, DE) 2016
- [2] M. Bellet, Y. Zhang, G. Guillemot, La fabrication additive des alliages métalliques, Tome 1 : Procédés, matière première et simulation numérique, Chapitre 4 : La simulation numérique des procédés de fabrication additive, Section 2 : Simulation thermomécanique, ISTE Group - Science des matériaux - Procédés en science des matériaux, 2022

ii. Ouvrages à diffusion nationale [ON]

- [1] G. Guillemot, Simulation par couplage Automates Cellulaires – Eléments Finis / Application à la solidification des alliages métalliques, *in* “La Matière Grise, Premier Élément d’Alliage en Métallurgie”, Ouvrage Collectif sous la direction de M. Morniroli, en hommage au Pr. Jacques Foct, Université des Sciences et Technologies de Lille (USTL), 14 mars 2008, 213-222

2.4 Séminaires

i. Séminaires de recherche [SR]

- [1] M. Bigerelle, M. El Mansori, G. Guillemot, B. Hagege, O. Saber, A. Iost, Modélisation du procédé de superfinition par abrasion, Poster / Workshop ‘caractérisation multi-échelle de la rugosité-Analyse d’images de topographie’, 11 octobre 2007, Chasseneuil-futuroscope, Poitiers
- [2] M. Bellet, Q. Chen, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Modélisation numérique de la fabrication additive par fusion sélective de lit de poudre, Séminaire Département Mécanique et Matériaux, Ecole des Mines de Paris, 22-23 Septembre 2016, Porquerolles
- [3] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical developments at the CEMEF dedicated to the simulation of welding processes, Seminar ‘Numerical Simulation of Welding processes’ 14 Novembre 2017, Arcelor Mittal Montataire
- [4] M. Bellet, M. Bernacki, N. Bozzolo, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, E. Massoni, C. Moussa, O. Senninger, Y. Zhang, Action prospective CNRS ‘Nouveaux alliages métalliques’, Grenoble, 25-26 octobre 2018
- [5] O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, KINE: a module of PhysalurgY for computation of eutectic growth kinetics with thermodynamic databases, Computational Thermodynamics and Kinetics Seminar – Thermo-Calc Software user group meeting, MINES ParisTech, CEMEF, 30 Octobre 2018, Sophia Antipolis
- [6] Ch.-A. Gandin, M. Bellet, G. Guillemot, O. Senninger, Y. Zhang, Modeling of additive manufacturing at multiple scales, LMS Presentation, 31 Mars 2022, Palaiseau
- [7] Ch.-A. Gandin, M. Bellet, G. Guillemot, O. Senninger, Y. Zhang, Multiscale modeling of laser-powder bed fusion additive manufacturing, Inauguration laboratoire commun UTC, CNRS, Arcelor Mittal, FuseMétal, Compiègne, 7 Juillet 2022
- [8] L. Ravix, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Wire Arc Additive Manufacturing process: Physical phenomena and Modeling, Séminaire GDR ALMA, Workshop GDR ALMA, Simulation numérique des procédés de fabrication additive métallique, CEMEF, Ecole des Mines de Paris, Sophia Antipolis, 22 et 23 Septembre 2022
- [9] T. Camus, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, O. Senninger, D. Maisonnnette, O. Baulin, Modélisation microstructurale à l’échelle macroscopique par approche CAFE – Application au superalliage base Nickel Inconel 718 mis en forme par procédé L-PBF, Séminaire GDR ALMA, Workshop GDR ALMA, Simulation numérique des procédés de fabrication additive métallique, CEMEF, Ecole des Mines de Paris, Sophia Antipolis, 22 et 23 Septembre 2022
- [10] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, O. Senninger, Rapid solidification: Microstructure, kinetics and solidification path, Thermo-Calc User Group Meeting - Lyon 2023, 23-24 Octobre 2023

ii. Séminaires d'enseignement [SE]

- [1] C. Pradille, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Mesure de Champs en soudage MIG/MAG, Séminaire 'Mesure de Champs' du département 'Matériaux' / Ecole des Mines de Paris – Site de Sophia Antipolis, 20 Septembre 2011
- [2] A. Blazy, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, N. Crassous, Développement du réacteur Jules Horowitz – Étude métallurgique des défauts en soudage par faisceau d'électrons des alliages 6061, Séminaire 'Matériaux pour le Nucléaire' / Ecole des Mines de Paris - Site de Paris, 21 septembre 2012
- [3] G. Guillemot, O. Senninger, Ch.-A. Gandin, Atelier Thermodynamique (CALPHAD), Ecole thématique Solidification, GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM), Oléron, 25-30 Juin 2017
- [4] G. Guillemot, M. Bellet, Y. Zhang, Simulation Numérique des Procédés - Thermomécanique, Ecole Thématique CNRS FABrication ADDitive des alliages métalliques (FABADD). Liens entre procédés, microstructures et propriétés d'usage, 3-5 mai 2021, en Visioconférence
- [5] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, O. Senninger, Solidification Rapide, Solidification : fondamentaux et applications métallurgiques, GDR Solidification des Alliages Métalliques (SAM) 21-25 juin 2021 – Ecole d'été virtuelle
- [6] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Y. Zhang, O. Senninger, T. Camus, A. Queva, Q. Chen, S. Chen, Microstructure development in Additive Manufacturing Processes, GDR ALMA 'Alliages métalliques par/pour la fabrication additive', Ecole Virtuelle ALMA, 8 Novembre 2023
- [7] P. Martin, G. Guillemot, M. Bellet, F. Pichot, N. Leriche, Y. Mayi et Ch.-A. Gandin, Solidification path for rapid solidification - Application to multicomponent alloys for L-PBF, GDR ALMA 'Alliages métalliques par/pour la fabrication additive', Ecole Virtuelle ALMA, 8 Novembre 2023

2.5 Vulgarisation scientifique

i. Publication [VP]

[1] Y. Zhang, M. Bellet, G. Guillemot, Ch.A. Gandin, Thermo-mechanical modeling of additive manufacturing by powder bed fusion at macro-scale, in ‘Le groupement de recherche Solidification des Alliages Métalliques’ (SAM), Tech News Fonderie, Association Technique de Fonderie, n°10, <http://fr.zone-secure.net/95203/995274/#page=31>

ii. Conférence [VC]

[1] M. Bellet, Q. Chen, Y. Zhang, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, J.-D. Bartout, C. Colin, La fabrication additive par fusion laser de lit de poudre : introduction au procédé et à sa simulation numérique, Conférence donnée aux élèves des classes préparatoires, Lycée des Eucalyptus de Nice (lycée des sciences et des technologies, classes préparatoires aux grandes écoles), 25 novembre 2016

iii. Média [VM]

[1] Intervention de Alexis Queva (doctorant en contrat CIFRE avec Safran) dans l’émission de France Culture La Méthode scientifique « Impression 3D: La science en pièces détachées » (8 Novembre 2017)

Présentation dans la rubrique ‘La Recherche montre en main’ de l’activité développée au CEMEF sous la forme d’un exposé intitulé « Simulation numérique d’un procédé de fabrication additive » :

www.franceculture.fr/emissions/la-methode-scientifique/la-methode-scientifique-mercredi-8-novembre-2017

www.franceculture.fr/emissions/la-recherche-montre-en-main/la-recherche-montre-en-main-mercredi-8-novembre-2017

Chapitre 3

—

Caractérisation des surfaces et interfaces

« Chaque fois que la science avance d'un pas, c'est
qu'un imbécile la pousse sans le faire exprès. »

*La joie de vivre,
Emile Zola, 1884*

Table des matières

3.1	Introduction	56
3.2	Activité de recherche	57
i.	Propriétés mécaniques des surfaces	57
•	Contexte - Dureté des Matériaux	58
•	Modèle de dureté multicouches	59
•	Modèle de dureté composite	60
•	Pertinence des modèles de dureté sur films minces	63
ii.	Caractérisation géométrique des surfaces	66
•	Contexte - Analyse multi-échelle	66
•	Méthodes de bootstrap	68
•	Traitements par ondelettes	68
•	Echelles pertinentes de mesure	70
iii.	Corrosion par piqûres	74
•	Contexte – Corrosion des alliages métalliques	75
•	Analyse probabiliste	75
•	Prédiction des défauts extrêmes par méthode GLD	77
3.3	Bilan et perspectives	82
i.	Synthèse	82
ii.	Bilan et diffusion	84
iii.	Perspectives	87

3.1 Introduction

L'histoire des sciences montre, très tôt, le rôle et l'importance des surfaces dans l'amélioration de la durabilité des matériaux. On retrouve ainsi, lors du développement des premiers procédés d'élaboration, le souci des hommes de protéger la surface des pièces élaborées de l'action agressive des milieux extérieurs (Fig. 3.1 a). On peut, notamment, citer la technique de la glaçure des céramiques dans l'Égypte Ancienne destinée à durcir et imperméabiliser la surface des pièces, en même temps que ce revêtement constituait un élément décoratif [Cmo24]. Plus récemment, Sir H. Davy montra, au début du 19^{ème} siècle, l'intérêt de l'utilisation des composés cuivreux pour lutter contre l'adhérence de la faune et de la flore [Ber05]. Les travaux du chimiste permirent de développer les premières peintures protectrices pour les carènes en fer des navires. Cependant, l'efficacité du placage du cuivre sur la coque en bois des navires, pour lutter contre l'effet de l'environnement, était déjà bien connue (Fig. 3.2b).

Dans le domaine des matériaux métalliques, la protection du fer contre la corrosion était, dans l'antiquité, réalisée par des vernis grossiers, tel l'*antipathie*, à base de céruse [Ber05]. Le procédé d'étamage consistant à déposer, après fusion, un revêtement d'étain sur une pièce de fer ou de cuivre pour la protéger de la corrosion a été développé par la suite. Ce dernier, connu des Gaulois, a été transmis aux Romains et aux Grecs (Fig. 3.3 c). L'invention du fer-blanc, due aux métallurgistes de Bohême et de Saxe au XIV^e siècle, a permis, dans les temps plus récents, de réaliser la protection des tôles d'acier doux [Lam03, Lam04]. La lutte contre le 'vert de gris' a longtemps dépendu de ce seul procédé. Ces besoins de protection des matériaux métalliques se sont accrus, à l'époque moderne, avec le développement industriel, et en raison de condition de travail, sans cesse plus sévères. Il faut noter que ces conditions viennent autant du milieu extérieur, que des sollicitations endurées par les pièces elles-mêmes.

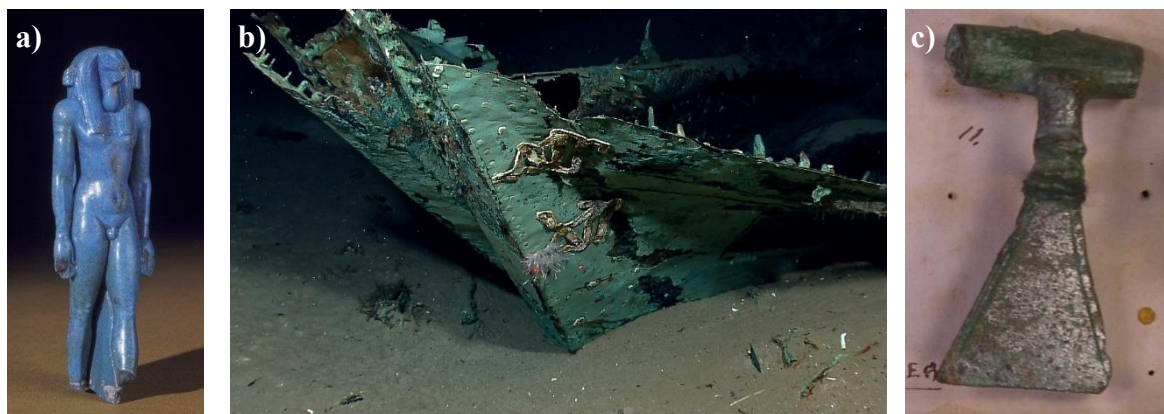


Fig. 3.1 : Techniques de protection des surfaces : a) Céramique du dieu Thot de la mythologie égyptienne (1560-1306 BC) recouverte d'une glaçure bleue [Cmo24], b) Coque de navire du 19^{ème} siècle (Golfe du Mexique) [Nat13]. La majeure partie, en bois, s'est désintégrée. Seul demeure intact le revêtement protecteur en cuivre qui a résisté aux organismes marins, c) Broche d'arc romano-britannique en alliage de cuivre (1-200 AD) [Bri13]. La protection contre la corrosion (revêtement d'étain déposé par étamage) est visible sur la partie basse.

La tôle galvanisée moderne fournit un exemple marquant de ces développements. Inventée par le français Sorel en 1836, avant que, un siècle plus tard, ne soit développé le premier procédé de galvanisation en continu. L'exploitation de ces revêtements protecteurs représente, ainsi, 60 % de la consommation mondiale de zinc, soit près de 8 millions de tonnes [Iza23], en particulier à destination de la construction et de l'automobile. Dans le même temps, tout au long du 20^e siècle, la richesse et la technicité des moyens de protection des surfaces se

sont considérablement étendues, amenant au développement de la ‘*Science des Surfaces*’ telle qu’elle est connue actuellement. La *surface* apparaît ainsi comme un moyen pour le milieu extérieur, par l’intermédiaire des conditions environnementales, chimiques ou mécaniques rencontrées, de venir agresser le matériau et le rendre impropre à son usage. Par là même, cette *surface* se révèle, paradoxalement, comme un outil permettant d’accroître les performances en service des pièces traitées par l’amélioration de leurs propriétés. En déterminant ces propriétés et les conditions d’élaboration les optimisant, on se trouve à même de prolonger la durée de vie en service des matériaux, en réponse à des conditions de travail sans cesse plus sévères.

Les activités que j’ai développées dans l’équipe ‘Caractérisation et Propriétés de la Périsurface’ (CPP) des Arts et Métiers (Centre de Lille), en tant que Maître de Conférences (2005 – 2011) ont été réalisées dans cet objectif d’amélioration de la durabilité des matériaux métalliques. Elles ont porté sur le développement de techniques et de méthodologies destinées à mesurer les propriétés de dureté, de rugosité, de frottement et, plus généralement, de résistance des surfaces. Ces travaux se sont réalisés avec mes collègues lillois, le Pr. Alain Iost (Directeur de l’équipe CPP), Denis Najjar, Adrien Van Gorp et Thierry Coorevits, ainsi que le Pr. Maxence Bigerelle (Laboratoire Roberval, UTC Compiègne). Ils ont été favorisés par notre accès à différents outils de caractérisation des surfaces et interfaces. Nous allons revenir, ci-après, sur certains des travaux menés dans ce cadre, dressant, ainsi, un panorama des activités auxquelles j’ai contribué et des résultats obtenus. En particulier, je propose de discuter des activités réalisées dans trois domaines spécifiques retenus, portant sur i. – les propriétés mécaniques des surfaces, ii. – la caractérisation géométrique des surfaces, iii. – la corrosion par piqures.

3.2 Activité de recherche

i. Propriétés mécaniques des surfaces

Comme cela a été rappelé précédemment, l’amélioration des propriétés en service des pièces métalliques peut se réaliser par un changement de leur conception ou un meilleur choix des matériaux participants à leur élaboration. La première solution reste souvent difficile à développer technologiquement. En effet, une évolution des dimensions ou de la géométrie d’un élément spécifique d’un système industriel existant impacte l’ensemble des autres pièces, induisant, potentiellement, un accroissement de la masse ou de la complexité de ce système et, possiblement, une dégradation de ses autres propriétés. De même, la seconde solution se révèle généralement coûteuse, par le choix de matériaux ou d’éléments d’addition plus nobles. L’ajout, dans la masse des pièces, de chrome, de nickel, ou encore de vanadium sont des exemples de ces solutions destinées à améliorer les différentes propriétés des aciers industriels.

Une troisième solution est, cependant, envisageable, consistant à améliorer les seules propriétés interfaciales des pièces. Cette stratégie se révèle plus économique, le traitement n’étant pas réalisé dans la masse et amenant à des variations dimensionnelle limitées. Cette approche permet de conserver et d’améliorer les propriétés en service des pièces, seule leur surface étant modifiée. Historiquement, le procédé de cémentation est le premier à avoir été développé dans cette démarche [Ghi94]. Un grand nombre d’autres approches ont été proposées par la suite, poursuivant l’objectif d’améliorer les propriétés mécaniques des surfaces dans le but d’améliorer les propriétés des pièces industrielles. Parmi ceux développés industriellement, on peut citer les procédés de carbonituration [Ghi94], de chromage [Ben97], de nickelage, de

dépôts CVD / PVD, ou de dépôt DLC. Les méthodes de réseau de neurones aident également, actuellement, à l'optimisation de ces procédés [Pat21]. Cependant, l'amélioration surfacique, notamment mécanique, apportée par ces traitements doit être caractérisée et quantifiée, afin de rechercher les paramètres optimaux, au regard d'une application donnée. Cette caractérisation mécanique peut se développer à travers différentes techniques. L'objectif de cette section est, ainsi, de présenter, succinctement, des exemples de l'activité de recherche développée dans l'équipe CPP autour de la caractérisation des propriétés de dureté des matériaux, cette activité s'étant réalisée, régulièrement, en collaboration avec d'autres équipes, notamment celle des laboratoires Mecasurf (Arts et Métiers, Aix-en-Provence) et Labomap (Arts et Métiers, Cluny).

- Contexte - Dureté des Matériaux

La dureté caractérise la pression nécessaire à réaliser la pénétration partielle d'un indenteur dur dans un matériau. Historiquement [Fel05], la première échelle de dureté est proposée par le minéralogiste Mohs (1812). Elle consistait à ordonner les différents matériaux selon leur possibilité mutuelle de rayure, entre le talc (dureté 1) et le diamant (dureté 10). Bien qu'approximative, cette méthodologie s'est révélée très adaptée à estimer les propriétés des matériaux. Par la suite, de nouvelles méthodologies ont été proposées, pour définir cette dureté, consistant à réaliser, sous charge, l'enfoncement d'un pénétrateur dur en surface des pièces étudiées. La charge utilisée est ensuite divisée par l'aire de contact entre le pénétrateur et le matériau, amenant à une mesure relativement stable. La mesure de dureté d'un matériau, et plus généralement la caractérisation de son comportement à l'indentation, apparaît, ainsi, comme un outil indispensable dans l'étude de ses propriétés mécaniques [Büc65]. Cette technique permet de couvrir des profondeurs variables [Ios12], donnant la possibilité de déterminer les effets des traitements thermiques et/ou chimique sur les propriétés surfaciques (*cémentation, chromisation, nitruration, dépôt de films minces ...*). Cette approche permet, de plus, de caractériser les hétérogénéités surfaciques, étant donné son caractère très local. Il est possible de relier, en particulier, par nanoindentation, les mesures réalisées aux orientations locales des structures [Ng08, Pat09, Kan12, Sel14, Bri10]. Des déconvolutions ou des traitements statistiques appropriés permettent, également, d'estimer les propriétés des constituants, tant dans le cas de matériaux composites [Ama14] que polyphasés [Trt09, Ulm10, Ran09].

De même, l'analyse des propriétés mécaniques par nanoindentation s'est développée, très récemment, à travers l'analyse fine de la courbe effort-enfoncement, $P(h)$, d'essais réalisés à très faible chargement (typiquement $\sim 1 - 100$ mN pour un enfoncement de $\sim 10 - 1000$ nm). Les informations qu'elle permet d'obtenir tant en termes de propriétés plastiques qu'élastiques sont particulièrement riches. Le travail de Oliver et Pharr [Oli92, Oli04] a été, en ce sens, pionnier et essentiel, dans la mesure où ces auteurs ont proposé une démarche d'analyse rigoureuse de cette courbe, amenant à une estimation fine et locale des propriétés mécaniques des matériaux étudiés, sans nécessité d'observer l'empreinte réalisée. Leur approche d'analyse a été largement reprise, par les fabricants de nanoduromètres, notamment sur les équipements MTS/Agilent. Le module d'Young effectif, introduit par les auteurs, permet, en complément, de considérer l'influence de la déformation élastique de l'indenteur dans la réponse globale, et, a posteriori, de retrouver, très précisément, le module d'Young, E , du matériau indenté, fonction du point d'étude, et en considérant des volumes d'étude très réduits. Ces méthodologies d'analyse automatisée sont aussi, encore, en constant développement [Ros23].

- Modèle de dureté multicouches

Au regard de l'état de l'art, présenté très succinctement précédemment, la caractérisation des propriétés mécaniques des films minces, protégeant les matériaux ou leur conférant de nouvelles fonctionnalités, revêt une grande importance. Les revêtements multicouches ont été largement étudiés dans la littérature. Des théories ont, ainsi, été proposées pour expliquer l'amélioration observée des propriétés mécaniques dans différents cadres [Yas99, Pal03]. Les matériaux revêtus présentent, ainsi, des couches protectrices ou fonctionnelles d'épaisseur extrêmement variable, dépendant des procédés exploités : PVD ($\sim 100 \text{ nm} \setminus 5 \mu\text{m}$), CVD ($\sim 1 \mu\text{m} \setminus 50 \mu\text{m}$), chromation ($\sim 1 \mu\text{m} \setminus 250 \mu\text{m}$), cémentation ($\sim 100 \mu\text{m} \setminus 1 \text{mm}$), Cold Spray ($\sim 10 \mu\text{m} \setminus 10 \text{mm}$) ... La caractérisation précise de leurs propriétés mécaniques a donné lieu à une grande littérature, aidée par le développement des techniques fines de dureté instrumentée, telle que la nanoindentation, mentionnée précédemment. L'évolution de la dureté d'un matériau revêtu, au cours d'un essai instrumenté, donne, ainsi, accès à une mesure locale de cette grandeur, associée à une profondeur, h , considérée au regard de l'épaisseur totale du revêtement, t . Une discussion a souvent émergé pour savoir quelle profondeur d'indentation était nécessaire pour retrouver les propriétés spécifiques au seul revêtement. Dans le cas du dépôt d'une couche présentant une dureté au moins double de celle du substrat, Bückle [Büc60, Büc71] considère qu'il n'est pas possible de retrouver la dureté de la couche superficielle si la profondeur d'enfoncement est supérieure au dixième de l'épaisseur totale. Cette règle a, par la suite, évolué, en confrontant les modèles de dureté multicouches aux observations expérimentales. Selon Jönsson et Hogmark [Jön84] le substrat commence à influencer la mesure pour des indentations d'une profondeur de 7 % à 20 % de celles de la couche supérieure. Des observations expérimentales dans le même sens ont été rapportées par Iost [Ios03] sur des peintures de tôles galvanisées. Gamonpilas et Busso [Gam04] ont développé, de leur côté, une analyse très précise, et critique, basée sur la simulation de l'indentation. Ainsi, les propriétés mécaniques de chaque couche influent sur l'évolution générale de la courbe effort/enfoncement, notamment aux grandes profondeurs. L'intérêt de disposer de modèles fiables, prédisant la dureté d'un matériau multicouche, est alors évident, ces modèles permettant, tout autant, de déterminer la réponse mécanique globale du matériau, que, par analyse inverse et corrélation, de retrouver les propriétés associées à chaque couche précédemment formée ou déposée.

De nombreux modèles ont été proposés dans la littérature pour estimer l'évolution de la dureté de matériaux revêtus. On peut citer – plus particulièrement – Jönsson et Hogmark [Jön84], Burnett et Rickerby [Bur87], Chicot et Lesage [Chi95], Korsunsky [Kor98] et Puchi-Cabrera [Puc02]. Des analyses comparatives de ces modèles ont été menées [Bee08], parfois critiquables. Il est notable que l'ensemble de ces modèles s'exprime, dans le cadre d'un film mince unique, déposé sur un substrat, sous la forme commune :

$$\frac{H_c - H_s}{H_f - H_s} = a \quad (3.1)$$

où H_f , H_s et H_c représentent respectivement les duretés du film, du substrat et du matériau revêtus. Le terme a correspond donc à la contribution du film à la dureté totale mesurée, à un enfoncement donné. Ce coefficient évolue, dans l'ensemble des approches proposées dans la littérature, entre 0 et 1, représentant alors une pondération entre la dureté du film et celle du

substrat. Les valeurs de 0 et 1 retrouvent, respectivement, les duretés du substrat et du film. Dans l'approche de Jönsson et Hogmark (J-H) [Jön84], le coefficient a prend la valeur :

$$a = \frac{A_f}{A} = 1 - \frac{A_s}{A} = 2 \frac{C}{\beta} - \frac{C^2}{\beta^2} \quad (3.2)$$

A_f et A_s représentent respectivement les aires du film et du substrat sur lesquelles agit l'indenteur. A est l'aire totale déformée ($A = A_f + A_s$). β est la profondeur relative d'indentation (RID) définie par le ratio h/t . La constante C dépend de la géométrie de l'indenteur (Vickers, Berkovich, 'cube corner'...), et du caractère de la déformation engendrée. En reprenant un formalisme rigoureux et en supposant une loi de mélange similaire à celle de la relation (3.1), on montre [Rah09], pour un matériau constitué de n différentes couches, que :

$$H_c = \frac{A_s}{A} H_s + \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{A} H_i \quad (3.3)$$

où les contributions à la dureté des n couches i , correspondent aux ratios de leurs aires respectives, A_i , à l'aire totale d'indentation, A . Différents modèles prennent des formes continues pour exprimer l'évolution de dureté selon h : Chicot-Lesage (C-L) [Chi95], Korsunsky (K) [Kor98] ou Puchi-Cabrera (P-C) [Puc02], se différenciant ainsi du modèle J-H.

- Modèle de dureté composite

La détermination des propriétés surfaciques des matériaux revêtus est donc de grande importance économiquement. Il est apparu cependant, rapidement, que les modèles théoriques de la littérature sont souvent appliqués incorrectement. L'équipe CPP a, à travers son activité développée en caractérisation mécanique des surfaces, cherché à proposer des approches robustes d'estimation de la dureté de revêtements superficiels sur des matériaux multicouches. En particulier, une étude critique de l'application des modèles de dureté rapportés dans la littérature a été proposée [Gui10], par suite du travail de Beegan [Bee08], comparant différents modèles et leur capacité à reproduire les observations expérimentales : Jönsson et Hogmark – J-H [Jön84], Chicot et Lesage – C-L [Chi95], Korsunsky – K [Kor98], Puchi-Cabrera – P-C [Puc02]), respectivement présentées dans les équations (2), (3), (4) et (5) de [Gui10].

Plus précisément, dans leur étude, publiée dans *Thin Solid Films*, Beegan *et al.* [Bee08] ont développé des dépôts de cuivre ductile de différentes épaisseurs sur un substrat dur d'oxyde de silicium (dépôt PVD de type pulvérisation cathodique - sputtering) et en ont mesuré les évolutions de dureté. Les résultats obtenus ont été comparés, après régression, aux prédictions des modèles précédemment mentionnés, permettant d'estimer les propriétés du substrat et du revêtement. Si les modèles K et P-C s'accordent correctement aux observations expérimentales, il est apparu que les modèles J-H et C-L ne permettent pas de retrouver les évolutions attendues (Fig. 3.4 – traits gris). On remarque que ces modèles prédisent des comportements aberrants (évolution non monotone et dureté excessive – J-H ou dureté négative – C-L). Une réponse a été faite à cette étude, sous la forme de 'Comments', publié dans la même revue [Gui10]. Nous avons, en premier lieu, rappelé l'erreur commise, couramment, d'appliquer le modèle J-H dans une configuration erronée. On montre aisément que l'expression (3.2) conduit à des ratios A_f/A et A_s/A sans sens physique, dès lors que β est inférieur à la constante C , cette situation correspondant à une aire relative de film indentée maximale ($A_f/A = 1$ ou $A_s/A = 0$), et qui

doit être conservée, dès lors, pour les indentations plus réduites ($\beta < C$ ou $h < C t$). L'utilisation de cette expression en deçà de C conduit aux aberrations visibles (Fig. 3.4 a - courbes grisées) avec la remontée de dureté observée pour β inférieur à C (~ 0.30 – Table 3.1).

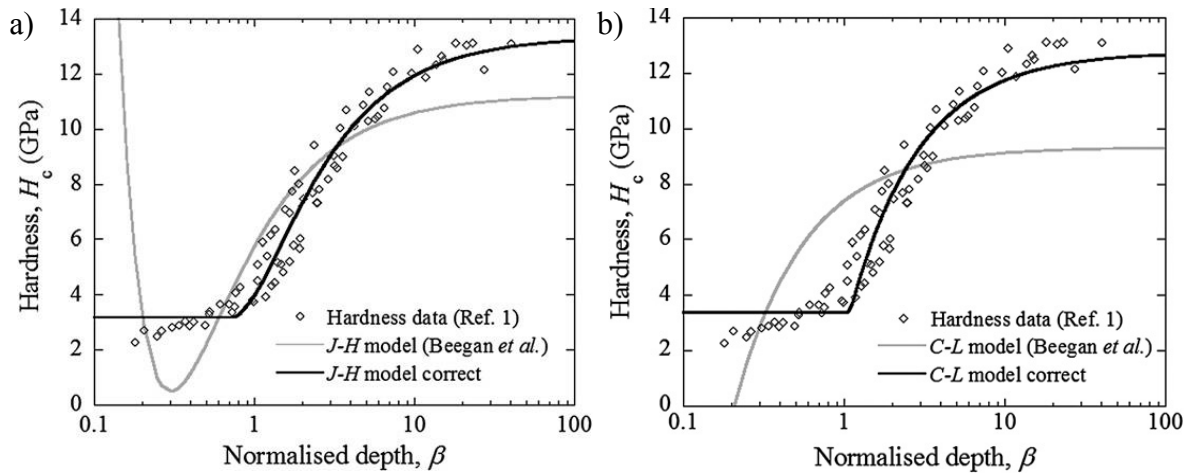


Fig. 3.4 : [Gui10] Variation de dureté du matériau revêtu selon la profondeur normalisée $\beta = h/t$. Les mesures [Bee08] pour des revêtements de cuivre d'épaisseurs, t , de 25 nm, 50 nm, 100 nm, 200 nm, 300 nm, 400 nm et 500 nm sont rassemblées (symboles - Hardness data). Les corrélations avec les modèles de dureté appliqués par Beegan sont présentées (trait gris – model (Beegan et al.)) et comparées aux modèles corrects (trait noir - model correct) [Gui10] pour : a) le modèle de Jönsson-Hogmark (J-H) et b) le modèle de Chicot-Lesage (C-L).

Une approche correcte a été développée dans [Gui10], initialement sans ISE (*Indentation size effect*), conduisant à l'évolution présentée en Fig. 3.4 a) (trait noir), démontrant la capacité du modèle J-H à prédire les évolutions expérimentales, et l'utilisation erronée de ce modèle par Beegan. Parallèlement, la valeur élevée du paramètre C (~ 0.72 - Table 3.1) est cohérente au regard du dépôt (*ductile sur dur*), et va dans le sens des observations rapportées par Gamonpilas [Gam04] ou Iost [Ios03] correspondant à des dépôts de films ductiles sur des substrats durs. Les valeurs seuils élevées de C , rapportées dans la littérature, de 0.5 [Che01] ou 0.75 [Sah02], dans le cas de dépôts ductiles, confirment notre analyse.

Paramètre	J-H [Bee08]	J-H [Gui10]	C-L [Bee08]	C-L [Gui10]	K [Bee08]	P-C [Bee08]
H_s [GPa]	11.23	13.36	9.32	12.77	12.64	12.73
H_f [GPa]	0.49	3.18	3.04	3.38	2.76	1.46
Constant	0.30	0.72	0.34	1.075	0.19	0.34
rms [GPa]	1.51	0.71	2.37	0.84	0.69	0.69

Table 3.1: [Gui10] Duretés prédites pour les films de cuivre de 25 nm à 500 nm et le substrat d'oxyde de silicium, après corrélation des modèles aux données expérimentales. L'ensemble des résultats proposés par Beegan [Bee08] et les valeurs obtenues par le modèle corrigé [Gui10] sont détaillés. La qualité de la corrélation est visible dans les évolutions du rms (root mean square – moyenne quadratique)

L'analyse critique du modèle J-H a été renouvelée pour l'approche C-L (Eq. (3) [Gui10]) montrant, également, que la valeur du paramètre a rapportée par Beegan [Bee08] était erronée, en dépassant l'unité, aux faibles indentations. De manière similaire à l'approche J-H, une indentation réduite doit amener à ne considérer que la dureté du seul film, l'aire d'influence du substrat étant inexistante. Une corrélation corrigée a été développée pour C-L (Fig. 3.4 b),

permettant de retrouver les résultats expérimentaux, comme rapportés dans la Table 3.1 donnant les estimations des propriétés des deux milieux d'intérêts, film et substrat. Les valeurs de dureté trouvées pour le substrat restent proches entre les quatre modèles ($\sim 12.77 - 13.36$ GPa). De même, les duretés du film sont similaires entre les approches (3.18 GPa / J-H et 3.38 GPa / C-L) permettant de conclure à la qualité de la démarche de modélisation entreprise ici.

Cette analyse critique nous a ensuite permis de nous intéresser à la modélisation de l'ISE, associé à l'effet du chargement imposé sur la mesure de dureté, notamment visible en tout début d'essai (section 4 de [Gui10]). Les approches couramment rapportées pour expliquer ce processus sont basées sur la théorie du 'Strain Gradient Plasticity' (SGP) [Fle94, Gao99], liant l'évolution des dislocations aux déformations mécaniques observées aux échelles supérieures. L'évolution de la dureté, H_{0f} , prend ainsi, pour un matériau homogène, la forme suivante :

$$H_f = H_{0f} \sqrt{1 + \frac{h_f^*}{h_c}} \quad (3.4)$$

où h_c est la profondeur de contact, H_f la dureté limite, et h_f^* une longueur caractéristique du matériau. Cette théorie est utilisée par Beegan [Bee08] pour expliquer, en début d'indentation, l'augmentation de dureté des films épais (950 nm et 1400 nm). Elle apparait, cependant, incorrecte au regard des analyses précédentes des mêmes auteurs, observant la formation de 'pile-up' (bourrelets), en pourtour d'indentation, correspondant à une remontée de matière. Ainsi, l'augmentation de dureté est, en premier lieu, due à l'évolution de l'aire de contact, comme expliqué par Chaudri et Winter [Cha98], ce qui n'est pas introduit par Oliver et Pharr [Oli92, Oli04] dans leur théorie sur l'indentation, pourtant utilisée par Beegan [Bee08]. L'effet de 'pile-up' peut se traduire, ainsi, par un modèle simple [Vin86], justifié par des considérations géométriques et la déformation du milieu ductile supérieur :

$$H_f = H_{0f} + \frac{B_f}{h} \quad (3.5)$$

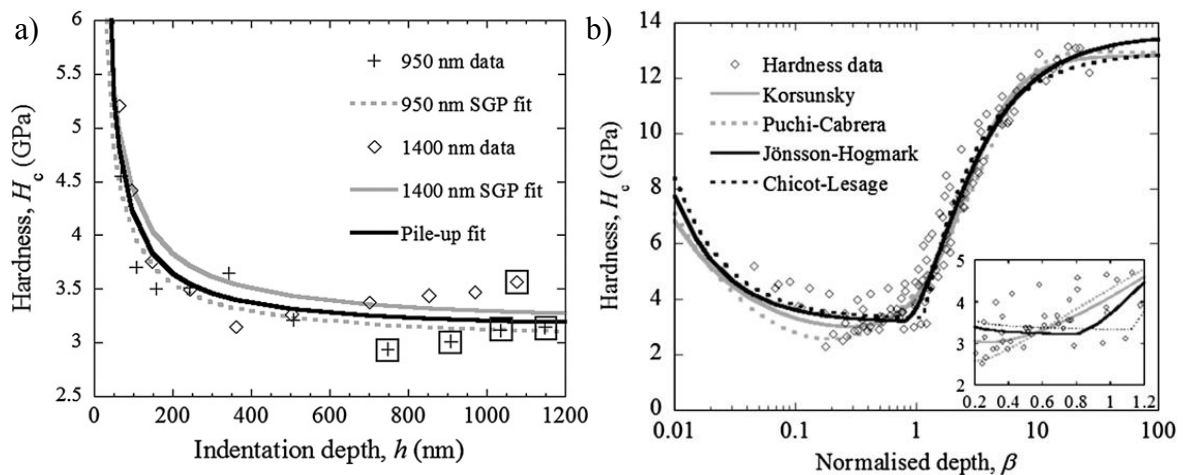


Fig. 3.5: [Gui10] a) Evolution de la dureté pour des revêtements de cuivre d'épaisseurs de 950 nm et 1400 nm. Les corrélations proposées avec les modèles SGP (traits gris) [Bee08] et celui lié à la formation de 'pile-up' (trait noir) sont comparées aux données expérimentales (symboles). L'analyse est limitée aux profondeurs inférieures à Ct (symboles non encadrés). b) Evolution de la dureté selon la profondeur normalisée pour l'ensemble des épaisseurs de revêtement de 25 nm à 1400 nm et comparaison des 4 modèles étudiés : K, P-C (corrélations développées par Beegan [Bee08]), J-H et C-L (corrélations développées par Guillemot [Gui10]).

L'introduction de ce modèle a enrichi l'approche initialement proposée, à travers son application aux duretés relevées dans les deux films épais, en début d'essai (Fig. 3.5 a). La corrélation par le modèle 'pile-up' (Eq. 3.5) des duretés mesurées, avant que le substrat n'influence la mesure, conduit à des évolutions proches des données expérimentales, expliquant simplement les observations rapportées, sans nécessité de théorie complexe telle la SGP. La valeur de dureté limite, H_{0f} (~ 3.10 GPa) se révèle également très similaire aux valeurs rapportées sur la modélisation complète (Table 3.1). Il est, ensuite, possible d'enrichir les modèles J-H et C-L (Fig. 3.4) en s'intéressant à la modélisation de l'intégralité des données rapportées pour les films de faibles ($t \leq 500$ nm) et grandes ($t \geq 950$ nm) épaisseurs. Nous montrons, en conclusion, la possibilité de retrouver, sur ces modèles intégrant l'ISE (Eq. 3.5), l'intégralité des observations, démontrant leur qualité, aussi correcte que les approches P-C ou K proposées par Beegan [Bee08] basées sur l'approche SGP (3.4). Il apparaît, à nouveau, que les modèles J-H et C-L sont pertinents pour prédire la dureté des matériaux mono- [Gui10] ou multi-couches [Rah09] mais restent souvent incorrectement appliqués.

- Pertinence des modèles de dureté sur films minces

Les analyses présentées [Rah09, Gui10], ont montré, dans le cadre de dépôts minces, la nécessité de développer des méthodologies rigoureuses. Le modèle J-H, en particulier, couplé avec une modélisation correcte de l'ISE, est apparu particulièrement efficient pour reproduire les comportements observés. Sur cette base, il a semblé nécessaire de développer une analyse plus large de la pertinence des modèles de dureté rapportés dans la littérature [Jos12]. En effet, les auteurs proposant un nouveau modèle justifient sa qualité par sa capacité à s'accorder aux mesures expérimentales de dureté, H_c , et en déduisent les propriétés du substrat, H_s , et du film, H_f . Cette démarche est éminemment critiquable car la grandeur inconnue n'est pas la dureté expérimentale, mais les propriétés spécifiques des domaines sollicités. Une étude large a, en conséquence, été proposée pour tester la 'robustesse' des modèles de dureté, à travers une méthodologie vérifiant leur capacité à prédire la 'véritable' dureté du film, un modèle 'non robuste' amenant des conclusions erronées sur les propriétés réelles des films. La démarche, basée sur une approche statistique, est appliquée sur les modèles J-H (Eq. 3.2), K (Eq. (4) [Gui10]) et P-C (Eq. (5) [Gui10]), le nombre d'inconnues différant entre ces modèles.

L'analyse s'est attachée à l'étude d'un échantillon d'acier inoxydable (Z12C13) recouvert, par dépôt électrolytique, d'une couche de nickel-phosphore de 55 μ m. Le matériau revêtu a été caractérisé mécaniquement, pour en déduire la dureté Martens, par essai continu (Fig. 3.6 a). Séparément, les essais d'indentation, sous différentes charges, montrent l'évolution du retour élastique (Fig. 3.6 b), sans conséquence sur les diagonales d'empreintes. Les duretés Vickers et Martens peuvent ainsi être supposées similaires. De plus, les duretés des seuls films et revêtements ont été, également, déterminées séparément. La démarche entreprise a consisté à rechercher les paramètres inconnus des trois modèles, par corrélation, sur la base des évolutions de dureté mesurées. Dans cet objectif, les paramètres inconnus de chaque modèle (J-H, K et P-C) ont été déterminés. Seule leur capacité à retrouver des valeurs de dureté 'connues' a été étudiée, indépendamment des données expérimentales. Afin d'éviter les biais liés à la répartition irrégulière des profondeurs de mesure, une linéarisation a été réalisée, amenant à une évolution régulière des profondeurs, auxquelles les trois valeurs de dureté ont été associées.

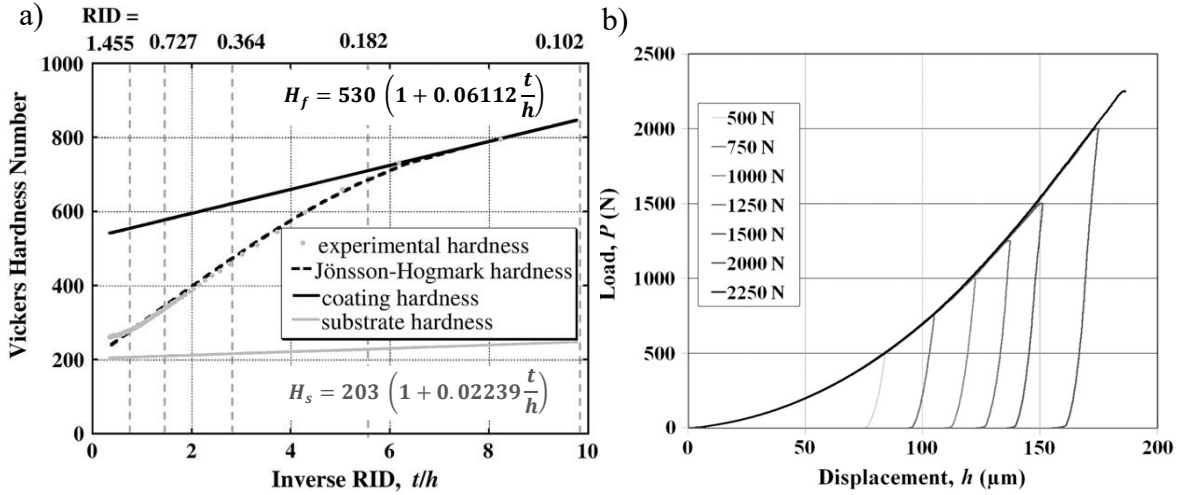


Fig. 3.6 : [Ios12] a) Essais force-déplacement comparant les duretés Vickers (observation d'empreinte) aux duretés Martens relevées en continu. b) Evolution de la dureté Vickers ($\sim$ Martens) selon l'évolution du RID, et indication des valeurs seuils utilisées pour tester la robustesse des modèles ($RID \geq 0.102$ à $RID \geq 1.455$). Les duretés du substrat (*substrate hardness*) et du revêtement (*coating hardness*) ont été mesurées séparément.

La démarche d'étude de la robustesse des modèles de dureté consiste à déterminer les propriétés mécaniques du film après introduction de deux effets sur les courbes, représentatifs des problématiques expérimentales habituelles. D'une part, les données sont tronquées pour différentes profondeurs seuils, de $10 \mu\text{m}$, $20 \mu\text{m}$, $40 \mu\text{m}$ et $80 \mu\text{m}$, en deçà desquelles les valeurs ne sont plus considérées. Nous nous plaçons, ici, dans les conditions de détermination expérimentale des propriétés mécaniques des films minces où les duretés à faibles épaisseurs ne peuvent être estimées. D'autre part, un bruit Gaussien ($\sigma = 0.1 \mu\text{m}$) de moyenne nulle est introduit, correspondant aux problèmes d'incertitude de mesure. Les propriétés du film (paramètres H_{0f} et α_f (Eq. 3.6)), peuvent, ainsi, être déterminées sur la base de cette approche pour un ensemble important de courbes 'numériques' avec une loi d'évolution spécifique :

$$H_f = H_{0f} \left(1 + \alpha_f \frac{t}{h} \right) \quad (3.6)$$

La dispersion des mesures obtenues est visible sur la Figure (3.7) où les résultats des modèles J-H et P-C sont présentés. Nous montrons que, même dans une situation où le nombre de mesures retenues est réduit (seuil de $40 \mu\text{m} \sim RID : t/h = 0.727$), les duretés estimées par le modèle J-H sont proches et retrouvent la dureté réelle du film (Fig. 3.6 b). La situation la plus défavorable (Fig. 3.7.a 2) donne encore des résultats acceptables, à la différence du modèle P-C, où les duretés se révèlent très dispersées. La faible robustesse de ce dernier est visible à travers des courbes au comportement incorrect (Fig. 3.7.b 2) et des effets ISE inversés. Des points pivots sont visibles, révélant la corrélation entre les estimations des paramètres. La représentation de ces résultats sous forme d'histogrammes (Fig. 3.8) illustre également les dispersions des estimations des propriétés mécaniques. Les paramètres restent, cependant, resserrés dans l'approche J-H, montrant sa fiabilité et sa robustesse pour l'ensemble des profondeurs étudiées [Ios12]. Ces conclusions sont contradictoires avec nombre d'observations de la littérature où ce modèle J-H est souvent incorrectement appliqué [Bur87, Kor98, Puc02, Bee08]. À l'inverse, l'approche P-C apparaît défaillante, comme montré dans les valeurs dispersées de H_{0f} ou α_f , pourtant en accord avec les données expérimentales (Fig. 3.7.b 2), illustrant ses limites et sa faible qualité, conduisant à estimer incorrectement les propriétés.

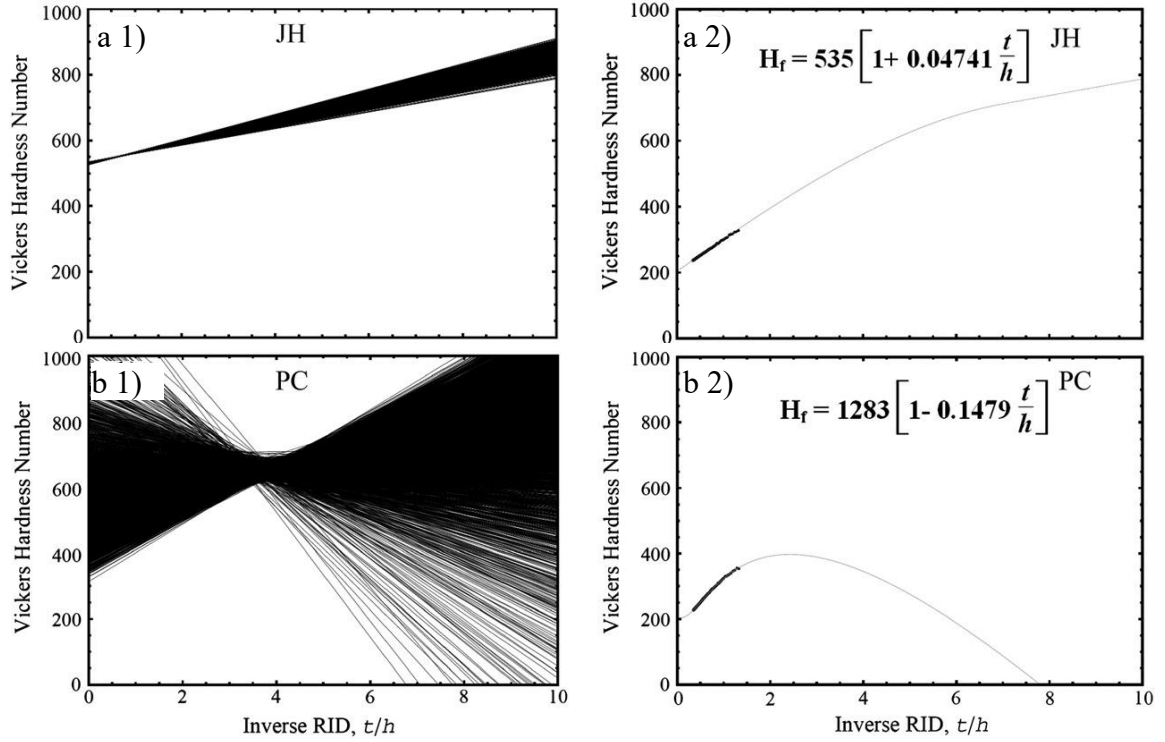


Fig. 3.7 : [Ios12] a1-b1) Evolution de la dureté du film selon l'inverse du RID, pour 5000 simulations de Monte-Carlo et une valeur de seuil de $40 \mu\text{m}$ (RID seuil de 0.727 – Fig. 3.6 a). Les modèles J-H (a) et P-C (b) sont présentés à travers les courbes de H_f (Eq. 3.6). a2-b2) Comparaison de la courbe de dureté à l'évolution complète de la dureté simulée, dans les cas les plus défavorables observés, et dureté du film associée.

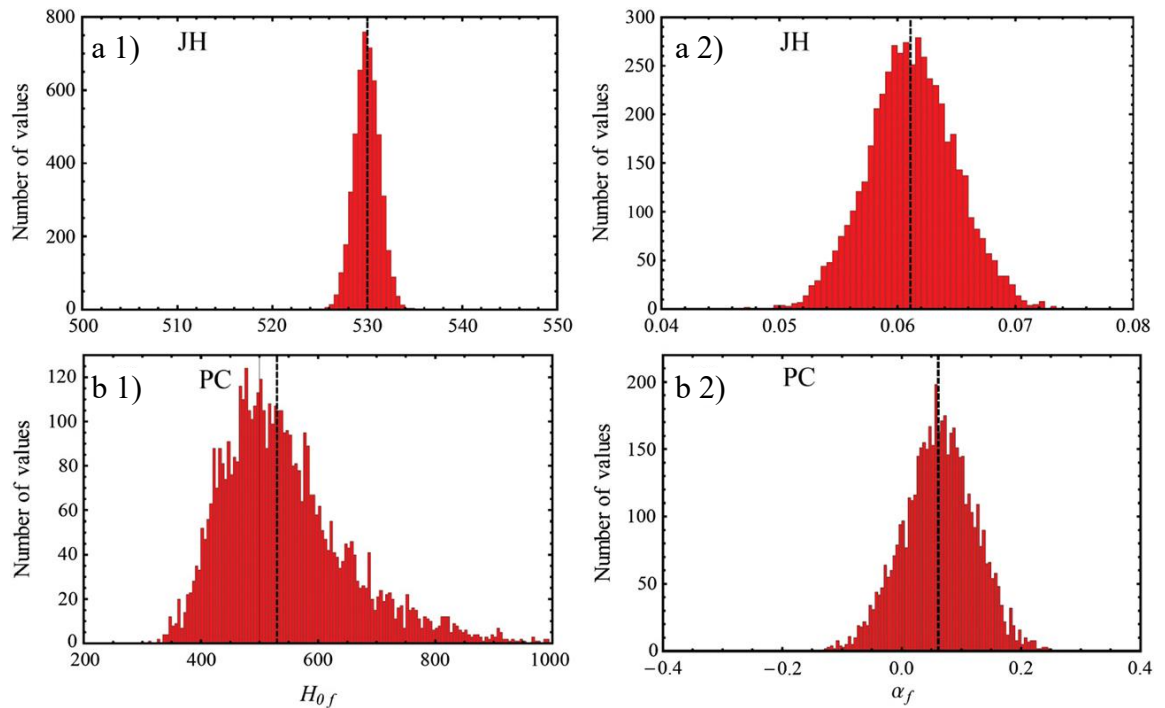


Fig. 3.8 : [Ios12] Histogramme des estimations des paramètres des deux modèles de duretés J-H et P-C pour les grandeurs H_{0f} (a1-b1) et α_f (a2-b2), pour 5000 simulations de Monte-Carlo et une valeur de seuil de $40 \mu\text{m}$ (RID seuil de 0.727 – Fig. 3.6 a). Seul les modèles J-H (a) et P-C (b) sont présentés ici.

ii. Caractérisation géométrique des surfaces

Les pièces industrielles ne peuvent présenter une parfaite régularité surfacique. Les procédés d'élaborations industriels, de parachèvement ou de finition conduisent à leur apporter une géométrie spécifique, à l'échelle micrométrique, pouvant évoluer tout au long du cycle de vie [Rap08]. La quantification de leur rugosité, à travers les paramètres associés, apporte, en conséquence, une information sur cet état géométrique, aux échelles de travail de la matière. Ce paramètre se détermine par l'analyse géométrique de la surface, à travers une mesure tactile – avec contact (rugosimètre 2D) ou optique – sans contact (interféromètre 3D), duquel les écarts de forme (longueur d'onde : $\lambda \geq 2 \text{ mm}$) et d'ondulation (longueur d'onde : $500 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 2 \text{ mm}$) ont été soustraits. De nombreux paramètres permettent la description géométrique des profils 2D. Ces paramètres d'amplitude ($R_a, R_q, R_p, R_{Sk}, R_{ku}, ACF \dots$), d'espacement ($HSC, P_c, S, S_m, r_p \dots$) ou hybride ($\gamma, \Delta_a, \lambda_a, \lambda_q \dots$) sont décrits et rappelés précisément par Gadelmawla [Gad02]. Il faut noter qu'une disparité dans la définition des paramètres a longtemps existé avant que des normes internationales générales n'émergent [Zan03], notamment portées par l'industrie automobile. Il est important de remarquer, également, la prolifération du nombre de paramètres de rugosité accessibles, utilisés dans la littérature, rendant difficile leur comparaison, et la vision de leur pertinence (*et en conséquence de leur utilité réelle !*). Whitehouse [Whi82] avait déjà noté, ironiquement, ce problème au début des années 80', observant une 'épidémie' de paramètres et détaillant ses causes (développements techniques et numériques, différence d'appréciations selon les pays ou industries, diversification des procédés ...). Des solutions doivent ainsi être proposées, à travers la recherche de la fonctionnalité réelle de chaque paramètre.

L'activité développée, présentée ci-après, autour de la caractérisation géométrique des surfaces s'est inscrite dans cette démarche, consistant à rechercher les paramètres réellement pertinents, et les conditions de leur mesure, pour une application donnée ou une fonctionnalité attendue. Elle s'est, de mon côté, concrétisée à travers le co-encadrement des doctorats de Benaamer Bounichane (2006-2009) et Zahra Khawaja (2009-2012), dirigés par le Pr. Maxence Bigerelle. Ces doctorants étaient rattachés au laboratoire Roberval de l'UTC. Durant leurs travaux, j'ai participé à proposer et développer des méthodologies originales destinées à analyser la pertinence des paramètres de rugosité, et guider leurs utilisateurs dans le choix des échelles de mesure, pour une application donnée. Les sections suivantes reviennent, ainsi, sur l'état de l'art de ce thème de recherche, en explicitant les notions et outils exploités par la suite, dans notre travail de recherche.

- Contexte - Analyse multi-échelle

L'une des caractéristiques des paramètres de rugosité est la nécessité de déterminer une échelle caractéristique de mesure (longueur d'évaluation), apte à rendre compte de leur influence. Dans cet esprit, les profils de rugosité mesurés sont, usuellement, redressés et analysés sur des longueurs spécifiques, dont l'appréciation est laissée à l'utilisateur. Cependant, un redressement réalisé par morceaux, présente le désavantage d'introduire artificiellement une rugosité aux points de coupures. Bigerelle [Big08], en particulier, a développé une approche multi-échelle pour la détermination du profil moyen dont l'intérêt est d'être basé sur les fonctions de type 'B-spline' [Far96]. Les points de contrôle de la B-spline sont ainsi les

inconnues à estimer, minimisant l'écart entre profils mesuré et moyen, les nœuds étant régulièrement espacés de la longueur d'évaluation. La minimisation entre mesure et B-spline, permet un accès immédiat à ces points de contrôle. Les profils obtenus après redressement (Fig. 3.9) présentent une continuité, évitant l'introduction d'une rugosité artificielle aux transitions entre domaines d'évaluation. L'ensemble de l'approche s'apparente à l'application d'un filtre passe-haut (en fréquence) révélant la micro-rugosité, en accord avec la visualisation des pièces au MEB [Big08].

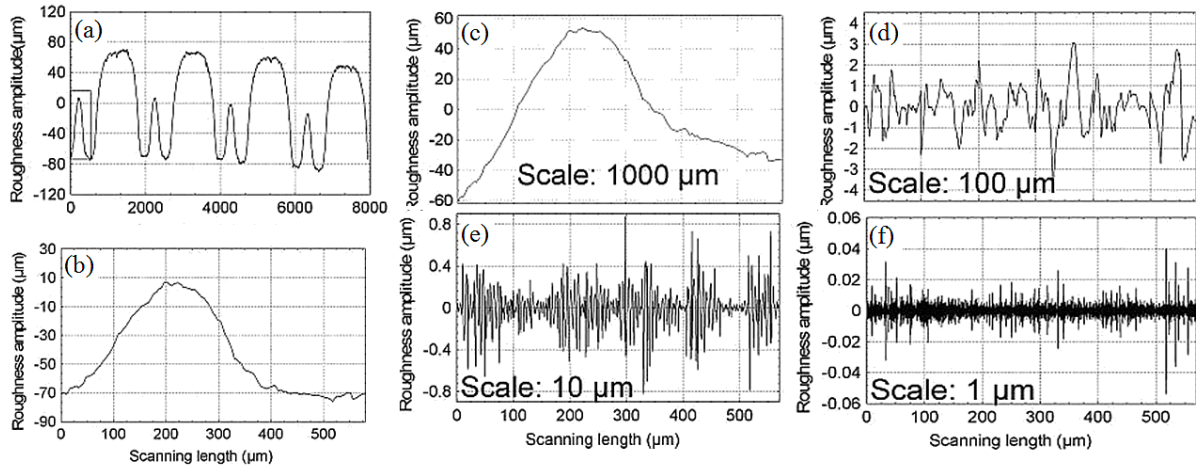


Fig. 3.9: [Big08] Analyse multi-échelle du profil de rugosité mesuré, redressé par une approche B-spline d'ordre 2, pour différentes longueurs d'évaluation : (a) profil initial (longueur de 7950 µm), (b) agrandissement du profil (domaine encadré en (a)), profils redressés pour différentes longueurs d'évaluation, L , (c) $L = 1000$ µm, (d) $L = 100$ µm, (e) $L = 10$ µm, (f) $L = 1$ µm (échantillon de polypropylène obtenu par procédé d'injection).

Une telle approche permet le développement d'une analyse multi-échelle de la pertinence des paramètres de rugosité, ainsi que de l'influence des paramètres procédés sur leurs valeurs. Dans cette démarche, l'analyse de la variance (ANOVA) est un outil puissant pour montrer et ordonner l'influence de chaque paramètre d'entrée. L'expression de chaque rugosité, R_i , est, ainsi, considérée comme dépendant (Eq. 3.7) linéairement (fonctions $\alpha(\cdot)$), d'une part, des paramètres procédés employés, ainsi que du traitement d'analyse, et d'autre part (fonctions $\beta(\cdot)$), de l'interaction mutuelle des paramètres procédés. Un bruit Gaussien (fonctions $\xi(\cdot)$), de moyenne nulle, permet, secondairement, de compléter l'expression pour obtenir la valeur de chaque mesure de rugosité. Dans le cadre des traitements présentés en figure (3.9), l'expression de la rugosité s'écrit [Big08], pour un profil ' n ' analysé :

$$\begin{aligned}
 &R_i(d, L, k_{j|1 \leq j \leq p}, n) \\
 &= \alpha_0(i, d, L) + \sum_{j=1}^p \alpha_j(i, d, L) + \sum_{j=1}^p \sum_{l=j+1}^p \beta_{j,l}(i, d, L) + \xi_{k_{j|1 \leq j \leq p}, n}(i, d, L)
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

où i représente l'indice du paramètre de rugosité mesuré, d le degré du polynôme utilisé pour redresser le $n^{\text{ème}}$ profil et L , la longueur des intervalles de redressement. Les p paramètres procédés ont été placés aux niveaux $k_{j|1 \leq j \leq p}$, que ces dernières grandeurs soient qualitatives (nature des outils, traitement, finition ...) ou quantitatives (effort, vitesse, dureté ...).

L'analyse de la variance [Cul89] démontre l'influence de chaque paramètre procédé, k_j , et de chaque approche de traitement sur une rugosité spécifique, R_i . En particulier, le caractère influençant d'un paramètre procédé k_j sur un paramètre de rugosité, R_i , est dans cette démarche, déterminable sur la base du critère de Fisher associé, $F[R_i(d, L, k_j)]$, défini comme le rapport de la variabilité interclasse (ou intergroupe), dans la configuration donnée par le niveau k_j , sur la variabilité intraclasse (ou intragroupe), expliquée par les seules évolutions internes à la classe de paramètre procédé [Big03, Big08, Big13], le rapport de ces quantités étant donné par une loi de Snedecor (*ou loi de Fisher*). L'intérêt de cette approche est de montrer, pour chaque paramètre de rugosité, le caractère significatif ou non de sa valeur, à travers l'importance de la grandeur $F[R_i(d, L, k_j)]$ dont il est possible d'étudier l'évolution. On détermine, ainsi, les longueurs caractéristiques pour lesquels le paramètre R_i évolue le plus significativement, et donc dépend le plus du choix du paramètre procédé k_j . Parallèlement, il est également possible de rechercher les paramètres réellement significatifs [Big03]. Cette approche d'analyse a été mise en œuvre dans le traitement par ondelettes des profils de rugosité [Big13], discuté par la suite. Il faut noter que cette démarche est développable, dans le même cadre, pour l'analyse de la pertinence des paramètres de rugosité 3D [Del14], mesurés par profilomètre optique.

- Méthodes de bootstrap

Les approches 'bootstrap' se sont développées depuis les années 70', tirées par le développement des outils informatiques et des moyens de calcul. Elles ont été formalisées par Efron [Efr79, Efr93], qui en a montré l'intérêt et la puissance. Ces méthodes d'inférence statistique consistent à déterminer la variabilité et la sensibilité des estimations faites de mesures physiques (variance, moyenne, ...), par une technique de rééchantillonnage. Partant d'un ensemble d'échantillons analysés, elles conduisent à réaliser de nouveaux échantillons représentatifs de la population, non pas tirés d'estimation des paramètres de la loi de distribution de l'échantillon, mais de la population des échantillons eux-mêmes, par tirage aléatoire de nouveaux échantillons. À travers un grand nombre de tirages, la stabilité et la pertinence des propriétés mesurées sont déduites. Dans le cadre de la détermination des paramètres de rugosité, détaillé ci-après [Big13], on viendra ainsi relever les rugosités associées aux profils constituant l'ensemble des échantillons. L'approche bootstrap montre, en particulier, son intérêt dans la définition d'un intervalle de confiance sur l'estimation faite de la pertinence des paramètres, classés à travers l'indice de performance $F[R_i]$, défini par le critère de Fisher [Naj03b].

- Traitements par ondelettes

Le traitement des signaux par ondelettes est une approche d'analyse multi-échelle comparable à celui lié à la décomposition par transformée de Fourier. Il se différencie, cependant, sur plusieurs points qui en font l'intérêt et la richesse, et explique son application dans des domaines aussi divers que la compression d'images [Ke07], la médecine [Soa06], la fatigue mécanique [Abd06], les structures atomiques [She08] ou les mécanismes de corrosion [Wei16]. Ainsi, l'ensemble des fonctions, $\Psi(\cdot)$ (*ondelette mère*) utilisables et accessibles est considérablement plus riche que les seules fonctions sinusoïdales. Il est possible de décomposer le signal en ondelettes de Daubechies, Coiflets, Symlets, de Morlet, de Haar, de Meyer ... selon les applications visées. Mezghani investigate ainsi près de 16 ondelettes différentes dont les applications sont pertinentes pour l'analyse des surfaces abrasées [Mez18] (Fig. 3.10 a), la

contrainte visée étant d'avoir une ondelette de forme similaire à celle du signal ou du processus étudié. Le choix de l'ondelette la plus pertinente est ainsi rapportée par différents auteurs [Mau11, Che10], comme l'étape la plus importante du traitement, car garantissant une décomposition précise du signal originel en différentes fréquences propres à son analyse, permettant de décomposer le signal en des résolutions de fréquences séparées et distinctes. En ce sens, la fonction d'ondelette semble devoir être adaptée à chaque application ou analyse visée, dépendant du contexte d'étude. Les travaux que je détaillerai ci-après [Big13], réalisé dans le cadre des travaux de l'équipe CPP (Arts et Métiers, Centre de Lille), en collaboration avec le laboratoire Roberval (UTC), reviendront cependant largement sur cette idée.

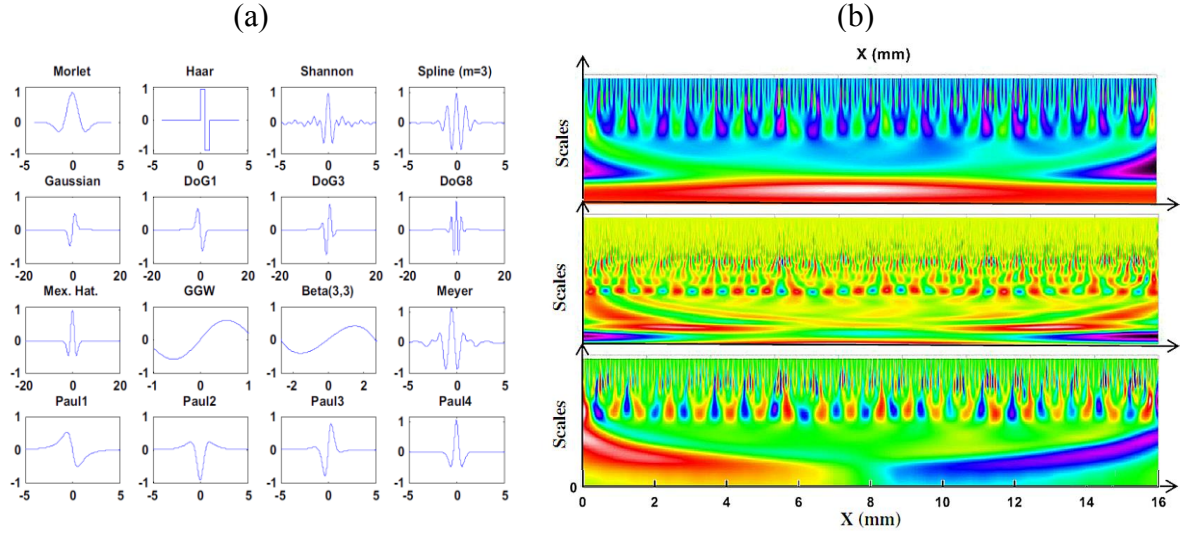


Fig. 3.10 : [Mez18] a) Exemples d'ondelettes mères de la littérature b). Intensité des coefficients de la décomposition par l'utilisation d'ondelettes mères de type (haut \ bas) Chapeau mexicain, Morlet et Paul 2.

Le principe de la décomposition en ondelette est détaillé en section 4 de [Big13]. Il se réalise à travers une déformation large de l'ondelette mère, pouvant s'interpréter comme un filtre multi-fréquence, conduisant à travailler autant en position spatiale qu'en fréquence. Ainsi, on définit la transformation continue d'une ondelette d'un signal $f(t)$ – ici temporel – par les coefficients d'ondelettes $c(s, \tau)$ associés à l'ondelette $\psi_{s,\tau}(t)$, déformée de l'ondelette mère $\Psi(.)$:

$$c(s, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \psi_{s,\tau}(t) dt \quad \text{où} \quad \psi_{s,\tau}(t) = \frac{1}{\sqrt{s}} \Psi\left(\frac{t-\tau}{s}\right) \quad (3.8)$$

L'ondelette mère $\Psi(.)$ est, ainsi, décalée en temps, τ , et déformée en fréquence, s . La connaissance de l'ensemble des coefficients $c(s, \tau)$ ($\tau \in]-\infty, +\infty[$, $s \in]0, +\infty[$) permet la reconstruction complète du signal d'origine. En pratique, on démontre que la connaissance des coefficients sur un ensemble dénombrable (*et non pas continu*) de valeurs suffit à retrouver le signal d'origine. De plus, on applique également des dilatations ou contractions dyadiques, par un facteur d'échelle, $s = 2^{-j}$, et des translations binaires d'intensité, $\tau = k \times 2^{-j}$. Les ondelettes de base $\psi_{j,k}$, déformées de l'ondelette mère, représentent approximativement un signal dans un rectangle de largeur 2^{-j} en espace et de largeur 2^j en fréquence, sans cesse réduit par l'augmentation du niveau d'analyse j . Le traitement d'un signal discrétisé donne la possibilité d'accéder, pour les différentes valeurs de (k, j) , aux amplitudes des coefficients d'ondelette, avec un accès, simultanément, aux positions temporelles, pour un signal en temps, ou spatiales, pour un signal en position, et aux fréquences propres des ondelettes déformées les

plus significatives. En ce sens, l'augmentation progressive en fréquence conduit à développer une analyse multi-échelle permettant de retrouver les échelles temporelles ou spatiales significatives où la décomposition montre des pics caractéristiques, signes d'un traitement pertinent. À titre d'exemple, la Figure 3.10 b) illustre les résultats obtenus dans le cadre de l'analyse d'un profil de rugosité (i.e. spatial), selon différentes ondelettes. Sur l'intérêt du traitement du signal par décomposition en ondelettes, et les méthodologies associées, une littérature très large est accessible, montrant la diversité et la richesse de ses applications. On peut citer, comme ouvrage de référence, le livre de Mallat [Mal00] qui pourra être lu avec profit.

- Echelles pertinentes de mesure

Comme indiqué précédemment, l'un des axes de recherche poursuivis dans le cadre des doctorats encadrés a porté sur l'estimation des échelles pertinentes de mesures des paramètres de rugosité. Ainsi, les procédés de traitement des surfaces (grenaillage, polissage, rectification, toilage ...) amènent à une évolution géométrique des surfaces dans le but, notamment, d'améliorer leur durabilité, leurs propriétés d'usage ou de leur conférer de nouvelles fonctionnalités. La détermination de ces paramètres, et des propriétés associées, demeure une difficulté majeure. Comme nous l'avons souligné, un grand nombre de paramètres sont accessibles dans la littérature, mais la connaissance des propriétés qu'ils confèrent aux surfaces peut être source de difficultés. Cependant, le problème de la pertinence des échelles spatiales de mesure est, également, une question primordiale. Comme indiqué précédemment, dans le cadre des activités communes entre l'équipe CPP et le laboratoire Roberval, nous nous sommes intéressés à la détermination de ces échelles pertinentes, à travers les réponses à apporter aux problématiques suivantes [Big13] :

- *Comment sélectionner l'échelle de mesure la plus pertinente (i.e. la plus différenciante) donnant la plus grande différence de rugosité entre des groupes d'échantillons ayant subi des procédés de traitement de finition de niveau ou d'importance différents ?*
- *Quel paramètre de rugosité permet de mieux quantifier cette différence entre niveau de traitement s'il est significatif ?*
- *Est-ce que cette différence dépend de la nature de l'ondelette utilisée en prétraitement pour analyser le 'signal' correspondant au profil de rugosité spatial ? et quelle méthode de filtrage apparaît la plus pertinente (filtrage haut, bas, ou de détail) ?*

Afin de répondre à ces questions sur l'échelle 'pertinente', c.a.d. représentative du procédé employé, un travail poussé d'analyse des paramètres de rugosité a été développé, en travaillant sur des mesures réalisées sur les parties internes de roulement à bille (acier 100Cr6), ayant subi un traitement de toilage [Big13]. Dans ce procédé, différents paramètres sont ajustables, influant sur l'état de surface final. En l'état, 7 paramètres procédés ont été investigués (*raideur de contact du galet, taille de grain du tissu, pression de contact, vitesse de rotation de la pièce, vitesse du tissu, temps de cycle et fréquence d'oscillation*), à travers un plan d'expérience Taguchi [Kam11] (Table 2 [Big13]). La figure 3.11 a) présente une des surfaces abrasées, sur lesquelles différents profils ont été analysés. Le procédé est, par nature, stochastique, conduisant à des mesures de paramètres de rugosité dispersées selon des lois normales, aptes à être analysées par des approches en analyse de la variance (ANOVA) précédemment décrites, et des mesures du critère de Fisher, F .

En pratique, en reprenant les considérations rapportées dans la littérature sur le choix le plus pertinent d'ondelette pour décomposer un signal, il apparaît qu'une ondelette de type 'Coiflet' aurait été intéressante pour décomposer le profil de rugosité, sa forme l'apparentant à celle d'une rayure, et reproduisant le profil d'une usure unique. Cependant, l'objectif de recherche élargie poursuivi nous a conduit à traiter les décompositions à travers 8 types d'ondelettes différentes (Fig. 7 [Big13]). Plus complètement, en reprenant la démarche de Khawaja [Kha14], trois types de décomposition sont accessibles pour caractériser la topographie, pour une fréquence de coupure donnée, celle associée spécifiquement à l'ensemble des ondelettes de plus grande longueur d'ondes (A - *ondulation*), celle aux plus petites longueurs d'ondes (B - *rugosité*) et la décomposition classique (D - *détail*) pour la fréquence donnée (*ondelette unique*). La décomposition se développe, ainsi, par cascade, à travers des fréquences de plus en plus réduites, et donc des longueurs d'onde plus importantes (Fig. 8 [Big13]). Cette décomposition permet une recherche élargie de l'échelle pertinente en calculant, sur chaque profil décomposé, les grandeurs $q_i(\varepsilon, w, d, K, n)$ (paramètre de rugosité q_i , profil n , surface toilée avec les paramètres K , décomposition au niveau d par l'ondelette de type w).

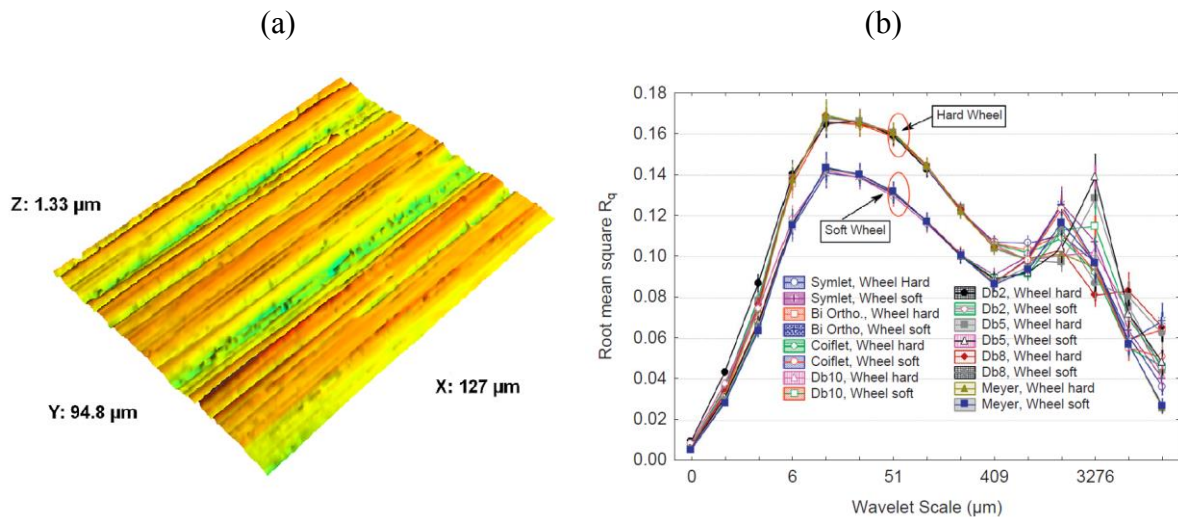


Fig 3.11: [Big13] a) Signal obtenu par interférométrie optique sur une surface abrasée (640 × 480 points). b) Evolution du paramètre de rugosité R_q (moyenne quadratique) selon l'échelle d'analyse pour deux niveaux de raideur de contact du galet (*Hard wheel* et *Soft wheel*). Le traitement est réalisé après décomposition du signal en ondelettes à une échelle donnée (Wavelet Scale). Les 8 traitements par ondelette proposés sont détaillés.

L'ensemble des profils étudiés avaient une longueur de 8000 μm et 30 profils ont été mesurés sur chaque échantillon traité. La figure 3.11 b) présente les évolutions moyennes du paramètre de rugosité R_q analysé pour la raideur de contact des galets 'Hard' et 'Soft', et la décomposition D . Cette première analyse démontre que le paramètre dépend de l'échelle d'analyse, deux longueurs caractéristiques étant mise en évidence, à $\sim 18 \mu\text{m}$ et $\sim 2000 - 3000 \mu\text{m}$ (cette dernière étant peu pertinente car de l'ordre de longueur des profils). Des interactions méso-/macro- plus complexes pourraient expliquer ce résultat. Une différence claire des paramètres mesurés avec les deux contacts est mise en évidence. Cependant, on observe que le choix de l'ondelette affecte très peu la valeur des paramètres mesurés, pour l'ensemble des échelles, contrairement à l'intuition initiale, et aux conclusions habituellement rapportées dans la littérature. Afin de poursuivre cette analyse, et répondre aux questions posées, une analyse de la variance a été développée (section 5 [Big13]), en reprenant la stratégie de rééchantillonnage par Bootstrap.

Ainsi, les paramètres de rugosité déterminés sont considérés comme dépendant du choix des paramètres procédés, k_i , et de leurs interactions mutuelles (k_i, k_j) à travers, respectivement, les coefficients α_{i,k_i} et β_{j,k_i,l,k_l} de la relation (3.9). Une stratégie de Bootstrap vient également compléter l'analyse de la variance, les profils étudiés étant suréchantillonnés pour déterminer les coefficients $F(q_i, w, d, \varepsilon, k_i)$. Le critère de Fisher a, ainsi, été estimé selon les échelles spatiales d'analyse pour les 7 différents paramètres de toilage étudiés.

$$q_i(w, d, \varepsilon, k_i, n) = \alpha_0(i, w, d, \varepsilon) + \sum_{j=1}^p \alpha_{j,k_j}(i, w, d, \varepsilon) + \sum_{j=1}^p \sum_{l=j+1}^p \beta_{j,k_j,l,k_l}(i, w, d, \varepsilon) + \xi_{k_j|1 \leq j \leq p, n}(i, w, d, \varepsilon) \quad (3.9)$$

La figure 3.12 a) présente les évolutions du paramètre $F(R_q, w, D, \varepsilon, K)$, K désignant la raideur de contact du galet, pour les ondelettes étudiées. L'échelle d'analyse couvre l'ensemble des longueurs investiguées. La figure montre que la raideur de contact du galet influence l'amplitude du critère F à différentes échelles. Ces résultats s'expliquent par la capacité de la raideur de contact à transmettre la pression à chaque grain du tissu de toilage, cet effet étant marqué sur la rugosité R_q à toutes échelles. Sa réduction influence cette rugosité, de manière visible, pour des échelles d'analyse de $\sim 2 \mu\text{m}$ et $\sim 100\text{-}200 \mu\text{m}$. La figure 3.12 b) montre les mêmes analyses pour la taille de grain. On observe que ce paramètre apparait plus significatif sur la valeur de R_q , la valeur de F étant dix fois plus importante. Il est remarquable, cependant, que le choix de l'ondelette reste peu influent au regard des incertitudes, même si les ondelettes Daubechies 2 et 10 sont légèrement écartées vers les plus faibles longueurs d'onde.

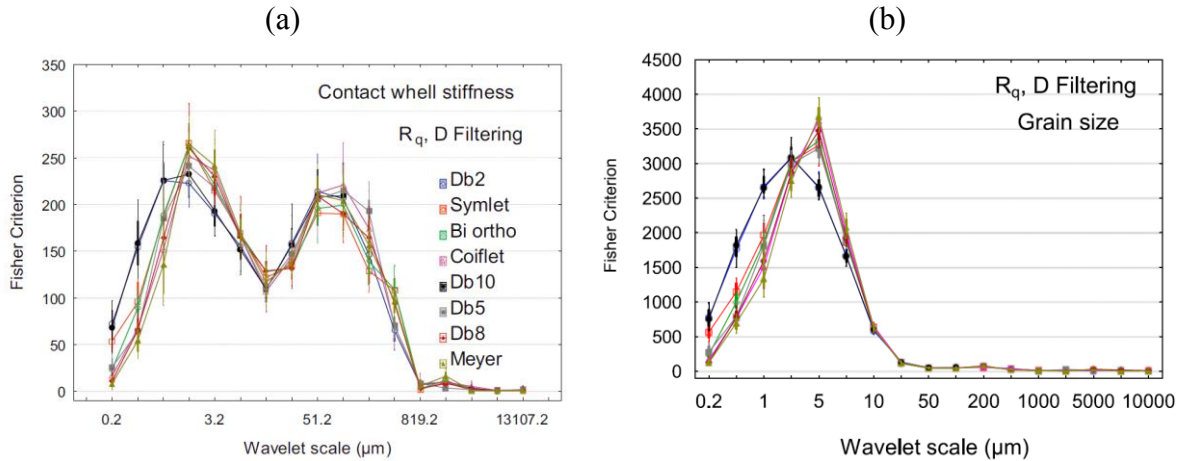


Fig 3.12 [Big13] : Graphe multi-échelle a) Evolution de la pertinence, F , pour le paramètre de rugosité R_q calculé avec la décomposition D , utilisée pour caractériser l'effet de la raideur de contact du galet. L'analyse est renouvelée pour l'ensemble des 8 ondelettes. L'incertitude indiquée est issue de l'analyse en Bootstrap. b) Démarche similaire, développée dans le cadre de l'analyse de l'effet de la taille de grains de la toile ($9 \mu\text{m}$ vs. $40 \mu\text{m}$).

L'insensibilité du choix d'ondelette sur la pertinence des paramètres de rugosité à 'signer' le paramètre procédé utilisé peut paraître surprenante. Afin de confirmer ce résultat, un nouvel outil d'analyse de la variance a été proposé, quantifiant, numériquement, l'influence de l'ondelette sur la valeur du critère F , afin d'éviter de faire des hypothèses, pour un modèle, entre paramètres procédés et paramètres de rugosité. Ainsi, chacune des 16 expériences réalisées selon le plan Taguchi précédemment évoqué est considérée comme indépendante des

autres. L'objectif est de répondre à la question posée, de savoir si le choix de l'ondelette influence la mesure de la pertinence du paramètre de rugosité entre les différentes expériences. Le modèle donnant l'expression de la rugosité est ainsi présenté à l'équation (3.10). À chaque type de décomposition (d) et échelle d'analyse (ε), la rugosité q_i est considérée comme influencée linéairement par le choix de l'expérience, $\alpha_e(i, d, \varepsilon)$, et celui de l'ondelette, $\alpha_w(i, d, \varepsilon)$, ainsi que par les effets croisés des deux paramètres ($\beta_{e,w}(i, d, \varepsilon)$).

$$q_i(\varepsilon, d, w, e, n) = \alpha_0(i, d, \varepsilon) + \alpha_e(i, d, \varepsilon) + \alpha_w(i, d, \varepsilon) + \beta_{e,w}(i, d, \varepsilon) + \xi_{e,w,n}(i, d, \varepsilon) \quad (3.10)$$

La figure 3.13 a) montre l'évolution du critère de Fisher pour les deux paramètres analysés, choix de l'expérience (Experiment effect) et choix de l'ondelette (Wavelet effect), dans le cadre de R_q . Le paramètre associé à l'expérience est significatif à toute échelle, indiquant que la mesure de rugosité est largement influencée par les conditions de finition, et cela pour l'ensemble des longueurs d'onde, même si le caractère significatif est, plus particulièrement visible, dans l'intervalle $[0.2 \mu\text{m}, 200 \mu\text{m}]$. L'effet du choix de l'ondelette est plus marqué aux faibles longueurs ($< 4 \mu\text{m}$) et insignifiant ensuite. Les effets d'interaction ne sont pas significatifs. Un graphe cumulé des différentes valeurs de F calculées a été réalisé (Fig. 3.13 b). Il montre, également, l'absence d'effet du choix de l'ondelette sur la répartition des valeurs.

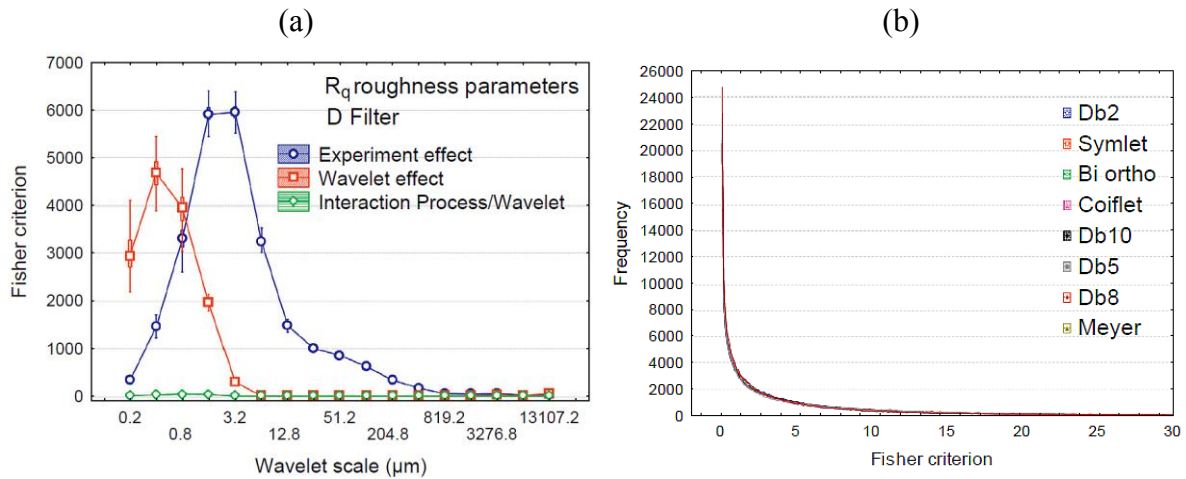


Fig. 3.13 : [Big13] a) Evolution du critère de pertinence de Fisher, F , pour le paramètre R_q analysé avec le signal de détail (D). Estimation des pertinences associées aux effets des paramètres procédés (Experiment effect), à celui du choix de l'ondelette (Wavelet effect) et aux effets d'interaction (Interaction Process/ Wavelet). b) Histogramme de la valeur de F pour un calcul du paramètre de rugosité sur l'ensemble des échelles d'analyse.

Ce travail a montré l'intérêt de la décomposition en ondelette pour la recherche des paramètres pertinents de rugosité et des échelles d'analyse. Cette méthode de décomposition quantifie et localise les échelles d'abrasion associées aux procédés de finition, dans le cadre d'une étude multi-échelle. Cependant, la recherche de l'échelle de mesure, et du paramètre procédé influent, n'apparaissent pas dépendre du choix d'ondelette, l'ensemble de celles-ci conduisant aux mêmes conclusions, ce qui est remarquable. Aucune ondelette ne semble, en conséquence, mieux à même de discriminer la morphologie associée à un processus d'abrasion, ce même si les rugosités calculées peuvent être différentes. Ainsi, bien que l'importance des mesures de rugosité dépendent, très certainement, du choix d'ondelette, l'influence relative des paramètres procédés sur ces grandeurs semble rester du même ordre de grandeur.

iii. Corrosion par piqures

La corrosion des alliages métalliques est une problématique majeure dans le milieu industriel. Différents rapports économiques montrent son importance économique, et ce, dans des secteurs variés. Elle représente près de 4 % des coûts de production pétroliers, soit 35 milliards de dollars par an [Rop10]. À l'échelle des Etats-Unis, son coût total, en se limitant aux secteurs industriels majeurs, a été estimé à près de 138 milliards de dollars, dont 48 milliards pour les secteurs des services (électricité, gaz, eau ...) et 30 milliards dans les transports, dans un rapport détaillé, et régulièrement cité, du NACE [Nac02]. Un chiffre, ancien, indique, également, que près du quart de la production annuelle d'acier [Lan03], seraient détruites par la corrosion chaque année. Des études prospectives, plus récentes, confirment ces chiffres avec des taux discutés de 15 % à 33 %, amenant à des pertes annuelles pouvant atteindre 645 Mt (voir Fig. 1 [Ian22]). Ces chiffres démontrent, en conséquence, l'importance de ce phénomène et son impact économique majeur dans notre société actuelle.

Les mécanismes de corrosion conduisent, ainsi, à la dégradation continue des alliages, sous l'effet de leur environnement, et à l'affaiblissement de leurs propriétés en service, par une diminution de tenue mécanique (*équipement mécanique, soudure ...*), une perte d'étanchéité (*citerne, tanker ...*) ou simplement un aspect inesthétique (*véhicule, ...*). Différents mécanismes de corrosion ont été mis en évidence. La corrosion uniforme se réalise par une dégradation homogène de la surface des matériaux. À la différence de cette dernière, la corrosion par piqures est localisée, se développant autour des défauts surfaciques des matériaux. Elle conduit, dans des situations extrêmes, à leur perforation, ou, plus généralement, à l'aggravation des endommagements induits par sollicitations mécaniques. Dans le domaine de la corrosion par piqures, l'analyse des risques consiste, en particulier, à déterminer la probabilité de perforations d'installation en service. La corrosion par piqures se révèle particulièrement préoccupante pour les alliages métalliques passivables utilisés au contact d'environnements corrosifs généralement sévères et de nombreux travaux sont menés pour étudier ses mécanismes. Des recherches sont également entreprises pour développer une analyse statistique autour de la distribution de ces piqures, autant dans l'étude de leur développement que de la détermination de la plus grande profondeur de défauts rencontrés. On peut citer les travaux de Shibata [Shi91], de Valor et Caley [Val07, Val10, Cal09, Riv08] ou Laycock [Lay93] comme références. L'un des objectifs industriels consiste, en particulier, à estimer la profondeur maximale de piquuration rencontrée sur une surface dont l'analyse n'a pu être réalisée que partiellement, pour des raisons de coûts ou de temps. Cette démarche statistique apparaît naturelle lorsque l'on considère l'étude de structures de grandes dimensions (tankers, pipelines, conduites ...) mais également de structures de dimensions modestes, produites en grand nombre (emballage alimentaire, pièce automobile ...). Ce travail a donné lieu, dans l'équipe CPP, au doctorat de A. Jarrah (2006-2009, Financement HEI) portant sur le 'Développement de méthodes statistiques et probabilistes en corrosion par piqures pour l'estimation de la profondeur maximale' et son application à l'aluminium de nuance A5. Afin de présenter ce travail, nous reviendrons sur les principaux outils statistiques de la littérature exploités pour l'estimation des valeurs extrêmes. Nous présenterons, ensuite, une démarche originale, améliorant ces méthodes, et appliquée, ici, pour l'estimation des profondeurs de piquuration dans le contexte de l'étude mentionnée.

- Contexte – Corrosion des alliages métalliques

Les mécanismes de corrosion surfacique restent complexes à analyser. Ils se caractérisent par la dégradation des alliages sous l'effet conjugué de leurs propriétés et leur milieu de travail [Baï00, Lan03] montrant l'importance du couple matériau / milieu. La corrosion est définie à l'opposé des comportements d'immunité (*absence de réaction électrochimique*) ou de passivité (*formation d'une couche protectrice 'film passif'*). Ainsi, dans une gamme de potentiel de travail donnée, la surface de ces alliages passivables se prémunit de la corrosion par le développement d'un revêtement protecteur d'épaisseur nanométrique dont la nature reste encore sujet à étude, discussion et recherche [Ols03, Mau12]. Le mécanisme de piqures correspond à la rupture localisée de ce film passif (Fig. 3.14.a) au-delà d'une valeur de potentiel critique appelé potentiel de piquuration. L'amorçage des piqures se fait au niveau d'hétérogénéités du film passif telles des inclusions émergentes en surface [Riv08].

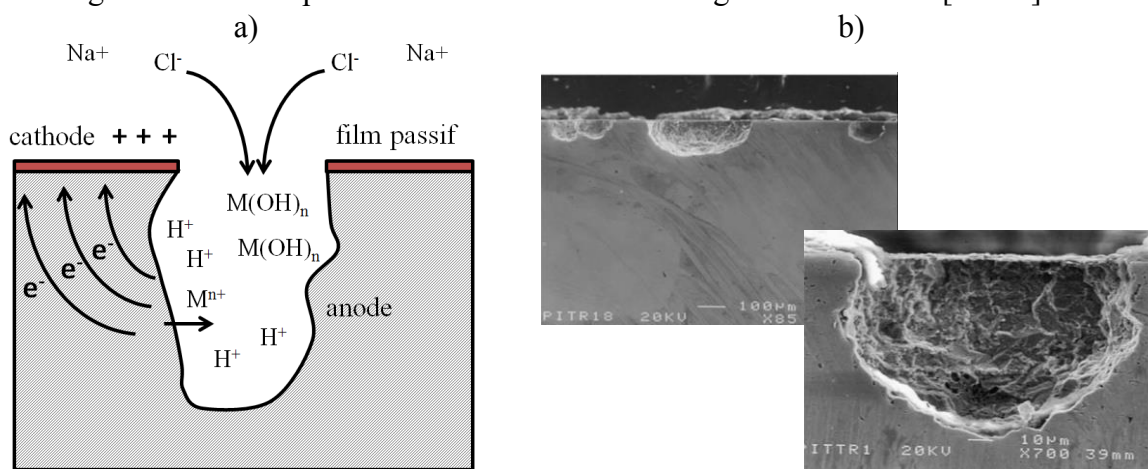


Fig. 3.14 : a) Mécanisme de corrosion par piquage sur une surface métallique passivée, en milieu salin, montrant les domaines caractéristiques et la rupture du film passif. La partie interne est le siège d'une réaction d'oxydation (réaction anodique). Des réactions de réduction (réaction cathodique) se développent en surface. b) [Riv08] Piqures de corrosion observées après découpe transverse sur des échantillons d'acier APL-5L X52 (pipeline) après une corrosion contrôlée de 7 jours et 30 jours dans un milieu riche en ions SO_4^{2-} et Cl^- .

Par la suite, le mécanisme de corrosion localisée amène un excès d'ions M^{n+} en fond de piqures, qui, à travers une réaction d'hydrolyse, sont transformés en hydroxyde $\text{M}(\text{OH})_n$. Il s'accompagne également de la production d'un excès d'ion H^+ qui accélère la propagation des piqures par l'abaissement local du pH. La figure 3.14.b) présente des profils typiques de corrosion par piqures, observés expérimentalement, sur des échantillons découpés. En première approche, les piqures évoluent par un mécanisme de croissance contrôlé par la diffusion des espèces chimiques présentes dans la cavité formée [Lay03, Mel08].

- Analyse probabiliste

Le traitement statistique des valeurs mesurées est une problématique usuelle dans le domaine expérimental. Ainsi, partant d'un jeu de données $\{E_i\}_{1 \leq i \leq n}$ correspondant à une série d'observations, il est naturel de rechercher, en premier lieu, la loi sous-tendant ces observations et d'estimer les paramètres de cette loi. La confirmation de sa validité (*ou plus fréquemment sa non-invalidation !*) peut être réalisée par la comparaison des données à des lois connues, courantes (*e.g. Normale ou Log-normale*), et l'utilisation de tests statistiques comparant les observables, $\tilde{E}_i$, aux valeurs espérées, E_i , tels les tests du Chi-2, de Kolmogorov-Smirnov ou

d'Anderson-Darling ([Nis12] ou [Jar09], section 1.6). Cependant, l'estimation des valeurs maximales attendues, et de leur fréquence, est, en complément, d'un grand intérêt. Un tel traitement statistique permet, plus particulièrement, d'accéder aux probabilités de survenue d'évènements rares, voire exceptionnels, et à l'importance de leur valeur. Dans cet objectif, l'utilisation directe de la loi estimée sur l'ensemble des observables reste problématique. En effet, elle est influencée par les valeurs proches de la moyenne, les plus fréquemment rencontrées, et donc les plus influentes pour la détermination de la forme de la loi et de ses paramètres. En conséquence, l'estimation des maximaux requiert, par nature, un travail basé non sur l'ensemble des valeurs, mais sur un nombre restreint et sélectionné des plus grandes valeurs, représentatives des extremums observés expérimentalement. Le travail fondamental théorique dans ce domaine est celui de Fisher-Tippet (1928), à travers le *théorème des valeurs extrêmes* (TVE). Ce théorème est analogue au classique théorème central limite (TCL), mais s'applique à la valeur maximale d'un ensemble de variables aléatoires (V.A.) indépendantes et de même loi. Les travaux du statisticien Gumbel [Gum58] sont précurseurs dans l'application pratique de cette théorie à l'estimation des valeurs extrêmes. Une approche plus générale (*Generalized Extreme Value distribution*, ou *GEV*) a été proposée par Jenkinson [Jen55], au-delà de l'approche de Gumbel. Considérant une variable aléatoire X , dont n réalisations $\{X_i\}_{1 \leq i \leq n}$ sont données, la fonction de répartition, $G(\cdot)$, associée à la loi de distribution du maximum de ces grandeurs, si elle converge, après normalisation, prend la forme :

$$G(x) = \begin{cases} \exp\left(-\left[1 + \xi \frac{x - \mu}{\sigma}\right]_+^{-1/\xi}\right) & \text{si } \xi \neq 0 \quad \text{où } [x]_+ = \max(0, x) \\ \exp\left(-\exp\left(-\frac{x - \mu}{\sigma}\right)\right) & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

Les termes μ , σ et ξ sont respectivement les paramètres de localisation, d'échelle et de forme. Les types I (Type Gumbel), II (Type Fréchet) et III (Type Weibull) sont respectivement obtenus pour $\xi = 0$, $\xi > 0$ et $\xi < 0$. Il est à noter que la loi de Weibull est bornée à droite, donnant une limite au maximum. De manière générale, les valeurs maximales obéissent à la loi de Gumbel pour les lois de distributions ayant une queue de décroissance exponentielle à l'infini, telles les lois Normales ou Log-Normale. Il convient de rappeler ici l'exploitation *naïve* de ces lois proposées par Gumbel [Gum58], dans sa démarche d'estimation des maxima, en particulier dans le cadre nous intéressant de l'estimation des valeurs extrêmes de profondeurs de piqures.

Dans cette approche, appelées des '*maximas par bloc*' (*block maxima* - *BM*), les surfaces d'observations, pour des données spatiales, sont découpées en intervalles de tailles similaires, et les valeurs maximales de chaque bloc retenues pour estimer, a posteriori, le maximum attendu sur une surface élargie. Cette approche est la plus couramment utilisée, en corrosion, pour l'estimation des valeurs extrêmes, la loi de Gumbel ($\xi = 0$) étant également la plus commune pour le traitement statistique [Shi91, Shi96, Azi56]. La Fig. 3.15 illustre cette approche dans le cadre d'un ensemble de piqures dont on recherche le maximum de profondeur. Un ensemble restreint de domaines sont sélectionnés (Fig. 3.15 a) et la valeur maximale de profondeur de piqure est retenue dans chaque domaine analysé. Les valeurs, ordonnées, permettent de reconstituer la fonction de répartition $G(\cdot)$, ensuite estimée par régression linéaire (Fig. 3.15 b), dans un diagramme adapté. Les deux paramètres de la loi, μ et σ , sont ainsi retrouvés,

différentes démarches de corrélation étant envisageables (*moindres carrés, méthode des moments, maximum de vraisemblance ...*) [Jar09].

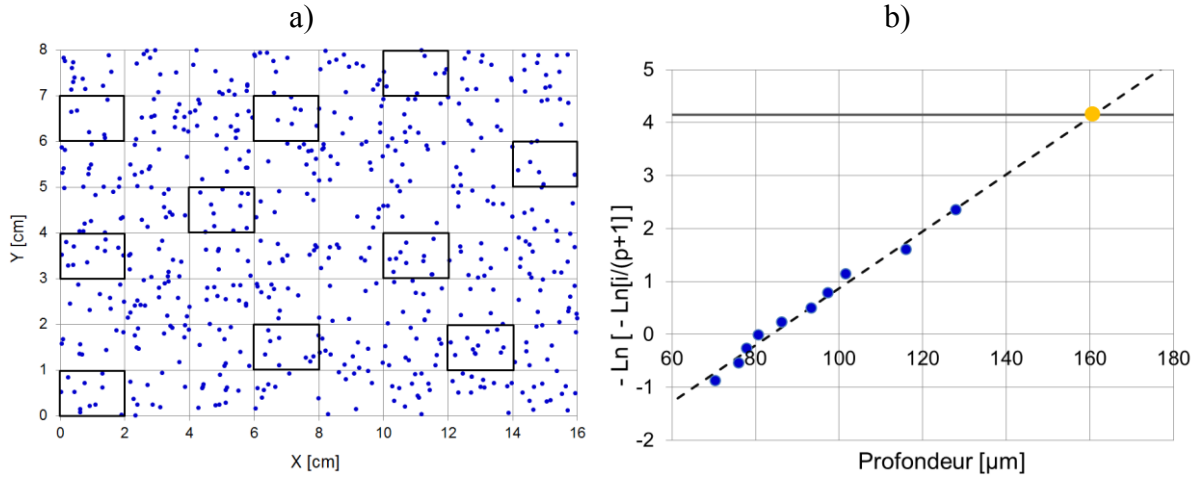


Fig. 3.15 : Approche de Gumbel : a) $N = 600$ piqures sont développées, suivant une loi normale ($\mu = 100 \mu\text{m}$, $\sigma = 20 \mu\text{m}$) et $p = 10$ blocs d'analyses sont retenus dans les 64 initiaux. b) Régression linéaire sur les valeurs maximales des blocs (points bleus). Les paramètres estimés de la loi des maximums (Eq. 3.11, $\xi = 0$) sont déduites de la régression : $\mu_M = 83.5 \mu\text{m}$ et $\sigma_M = 18.6 \mu\text{m}$. La période de retour ($T = 64$) amène à une valeur maximale estimée de $160,7 \mu\text{m}$ (point orange) comparable à la valeur réelle de $163,4 \mu\text{m}$.

La profondeur maximale est estimée par la période de retour, définie comme le ratio de la surface totale de la pièce, sur la surface individuelle des blocs d'analyse. L'extrapolation de la loi permet, à terme, de retrouver une estimation de sa réalisation sur cette surface T fois supérieure (Fig. 3.15 b), assimilée au quantile extrême, q_T , donnée par l'expression :

$$q_T = \mu_M - \sigma_M \log \left(-\log \left(1 - \frac{1}{T} \right) \right) \quad (3.12)$$

Deux hypothèses fortes et nécessaires de ce traitement statistique, dont la vérification est souvent oubliée, sont de bénéficier de piqures de profondeurs indépendantes et identiquement distribuées [Kow94] bien que certains auteurs considèrent que cette méthodologie peut être développée dans une situation où des interactions entre piqures existent [Col01]. Il est à noter que ces hypothèses peuvent se révéler correctes sur des temps faibles, mais, sous l'effet de l'agrandissement et de la coalescence des piqures, être critiquables sur des durées de corrosion importantes. Ainsi, Soltani Asadi [Sol17] montre que l'analyse statistique de mesures réalisées sur des tuyaux souterrains en fonte présente des écarts notables avec les évolutions attendues, en particulier avec la loi de Gumbel, fréquemment utilisée. De même, sur des temps longs, il apparaît clairement que la distribution des piqures est bimodale, comme observé par Rivas *et al.* [Riv08], et doit être traitée comme telle. En particulier, on est conduit à ne s'intéresser qu'aux piqures de plus grandes dimensions, plus anciennes, développées au détriment des petites, dans un mécanisme de compétition de croissance.

- Prédiction des défauts extrêmes par méthode GLD

La théorie des valeurs extrêmes demeure la principale approche proposée pour la détermination des profondeurs maximales en corrosion par piquuration [Shi91, Mel08]. L'approche GEV a, en particulier, été mise en œuvre largement par Jarrah, dans le cadre de son doctorat, en définissant, également, les conditions d'indépendance permettant son application

[Jar10]. Dans le cadre de ces mêmes travaux, un objectif a été de rediscuter, de manière critique, des démarches d'estimation usuelles, au regard d'approches statistiques concurrentes. En conséquence, en complément de l'approche GEV, il a été envisagé d'exploiter d'autres lois de distribution, estimées sur l'ensemble des mesures obtenues.

Ainsi, l'approche statistique GEV, précédemment décrite, permet d'estimer les profondeurs de piques maximales sur la base des domaines d'attraction dans lesquelles leur distribution se placent (*Gumbel*, *Fréchet* ou *Weibull*). L'utilisation faite des lois de type GEV (Eq. 3.11) reflète, cependant, la difficulté à corréler les mesures, ou leurs valeurs extrêmes, après analyse expérimentale. Ces analyses sont développées en considérant, fréquemment, des hypothèses préalables sur le comportement des piques, et une vérification, a posteriori, de leur validité. De même, certaines n'appartiennent à aucun domaine d'attraction. Pour ces raisons, une approche récente et originale nous est apparue intéressante, en combinant alors deux méthodes statistiques : les lambda-distributions généralisées (*Generalized Lambda Distribution*, ou *GLD*) et les approches de rééchantillonnage par Bootstrap (*Computer Based Bootstrap Method*, ou *CBBM*) basée sur la simulation informatique et décrite dans la section précédente. Les GLD évitent de faire toute hypothèse sur la distribution parente des mesures, et sur le comportement asymptotique des valeurs obtenues. Elles présentent, également, l'avantage d'être très flexibles, peu influencées par les valeurs centrales, et de pouvoir s'adapter à de nombreuses queues de distribution. Ces lois ont été utilisées avec succès dans le contrôle statistique [Fou07] ou en corrosion [Naj03a], et ont fait l'objet d'application en contexte industriel [Kar00, Kar10]. L'expression usuelle associée aux GLD correspond à la fonction de distribution inverse Q_X (Eq. 3.13), dépendant de la valeur de répartition $y \in [0,1]$. Les premiers paramètres, λ_1 et λ_2 , correspondent, respectivement, aux paramètres de position et d'échelle, les deux derniers, λ_3 et λ_4 , étant reliés aux moments d'ordre supérieurs, skewness et kurtosis :

$$Q_X(y) = \lambda_1 + \frac{y^{\lambda_3} - (1 - y)^{\lambda_4}}{\lambda_2} \quad (3.13)$$

L'estimation des paramètres, se base sur la comparaison des moments estimés aux moments observés [Kar00, Kar10, Jar11], même si des méthodes concurrentes existent. Les paramètres λ_i fixent l'évolution des fonctions de répartitions. En particulier, le support S de la fonction de distribution (*i.e.* bornes minimale S_{min} / maximale S_{max}) se trouve borné sous la forme :

$$\lambda_3 > 0 ; S_{min} = \lambda_1 - \frac{1}{\lambda_2} \quad \lambda_4 > 0 ; S_{max} = \lambda_1 + \frac{1}{\lambda_2} \quad (3.14)$$

Dans le cadre du doctorat de Jarrah, les approches GLD ont été appliquées pour déterminer des profondeurs maximales de piquation [Jar11], montrant leurs avantages comparativement aux méthodes GEV et GPD (*Generalized Pareto distribution*). Dans cette étude [Jar11], les développements ont été réalisés sur une plaque d'aluminium A5 de 75 cm², corrodée en milieu agressif (Fig. 1 a - [Jar11]). L'ensemble des profondeurs des 603 piques ont été mesurées et la démarche statistique développée sur ces résultats. L'ensemble des valeurs apparait bien corrélé par une loi GLD, et permet de rester proche des mesures (Fig. 3.16 a). Il est alors, à ce stade, intéressant d'utiliser la loi obtenue pour estimer, analytiquement, la valeur

maximale de profondeur de piquage, et la comparer avec celle déduite de corrélations similaires réalisées pour des lois du domaine d'attraction de Gumbel (Fig. 3.16 b), ce qui était l'un des objectifs de ces travaux. L'activité de recherche de doctorat, développée par Jarrah [Jar09], s'est réalisée en appliquant, au bilan, et de manière comparative, les différentes stratégies d'analyse, GEV, GPD et GLD.

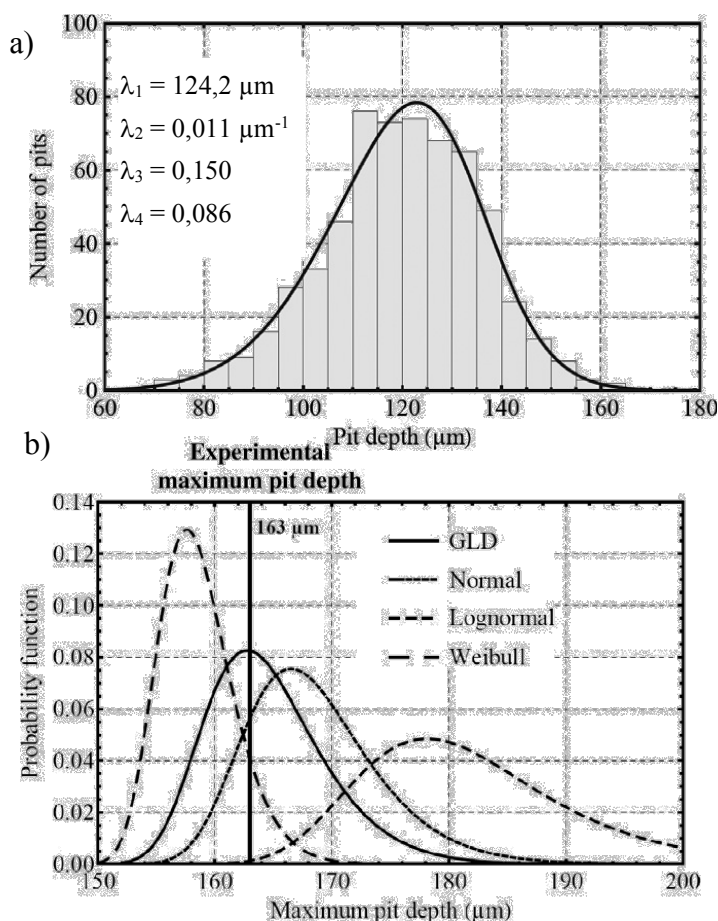


Fig. 3.16 : [Jar11] a) Distribution expérimentale des profondeurs de piqures et loi de distribution GLD estimée. Les paramètres de la loi GLD sont donnés en complément. b) Loi de distribution de la valeur maximale de profondeur de piquage sur l'ensemble de la plaque estimée pour différentes lois de distribution appartenant au domaine d'attraction de Gumbel, et comparaison avec l'estimation donnée pour la loi GLD.

La comparaison montre clairement l'intérêt des approches GLD. La valeur maximale réelle (163 μm) est proche de celle déduite d'une démarche GLD (164,5 μm), et nettement meilleures de celles provenant de lois habituellement utilisées dans la littérature pour corréler des données expérimentales (loi Normal : 168,5 μm, loi log-normale : 176,2 μm, loi de Weibull : 158,5 μm). Par la même, cette comparaison montre l'aptitude des GLD à s'adapter à l'ensemble des données expérimentales, sans être influencées par les seules valeurs médianes. De plus, il apparaît que les données expérimentales ne sont, probablement pas, dans le domaine d'attraction de Gumbel, comme l'illustre le caractère borné de la GLD ($\lambda_4 > 0$, Fig. 3.16 a).

Cette approche GLD a, ensuite, été comparée aux approches classiques GEV et Gumbel précédemment décrites, et son intérêt démontré dans l'estimation des valeurs extrêmes. Dans un premier temps, différents ratios de l'aire initiale (Fig. 1 b - [Jar11]), correspondant à un nombre limité de piqures ont été sélectionnés et une loi GLD a été déterminée, sur cette base,

représentant la distribution de profondeurs de cette zone sélectionnée. Les paramètres de la loi estimée permettent, ensuite, de déterminer une profondeur maximale sur l'ensemble de la tôle. Cette estimation peut, parallèlement, être comparée à celle issue de Gumbel (Eq. 3.12, Fig. 3.15) ou de l'approche GEV (Eq. 3.11) comme montré à la Fig. 3.17, en reprenant le même ratio d'aire. Le détail précis des stratégies mises en œuvre se retrouve dans [Jar11]. Pour les petits domaines d'analyse, couramment rencontrés dans l'estimation 'pratique' des valeurs extrêmes (ratio < 20 %), les valeurs maximales estimées par GLD se révèlent aussi valables que les valeurs GEV. Les biais sont plus réduits, ou similaires à ceux donnés par l'approche GEV et les écart-types du même ordre. Les biais sont inférieurs à 3 μm pour les réalisations pour un domaine supérieur à 10 %, et de l'ordre de 8 μm pour un ratio inférieur à 10 %. Simultanément, l'approche de Gumbel montre ses limites, en raison du domaine d'attraction de la distribution réelle (*domaine de Weibull*), avec des écarts importants comparativement aux valeurs attendues.

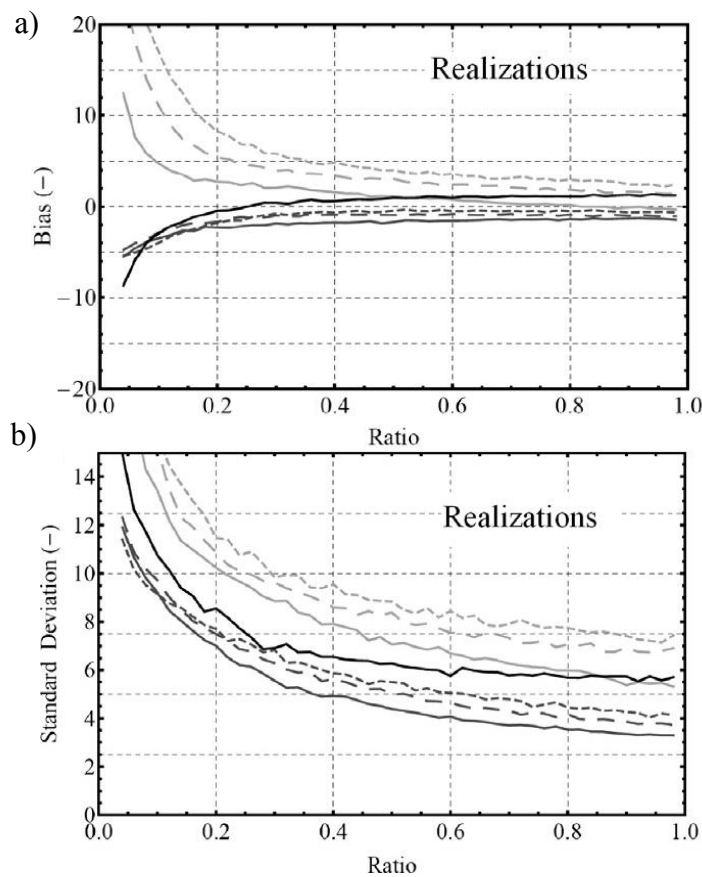


Fig. 3.17 : [Jar11] Estimation des profondeurs maximales de piquuration par les approches Gumbel (traits gris clair), GEV (gris sombre) et GLD (noir) selon le ratio d'aire analysé. Les approches de Gumbel et GEV ont été développées avec 5 (traits continus), 10 (pointillés larges) et 15 (pointillés fins) domaines d'analyse. a) Biais et b) Ecart-type dans l'estimation des réalisations des valeurs maximales selon les trois approches proposées.

Les approches GLD présentent, également, un intérêt fort comparativement aux approches GEV, dans la mesure où elles permettent d'estimer aisément, et de manière plus fiable, un maxima aux domaines d'évolution des valeurs extrêmes. Ainsi, les approches GLD et GEV ont été comparées à travers l'estimation qu'elles proposaient des bornes supérieures de leur distribution respective. Cette borne est donnée par l'expression (3.14), dans le cadre des GLD et apparaît dans la condition donnée pour l'expression des GEV dans l'expression (3.11), à la condition que $\xi < 0$. Il est intéressant, en ce sens, de rechercher les conditions pour

lesquelles l'approche GLD échoue à retrouver le caractère borné de la distribution de taille de piqures – i.e. $\xi > 0$ (resp. $\lambda_4 < 0$) pour l'estimation GEV (resp. GLD), ou conduit à des profondeurs irréalistes. En ce sens, les deux approches citées ont été testées et les probabilités déduites (Fig. 3.18 a). De même, les bornes obtenues ont été comparées (Fig. 3.18 b). L'intérêt évident de l'approche GLD apparaît, dans la mesure où, pour de faibles ratios de taille d'analyse (ratio $\sim 5\%$), elle conduit à des taux d'échec plus réduits que les GEV. Pour des ratios supérieurs (ratio $\sim 10\%$), le taux est nul. Le caractère borné de la distribution des piqures, ainsi que le domaine d'attraction associé, sont mis en évidence plus clairement que l'approche concurrente. Des estimations réalistes des profondeurs sont également systématiquement obtenues. Il faut souligner qu'aucune discussion sur le nombre de domaines à analyser n'est nécessaire. Enfin, l'estimation des tailles maximales est plus sûre, dans la mesure où les valeurs maximales sont supérieures, et stables, pour tous les ratios supérieurs à 20 %, comparativement aux GEV. De plus, une marge de sécurité plus importante est obtenue, ce qui limite le risque de perforation en cas d'estimation de l'épaisseur de tôle nécessaire pour éviter ce phénomène.

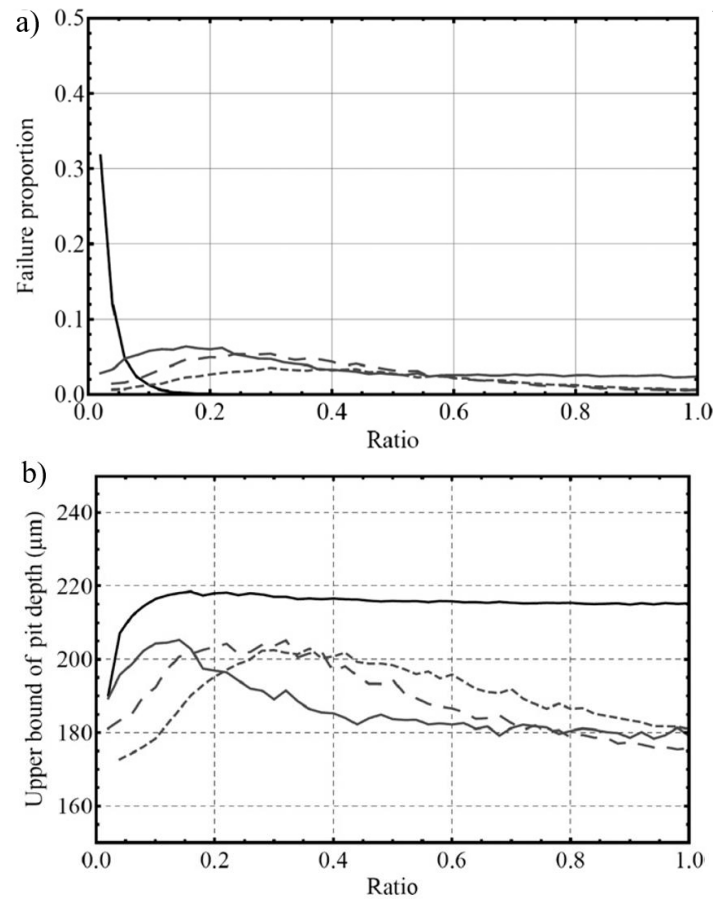


Fig. 3.18 : [Jar11] Valeurs moyennes des bornes supérieures des profondeurs de piqures par les approches GEV (traits gris sombre) et GLD (trait noir) selon le ratio d'aire analysé. Les approches GEV ont été développées avec 5 (traits continus), 10 (pointillés larges) et 15 (pointillés fins) domaines d'analyse. a) Proportion d'échec dans le calcul de la borne supérieure (i.e.) et b) valeur moyenne des réalisations de la borne supérieure.

3.3 Bilan et perspectives

i. Synthèse

Comme discuté précédemment, les activités réalisées sur le thème des propriétés mécaniques surfaciques se sont développées, en particulier, autour de l'analyse de la dureté des matériaux revêtus [Gui10, Ios12]. Ces travaux ont permis de rediscuter, de manière critique, de plusieurs conclusions couramment rapportées dans la littérature sur la prédiction de dureté des films minces, desquelles sont déduites les propriétés spécifiques du substrat et du film. D'autres activités, non détaillées, ont fait l'objet de publications [Rah09, Tli10a, Tli10b, Tab15]. Il est nécessaire de noter que ces travaux se sont, fréquemment, réalisés dans un cadre collaboratif entre équipes des centres Arts et Métiers. On pourra retenir les observations suivantes :

- Le modèle de Jönsson-Hogmark se révèle particulièrement intéressant, pour estimer les propriétés mécaniques des dépôts investigués dans les différents travaux de l'équipe CPP. Il permet une intégration fiable de comportements mécaniques complexes (compaction des milieux poreux, déformation plastique, déformation par fissure), et s'étend aisément à des revêtements multicouches. Les validations proposées et présentées, se sont révélées très concluantes sur ce modèle, et sa capacité à déterminer, de manière fiable et robuste, les propriétés isolées des domaines indentés. Cependant, il est souvent mal maîtrisé et appliqué dans la littérature, le sens physique des contributions à la loi de mélange n'étant pas compris.
- La littérature sur les modèles de dureté est importante, mais les modèles à nombre élevé de paramètres, apparus récemment, sont souvent déficients. Ils s'accordent aux observations expérimentales aisément, du fait du grand nombre de degrés de libertés, et, en conséquence, sont peu robustes dans les estimations des coefficients. Les prédictions des propriétés sont peu fiables, ce qui conduit aisément à des erreurs dans les conclusions faites. En ce sens, les travaux de l'équipe CPP ont permis de discuter de leur robustesse, et de montrer les limites que présentent plusieurs approches de la littérature, en quantifiant les dispersions observées.
- Les effets ISE induits par les enfoncements à faible charge sont couramment rencontrés sur les matériaux métalliques. Les observations expérimentales sur les matériaux ductiles montrent clairement la formation de 'pile-up' (bourrelets) dus à la déformation plastique et à la remontée périphérique de matière, dont une modélisation simple, nous a permis, dans ce contexte, de retrouver une prédiction correcte de l'accroissement de dureté, comme détaillé dans [Gui10]. Ainsi, des approches basées sur la seule évolution de l'aire de contact en début d'indentation suffisent à apporter des résultats en accord avec les observations expérimentales.

Ensuite, les travaux réalisés autour de la caractérisation géométrique des surfaces ont conduit à des développements mathématiques et des approches d'analyse statistiques nouvelles et originales, peu présentes dans la littérature. Ces travaux se sont, notamment, développés dans le cadre de deux doctorats consécutifs, dirigés par le Pr. Bigerelle (*alors rattaché au laboratoire Roberval (UTC)*) que j'ai co-encadré (Doctorats de B. Bounichane [Bou09] et Z. Khawaja [Kha14]). Nous avons montré l'intérêt des méthodes de filtrages multi-échelles par ondelettes, associées aux approches de types Bootstrap [Big13], pour la recherche des paramètres de rugosité pertinents et des échelles de mesures significatives. Ces méthodes permettent,

notamment, de développer des observations statistiques sur la distribution de données expérimentales. Dans les exemples présentés, elles aident à déterminer, par l'intermédiaire des critères de Fisher (Fig. 3.11 et 3.12), la pertinence des différentes méthodologies de traitement proposées (nature du paramètre, échelle, filtrage ...) et à identifier les paramètres de rugosité les plus pertinents, en les discriminant. En ce sens, l'application d'approches ANOVA a permis de déterminer la capacité des différents paramètres de rugosité à représenter les effets des paramètres procédés et leur influence. Ces approches doivent être considérées comme un progrès relativement aux stratégies classiques dans lesquelles les procédés de pré-traitements et traitements sont réalisés à des échelles spatiales imposées par les normes industrielles, sans recul critique sur leur intérêt pour une application donnée. On pourra résumer ces développements à travers les points clés suivants :

- Malgré une littérature déjà très (trop ?) riche sur ce sujet [Whi82], il demeure intéressant de proposer ou d'identifier de nouveaux paramètres de rugosité, spécifiques à une application ou un procédé visés, sans doute au regard des évolutions industrielles récentes et aux besoins exprimés. Ainsi, nous avons pu proposer, parallèlement, un paramètre identifiant l'isotropie des paramètres de rugosité des surfaces [Gui14], non présenté dans ce document. De même, nous avons montré que ce paramètre permettait d'identifier clairement l'ordre d'une surface.
- Dans le cadre des procédés investigués, il apparaît que la méthodologie d'analyse multi-échelle par décomposition par ondelettes reste une approche particulièrement intéressante, malgré sa plus grande complexité de mise en œuvre, compensée par l'exploitation possible de bibliothèques de calcul performantes, actuellement accessibles [Mat23b]. Cette approche d'analyse donne accès à une très large gamme de mesures, et permet, en une seule opération de traitement, d'accéder à un ensemble large de résultats. Elles offrent la possibilité de rechercher les échelles de fréquences pour lesquelles les paramètres de rugosité sont significatifs du procédé et de réaliser les posttraitements de filtrage aisément.
- Les traitements par ondelettes étudiés, et les résultats obtenus, semblent, cependant, très peu influencés par le choix de la fonction support, contrairement aux pratiques rapportées habituellement dans la littérature. Il a été démontré, également, que, si les résultats des mesures peuvent dépendre du choix de l'ondelette, en termes de mesure, la capacité d'une ondelette spécifique à discriminer précisément un paramètre procédé ne peut être mise en évidence.

Enfin, les activités développées dans le domaine de l'estimation des valeurs extrêmes en corrosion par piquuration ont donné l'opportunité d'investiguer ce thème, de manière originale, à travers le développement d'approches GLD. Nous avons, ainsi, proposé des démarches d'études et d'analyses encore peu présentes dans la littérature où les méthodologies classiques (Gumbel, GEV, POT) sont trop systématiquement utilisées. Leurs limites, et les contraintes posées, ont été étudiées dans le cadre du doctorat de A. Jarrah [Jar09], seule une partie limitée des résultats originellement obtenus dans ce doctorat ayant été présentée ici. Nous pouvons résumer les principaux résultats obtenus à travers les idées suivantes :

- L'étude menée par Jarrah [Jar10] – non présentée ici – démontre que les approches par blocs (Gumbel, GEV) nécessitent une indépendance de la position des piqures, pour s'assurer de leur distribution homogène sur les domaines analysés, et conserver un nombre similaire de valeurs

d'évènements. Les méthodes d'analyse spectrales [Jar10] sont, ainsi, un outil puissant pour déterminer les tailles critiques des domaines à analyser. De plus, elles révèlent la structure spatiale propre aux piques, ce qui permet de réfléchir aux mécanismes physiques qui sous-tendent leur développement.

- Il est possible de développer des méthodes d'analyses statistiques, basées sur des réalisations expérimentales simples, correspondant à un choix réfléchi de couples matériaux/milieu [Jar10, Jar11]. Dans cette situation, les mécanismes de corrosion développés permettent d'obtenir des mesures expérimentales précises, par interférométrie, ou plus simplement par microscopie. Les démarches statistiques peuvent être réalisées sur ces ensembles 'propres' de mesure, sans les problématiques liées aux relevés réalisés en contexte industriel. En particulier, ces mesures peuvent, plus facilement, vérifier les hypothèses d'indépendance et d'homogénéité de lois nécessaires. Des analyses statistiques consistantes peuvent ensuite être entreprises sur la base de ces données, et des méthodologies proposées, ensuite exploitables en contexte industriel.

- La définition du nombre de blocs divisant la surface totale analysée, base des approches d'analyse GEV, est une difficulté inhérente à ces approches. Les différentes méthodes de corrélation envisageables [Jar09] sont également source d'erreurs et d'incertitudes. De même, une contrainte existe sur la loi de distribution des profondeurs qui doit posséder un domaine d'attraction. En ce sens, les approches GLD [Jar11], utilisées dans un grand nombre de domaines, lèvent nombre d'incertitudes, par leur souplesse. Elles se révèlent également plus efficaces dans la détermination des valeurs extrêmes dans les cas investigués dans nos travaux.

ii. Bilan et diffusion

Le bilan des activités réalisées dans la prédiction des propriétés mécaniques, notamment par essai d'indentation surfacique, est le suivant :

- ▶ Cinq publications dans des journaux de rang A : [RA7, RA8, RA10, RA12, RA18]
- ▶ Deux publications dans des journaux de rang B : [RB2, RB3]
- ▶ Quatre conférences internationales : [CI18, CI19, CI25, CI33]
- ▶ Trois conférences nationales : [CN4, CN7, CN8]

De même, cette activité a donné lieu à quatre encadrements de stage ingénieur :

F. Baratto (Septembre 2007 – Juin 2008)

G. Starzyk (Septembre 2007 – Juin 2008)

N. Charoy (Septembre 2009 – Janvier 2010)

M. Moura (Septembre 2010 – Janvier 2011)

Ces travaux m'ont permis de développer de premières collaborations académiques importantes, en particulier au niveau des centres des Arts et Métiers. Je dois, notamment, mentionner l'accueil réalisé, durant leur doctorat de M. B. Tlili et M. Y. Benlatreche (Labomap, Arts et Métiers - Centre de Cluny) qui ont réalisé une caractérisation étendue de revêtement PVD (par tribologie, scratch-test, nanoindentation et observation MEB) destinés à la protection des outils de coupe d'usinage, donnant lieu, ensuite, à différentes communications [RA10, CI18, CI19]. De même, le travail réalisé par Mme Rahmoun et présenté précédemment s'est

fait en partenariat avec le LARMAUR (Université de Rennes I), et l'URMER (Université Abou Bakr Belkaid, Tlemcen, Algérie).

L'équipe CPP (Arts et Métiers - Centre de Lille) a, de même, bénéficié, au cours de ces années d'étude, de moyens de caractérisation élargis (Scratch-test, Tribomètre), en plus des équipements d'indentation et de mesure de dureté aux échelles macro-, méso- et micro- (nanoindenteur XP – MTS, macroduromètre instrumenté). Ces moyens ont été exploités lors de différents travaux développés en partenariat avec plusieurs sociétés (centre de recherche de Maizières-lès-Metz – ArcelorMittal, centre de recherche technique de Belchamp – Montbéliard de PSA Peugeot Citroën, société 'Poudres Métalliques du Québec' (QMP), société de Nickelage 'Verbrugge' ...) qui ont portés ces activités financièrement ou matériellement. On pourra rappeler, de même, la collaboration réalisée, avec le centre R&D de ArcelorMittal, sur une période de plusieurs années, autour des essais de Small Punch Test (SPT) [RB2, CI25, CN7].

On retiendra la bonne diffusion de plusieurs publications, [RA7] (24 citations), [RA8] (8 citations) ou [RA12] (28 citations) sur ces travaux. En particulier, Puchi-Cabrera [Puc15] rapporte, précisément, les différentes étapes des démarches d'analyse de dureté développées. De même, Kim [Kim16] et Qiao [Qia12] mentionnent le travail réalisé par Rahmoun [RA7] et basent leur activité de modélisation sur nos approches, dans le cadre de la déformation de matériaux revêtus et déformés mécaniquement. L'activité développée avec le Labomap [RA10] est aussi bien visible (27 citations) apparaissant comme un travail de référence sur la caractérisation large des propriétés de surface des revêtements monocouches CrAlN, régulièrement cité par de nombreux auteurs. Les observations MEB des couches réalisées par Tlili et Benlatreche [RA10], et leur aspect colonnaire marqué, sont également rapportées par Li [Li12a] et Warcholinski [War13], en comparaison aux observations menées par ces auteurs.

Le bilan d'activité du travail développé dans le domaine de la caractérisation géométrique des surfaces est le suivant :

- ▶ Deux publications dans des journaux de rang A : [RA13, RA15]
- ▶ Onze conférences internationales :
[CI11, CI12, CI13, CI14, CI15, CI16, CI17, CI21, CI22, CI23, CI24]
- ▶ Deux conférences nationales : [CN2, CN9]

De même, cette activité de recherche a donné lieu au co-encadrement de deux doctorants, de l'Université de Technologie de Compiègne (UTC) :

B. Bounichane (Financement CETIM, Septembre 2006 – Décembre 2009)
Z. Khawaja (FONCRUG 3D – Région Picardie, Décembre 2009 – Décembre 2012)

Dans le cadre de ce bilan, il est important de préciser que les développements numériques conduits, sur ces années, dans le domaine de l'analyse géométrique des surfaces ont amené à la réalisation d'une plateforme logicielle (système expert), MesRugTM [Goi16] à laquelle j'ai contribué. Cet outil rassemble, sous un environnement unique, un ensemble de méthodologies de prétraitement des surfaces, et de mesures des paramètres de rugosité, afin d'extraire des grandeurs pertinentes. Cet outil a été mis en avant dans de nombreuses communications [Dub14, Big15, Bat16, LeG16, Big17, Goi16].

D'autre part, Nezhadhighigh [Nez17] et Sista [Sis17] décrivent bien l'intérêt des paramètres d'ordres proposés dans [Gui14] pour l'étude et la caractérisation des surfaces périodiques ou de l'importance de leur anisotropie. Dans des contextes d'applications différents, Serpin [Ser15] pour l'étude des procédés de toilage et F. Chegdani [Che17a] pour l'étude des composites renforcés en fibres naturelles, notent la conclusion de l'article [Big13] sur l'indépendance des résultats produits par rapport au choix d'ondelette. Enfin, Mezghani [Mez18], dans le cadre de l'identification, par réseau de neurones des ondelettes pertinentes pour la caractérisation multi-échelle des surfaces, développe une analyse plus large. Il rappelle les conclusions de nos travaux, mais rapporte, que, dans d'autres contextes, des observations opposées ont été faites. Son analyse approfondie et son travail détaillé donnent un éclairage plus large sur ce choix d'ondelette, en fonction du niveau de décomposition du signal.

Enfin, le bilan d'activité du travail développé dans le domaine de l'estimation des valeurs extrêmes en corrosion par piquuration est le suivant :

- ▶ Deux publications dans des journaux de rang A : [RA9, RA11]
- ▶ Une publication dans un journal de rang B : [RB1]
- ▶ Une conférence internationale : [CI10]
- ▶ Une conférence nationale : [CN6]

De même, cette activité a donné lieu aux encadrements suivant :

- ▶ Un encadrement de doctorat :
A. Jarrah (Bourse HEI, Février 2006 – Décembre 2009)
- ▶ Un encadrement de Master M2 :
Z. Iman (Mars 2008 – Juillet 2008)

La diffusion de l'ensemble des travaux réalisés sur cette thématique apparaît très satisfaisante, les deux publications [Jar10, Jar11] étant régulièrement citées (10 citations pour [Jar10], 37 citations pour [Jar11]). De même, les échanges réalisés sur l'étude des mécanismes de corrosion, ont amené à une collaboration avec N. Hammouda (Algérie) et à une publication de ses travaux sur les peintures protectrices riches en zinc, conduisant à une publication [Ham11] citée près de 100 fois. Wang et Cheng [Wan16a, Wan16b] ont développé des outils d'analyse d'images permettant, actuellement, une reconnaissance optique et un traitement amélioré des pièces corrodées, autorisant un traitement statistique automatisé des piqures. L'activité développée sur l'analyse spatiale des positions des piqures [Jar10] et son intérêt dans l'étude des mécanismes de corrosion a été citée et mis en évidence dans ces travaux, portant sur des aciers de hautes tenues mécaniques (nuance X80). Enfin, l'interaction entre piqures métastables et la formation de cluster, encourageant les processus de corrosion, est rappelée par Wang [Wan16c]. Les auteurs ont mis en évidence ces processus, par des développements numériques couplant Automates Cellulaires et Eléments Finis, sur des études portant sur la dégradation d'aciers inoxydables. La reconnaissance de ces structures, et l'intérêt des développements numériques liés réalisés par A. Jarrah [Jar10] ont, de même, été rappelés par les auteurs.

iii. Perspectives

Les travaux auxquels j'ai pris part, dans le cadre de mes activités dans l'équipe CPP de Arts et Métiers – Centre de Lille, ont su se partager entre développements expérimentaux et numériques. Différentes perspectives peuvent être envisagées sur l'ensemble des thématiques abordées, afin d'en proposer des suites possibles, brièvement présentées ici.

En premier lieu, il serait intéressant de poursuivre les développements réalisés autour des modèles de duretés vers des matériaux à gradients de propriétés, cette application n'ayant pas été réellement étudiée de notre côté. On peut penser à l'intérêt de ces approches pour les revêtements réalisés par diffusion d'espèces chimiques (chromation, cémentation ...) dans lesquels la dureté présente une évolution plus complexe que celle des simples dépôts. Il serait, en conséquence, intéressant d'intégrer, dans nos modèles, cette caractéristique des revêtements pour mieux en estimer les propriétés, en enrichissant les lois d'études. De même, nous n'avons pas discuté de l'effet des contraintes résiduelles induites par les conditions de dépôts, ou celle préexistant sur le substrat, sur la valeur des mesures de dureté, ce qui constituerait cependant un point d'intérêt. De telles activités contribueraient, de plus, à aller vers des modèles d'évolution plus complexes, et à développer de nouvelles stratégies d'identification des propriétés spécifiques aux couches ou revêtements.

De plus, aidé par nos moyens techniques, nous avons développé de premiers travaux sur la déconvolution des distributions de mesures de nanodureté sur des matériaux multiphasés ou multiconstitués pour extraire les propriétés spécifiques à chaque composant. Ces travaux auraient mérité d'être poursuivis, étant donné leur intérêt industriel évident. En effet, de telles activités permettraient d'étendre le champ d'application des méthodologies de mesure de dureté, et de montrer la richesse de ces outils de caractérisation dans l'investigation des propriétés des différents constituants des alliages industriels. De telles stratégies sont régulièrement rapportées dans la littérature, tels les travaux récents de Vignesh *et al.* [Vig19] ou de Besharatloo et Wheeler [Bes21], démontrant l'intérêt de ces méthodes d'analyse, aidées par le caractère automatisé (*i.e. mapping technique*) des mesures de nanodureté instrumentée.

Enfin, concernant l'utilisation de nos moyens de caractérisation mécanique dédiés à l'étude de faibles volumes de matière, j'avais participé au développement de méthode de Small Punch Test (SPT) croisée à des essais de macroindentation [Gui11, Gui12a] dans le but d'améliorer la détermination des lois de comportement mécanique des matériaux métalliques. Les méthodologies mises en place se sont révélées intéressantes, et méritant d'être développées, en proposant la réalisation d'essais croisés, à travers des sollicitations mécaniques différenciées, améliorant la pertinence des coefficients des lois de comportement. Cette méthodologie d'analyse a été particulièrement aidée par les collaborations développées avec les équipes R&D de Arcelor Mittal, dans le cadre de leur développement de nouvelles nuances d'acier.

Les perspectives du travail développé autour de la caractérisation géométrique des surfaces sont liées aux développements actuels et futurs, des outils d'analyse mis en place couplant la décomposition du profil mesuré, notamment par méthode d'ondelettes, et les approches statistiques associées pour relever la pertinence des paramètres de rugosité. En ce sens, ce travail doit être considéré dans la perspective de l'outil MesRugTM [Goi16], et de son

enrichissement progressif, le développement de cet outil suivant sa propre voie au LAMIH (Laboratoire d'Automatique, de Mécanique et d'Informatique Industrielles et Humaines), sous la direction de son initiateur, le Pr. Maxence Bigerelle. Il conviendrait de poursuivre l'intégration de nouvelles méthodologies de traitement dans cet outil, en réponse aux besoins exprimés dans les domaines d'études passés : brillance des surfaces [Naj03b, Gor16], adhésion cellulaire [Ans00], usure d'implants [Naj06], efficacité tribologique, capacité de lubrification, détection de défauts En particulier, il reste intéressant de proposer de nouveaux paramètres de rugosité, ou de nouveaux traitements multi-échelles des profils, si ceux-ci répondent à des besoins spécifiques, ou permettent de lever certaines limites rencontrées. En ce sens, les paramètres de rugosité introduits, destinés à l'étude de la régularité de profils, à travers le principe de l'autocorrélation [Gui12b], ensuite étendu en 3D [Gui14], participent de cette démarche, notamment pour détecter le caractère isotrope – ou non – des surfaces d'étude.

Concernant l'utilisation des critères de Fisher comme indice de pertinence de l'influence d'un paramètre procédé sur la rugosité d'une surface, il serait intéressant, sans doute, de pouvoir améliorer cette démarche d'analyse statistique, en levant certaines hypothèses nécessaires à leur exploitation (e.g. normalité des lois de distribution et égalité des variances) dans un sens critique. En ce sens, le critère de Fisher est seulement destiné à rejeter, au risque accepté près, une hypothèse de similarité des distributions. D'autres approches statistiques pourraient donc être proposées pour enrichir ces développements mathématiques, au regard de la littérature actuelle. À ce titre, de nouvelles collaborations mériteraient d'être, sans doute, d'être recherchée avec des statisticiens, pour un regard plus théorique, sur les méthodologies mises en œuvre.

Enfin, l'objectif des méthodes d'étude proposées n'est pas *in-fine* la simple connaissance des caractéristiques géométriques des surfaces et de leurs échelles de pertinence. Il s'agit, parallèlement, d'avoir une connaissance de l'influence de ces caractéristiques sur les propriétés des surfaces traitées. L'objectif des travaux présentés est donc de pouvoir identifier ces propriétés (*brillance, frottement, usure, durabilité, ...*) au regard des paramètres de rugosité. La démarche, déjà mise en œuvre, et à poursuivre, est d'améliorer les propriétés d'usage des pièces industrielles en travaillant sur les procédés de traitement, et en cherchant, de manière intermédiaire, les paramètres de rugosité influencés par ces traitements, leurs échelles spatiales de réponses, et la manière de les faire évoluer vers les valeurs attendues.

Concernant la dernière thématique abordée sur la détermination des valeurs maximales en corrosion par piquuration, le sujet apparaît également tout aussi riche que les précédents, les approches statistiques exploitées correspondant à un champ d'application large. La caractérisation de défauts des matériaux ne se limite, ainsi, pas aux piqures de corrosion et aux mécanismes électrochimiques. Des défauts liés aux fissures surfaciques, aux porosités, aux développements de grains anormalement larges ou aux inclusions dures, pourraient faire l'objet d'études similaires et bénéficier de nos méthodologies. Elles élargiraient le champ d'applications de nos approches, limitées actuellement aux seules dégradations par corrosion.

Concernant ces méthodes d'analyse statistiques, des approches POT (Peaks Over Threshold) ont été également proposées et appliquées par A. Jarrah [Jar09] avec des résultats particulièrement intéressants qui n'ont pu être rappelés ici. Ces alternatives aux GEV conduisent à des biais et variances plus réduites, et sont des alternatives intéressantes, la

difficulté résidant dans l'estimation du seuil critique. Cependant, plusieurs approches ont été proposées pour son estimation. Il serait ainsi intéressant de poursuivre ces démarches d'estimation, dans la mesure où elles se basent sur l'ensemble restreint des piques de plus grandes profondeurs, qui révèlent le comportement de la distribution aux valeurs extrêmes.

En conclusion, les travaux présentés autour de l'étude des surfaces des matériaux se sont réalisés sur une période de six ans (2005 – 2011), correspondant à mon passage dans l'équipe CPP du centre des Arts et Métiers de Lille. Elles m'ont donné l'opportunité de développer mes connaissances et mes compétences dans le domaine de la caractérisation de ces surfaces, tant en termes de propriétés mécaniques, géométriques ou de détermination des profondeurs de défauts. Elles m'ont permis, ainsi, de développer mes premières activités de recherche dans des thématiques qui sont apparues riches et variées, autant dans les domaines expérimentaux que numériques. De même, ces années au sein de cette équipe ont été l'occasion de développer de premières collaborations académiques fructueuses, tant à travers les structures de recherche du réseau des Arts et Métiers que d'autres laboratoires intéressés par l'étude des propriétés de surface des matériaux industriels.

Chapitre 4

Procédés de soudage par fusion

« La science est faite, suivant les données fournies par un coin de l'étendue. Peut-être ne convient-elle pas à tout le reste qu'on ignore, qui est beaucoup plus grand, et qu'on ne peut découvrir. »

*Bouvard et Pécuchet, Gustave Flaubert
(Œuvre posthume), 1881*

Table des matières

4.1	Introduction	92
4.2	Activité de recherche	93
i.	Procédé de soudage hybride arc-laser – projet SIHYFE	93
•	Contexte	93
•	Modélisation Level-Set du procédé	94
•	Evolution mécanique des pièces	99
ii.	Evolution microstructurale – projet CSC + NEMESIS	101
•	Contexte	101
•	Modélisation	103
4.3	Bilan et perspectives	112
i.	Synthèse	112
ii.	Bilan et diffusion	114
iii.	Perspectives	115

4.1 Introduction

Dans le domaine de l'assemblage des matériaux métalliques, le soudage par fusion apparaît comme un procédé ancien, développé originellement sous la forme de 'brasage' pour permettre une liaison permanente entre éléments. Il constitue ainsi un moyen de joindre des pièces métalliques, de même nature ou non, pour leur offrir de nouvelles propriétés ou fonctionnalités. Ce procédé est relativement économique, en mobilisant des techniques et technologies éprouvées depuis de nombreuses décennies. Il est, ainsi, largement répandu dans le milieu industriel où il constitue la première technologie d'assemblage. Son utilisation se retrouve notamment dans les secteurs de la construction [Boe96, Zho18], des transports [Jan22] ou de l'énergie [You20, Yan21], pour ne citer qu'une partie des nombreuses applications industrielles. En particulier, il faut noter que son usage s'est récemment développé par sa très forte capacité d'automatisation, comme le démontre l'évolution des chaînes d'assemblage automobile. Cependant, des solutions plus collaboratives sont également développées, récemment, pour bénéficier de l'expérience des techniciens professionnels [Tec23]. Ces évolutions posent cependant la problématique de la recherche des paramètres procédés optimaux, et de la facilité des systèmes automatisés à s'adapter à ceux-ci. Les procédés de soudage par fusion apparaissent ainsi devoir être continuellement améliorés, pour pouvoir proposer des solutions innovantes d'assemblage d'alliages de composition, propriétés ou géométries différentes, en réponse aux attentes industrielles.

Cependant, un consensus apparaît sur le principe que ce développement souffre d'une maîtrise incomplète du procédé. En particulier, les défauts apparaissant lors de l'étape de solidification [Dan09], notamment liés à la fissuration à chaud ou à la formation de phases fragilisantes, peuvent entraîner le rejet des pièces soudées. On se doit d'évoquer les conditions d'assemblage où ces défauts sont rédhibitoires dans les contextes d'application du nucléaire ou des transports aériens, comme le montre l'actualité récente [Lem23]. De manière générale, ces défauts amènent une diminution de la durée de vie des pièces en service. Ils restreignent aussi l'utilisation des procédés de soudage à certaines compositions spécifiques, l'emploi de nouvelles nuances ou encore le choix des métaux d'apport. La survenue de ces défauts pose également la question, associée, des méthodologies mise en place pour les détecter, et de l'efficacité des méthodes d'analyse non destructives (CND) dédiées, ainsi que des logiciels liés.

L'activité de recherche développée autour de l'étude des procédés de soudage par fusion correspond à mes premières thématiques de recherche, abordées lors de mon arrivée au Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF), en Avril 2011. Elle est associée, initialement, au suivi du doctorat de O. Desmaison [Des13], portant sur la simulation du procédé de soudage hybride arc-laser (projet ANR SISHYFE), et à l'encadrement du post-doctorat de C. Pradille, sur le développement d'un banc de soudage instrumenté. Cette activité s'est poursuivie à travers l'encadrement des doctorats de S. Chen [Che14a] et C. Xue [Xue22b], développés, respectivement, avec un soutien du China Scholarship Council (CSC), et un financement ANR (projet NEMESIS). L'ensemble de ces travaux se sont réalisés sous les directions du Pr. M. Bellet ou de Ch. A. Gandin (DR CNRS). L'activité décrite ci-après porte, ainsi, sur le travail réalisé sur la modélisation thermomécanique et microstructurale des procédés de soudage par fusion, dans le cadre d'une approche Level-Set combinant méthodes éléments finis

(FE) et automates cellulaires (CA). Les résultats de ces activités de recherche seront ainsi détaillés ci-après, afin d'en montrer l'intérêt et la pertinence, au regard des besoins industriels actuels. Enfin, un bilan sur la diffusion de ce travail sera proposé et de futures perspectives seront tracées pour la suite de nos développements.

4.2 Activité de recherche

i. Procédé de soudage hybride arc-laser – projet SIHYFE

• Contexte

Le procédé de soudage hybride arc-laser (Fig. 4.1 a) a été développé initialement par W.M. Steen [Ste78] et ses collègues à la fin des années 1970, à travers l'association de sources de chaleur disjointes constituées d'un arc électrique et d'un laser. Ils ont montré l'avantage retiré de cette combinaison de sources thermiques de nature différente. La vitesse de soudage s'en trouve augmentée, par l'apport d'énergie complémentaire, la profondeur de pénétration améliorée, et le procédé stabilisé, comparativement au seul procédé MIG/MAG (Metal inert Gas / Metal Active Gas). Le développement du procédé a ensuite suivi celui de l'amélioration des sources laser de grande puissance, ainsi que la possibilité de disposer de sources laser CO₂. Deux conditions d'utilisation du laser sont envisageables. Le mode *laser-assisté* permet un préchauffage et la source MIG/MAG assure l'assemblage, avec une pénétration améliorée. Dans le mode *laser-augmenté*, la source laser est focalisée, une pénétration profonde est obtenue, avec une formation de keyhole. On retrouve alors pleinement l'action synergique des deux sources, avec une densité laser importante et une efficacité énergétique de la source MIG/MAG. En conséquence, les procédés de soudage hybrides permettent de développer dans le bain liquide une synergie, en limitant les désavantages associés à chaque source, entre la source laser et la source MIG/MAG, cette dernière apportant la matière. Ce procédé permet l'obtention de cordon étroit et profond (Fig. 4.1 b), avec une productivité accrue [Ach18]. La vitesse de soudage, plus importante, limite l'apport local de chaleur et, en conséquence, les transformations métallurgiques et les distorsions thermiques. Les contraintes posées concernent essentiellement l'ajustement des pièces, la préparation des surfaces ou les problèmes de réflectivité des matériaux (*aluminium, cuivre*).

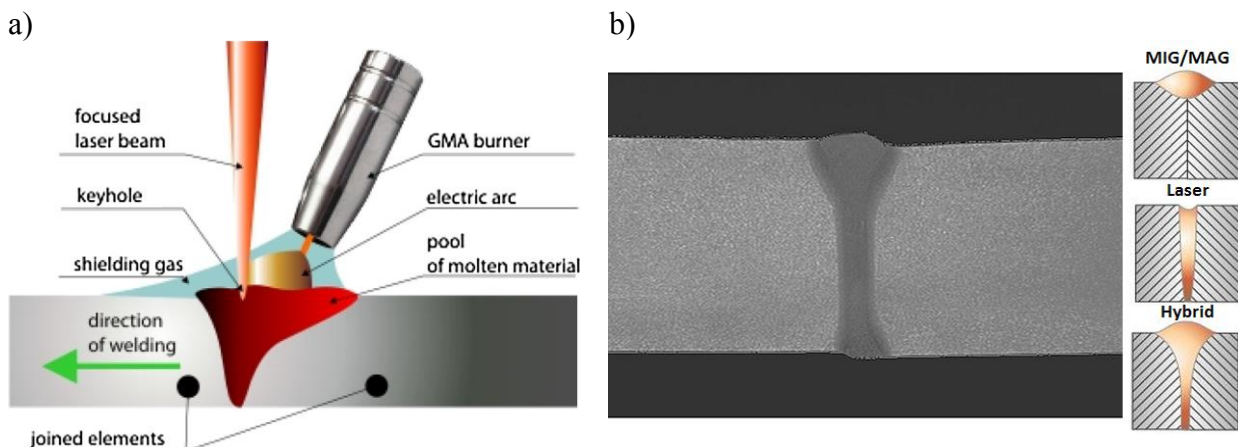


Fig. 4.1: [Ach18] a) Principe de soudage hybride arc-laser constitué des deux sources thermiques placées successivement. b) Cordon de soudure obtenu et comparaison aux profils des différents procédés de soudage.

Ce procédé se retrouve actuellement dans différents secteurs industriels dans lesquels les dimensions des pièces soudées sont larges, et les contraintes de productivité importantes, telles que les industries automobile, maritime, aéronautique, pétrolière ou celles de l'énergie. Il est à noter que relativement peu de développements numériques pour modéliser ce procédé complexe sont rapportés dans la littérature, notamment dans les articles de review [Ach18]. Il faudrait néanmoins rappeler le travail de Guen [Gue11a, Gue11b] réalisé entre le PIMM (Arts et Métiers) et le LIMATB (UBS), et correspondant à des développements implémentés dans Comsol Multiphysics®. On doit aussi citer les méthodologies d'optimisation de ce procédé par combinaison de méthodes de krigeage et d'algorithme génétique proposées par Gao [Gao16].

Le caractère multi-physique du procédé peut expliquer, partiellement, ce nombre limité de travaux de recherche, d'autant qu'il concerne un procédé encore peu diffusé industriellement, au regard des procédés MIG/MAG. Plus précisément, nous nous sommes intéressés à l'étude de ce procédé, et à sa modélisation, dans le cadre du projet ANR SISHYFE (Simulation du Soudage HYbride de Fortes Epaisseurs – 09-MAPR-0019). Ce projet rassemblait des partenaires académiques (ICB - *Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne*, CEMEF) et industriels (AREVA, Industeel, ESI group, Transvalor) dans l'objectif de prédire la formation des champs de contraintes et de déformations pendant et après l'assemblage de pièces soudées. Il visait à améliorer, parallèlement, la compréhension des phénomènes physiques se développant durant ce procédé. En particulier, l'objectif, au CEMEF, a été de développer la modélisation thermo-mécanique du procédé et la comparaison des résultats numériques aux observations expérimentales, notamment celles réalisées à l'ICB. Dans ce cadre, nous avons proposé, à travers le doctorat réalisé par O. Desmaison [Des13] dans le projet SISHYFE, une modélisation Level-Set (LS), intégrant les différentes sources de chaleurs actives. Comparativement aux approches de la littérature [Xu09, Tra11], ce modèle instationnaire a été développé pour s'intéresser aux seules évolutions des pièces, en ignorant le plasma, et en considérant des conditions limites adaptées. En utilisant des modèles de source de chaleur pertinents, il est ainsi possible de s'intéresser aux dépôts multipasses de matière en soudage hybride, sur des échelles spatiales importantes [Xu09, Tra11].

- Modélisation Level-Set du procédé

La modélisation du procédé [Des13, Des14] a été réalisée dans le cadre d'une résolution eulérienne par approche LS (Fig. 4.2 a), cette approche étant commune à un certain nombre de modèles développés au CEMEF pour l'étude des procédés de mise en forme des matériaux. L'ensemble constitué de la pièce et du domaine gazeux voisin est maillé de manière unique. À tout instant, une fonction distance, ψ , signée est définie dont l'isovaleur $\psi = 0$ est associée à l'interface métal/air. Le signe de la fonction donne la position du point dans le système (*positive dans le gaz et négative dans le métal*). L'intérêt des approches LS est ainsi de surmonter les difficultés numériques liées à la gestion des contacts progressifs métal/chanfrein et métal/métal, et aux problèmes d'interpénétration matière, notamment en soudage multipasses, comme étudié ici. Nous avons travaillé dans le cadre du formalisme Eléments Finis, habituel aux méthodes numériques introduites dans la librairie *Cimlib* du CEMEF, dans lequel les équations de conservation de la chaleur, des moments et de la masse ont été résolues. L'approche LS nécessite alors de moyenniser les propriétés matière (Eq. (1) de [Des14]) en exploitant la fonction

d'Heaviside lissée, $H(\psi)$, qui évolue continument du domaine matière au domaine gaz (Eq. (2) de [Des14]) à travers une distance de transition de demi-épaisseur ε (Fig. 4.2 a). Ainsi, on retrouve l'ensemble des propriétés attendues de la matière, en dehors de cet intervalle placé à l'interface gaz/métal, comme détaillé par O. Desmaison [Des13, Des14].

La connaissance des évolutions thermiques durant le procédé s'appuie, ensuite, sur la résolution de l'équation de conservation de la chaleur (Eq. (3) de [Des14]), en formulation moyennée. La difficulté est de préciser les différents termes associés à l'apport de chaleur, $\dot{Q}$, pour définir autant les termes d'introduction de chaleur (Fig. 4.2 b), que les pertes d'énergie du système. Dans notre approche, nous associons des flux surfaciques gaussiens aux deux sources d'intérêt, laser, $\dot{q}_L$, et MIG, $\dot{q}_P$:

$$\dot{q}_L = \frac{3 P_L}{K_L \pi R_L^2} \exp\left(-3 \frac{r^2}{R_L^2}\right) \mathbf{u}_L \cdot \mathbf{n} \quad (4.1)$$

$$\dot{q}_P = \frac{3 P_P}{K_P 2 \pi d^2 (1 - \cos(\alpha))} \exp\left(-3 \frac{\beta^2}{\alpha^2}\right) \mathbf{u}_P \cdot \mathbf{n} \quad (4.2)$$

où les termes P_L et P_P sont respectivement la puissance totale de la source laser (L) et de la source plasma (P) associée à la source MIG. R_L est le rayon de la source laser, d la distance entre la source MIG et le point impacté M_P (Fig. 4.2 b), ce point étant vu sous l'angle β . Enfin α est le demi-angle d'ouverture de la source MIG. Les termes de normalisation K_L et K_P sont définis dans [Des14]. À ces termes surfaciques, il convient d'ajouter la perte de chaleur du système, $\dot{q}_T$, associée au transfert convectif à l'interface, dû à la circulation du gaz proche de l'interface, définie par une condition de Fourier, et au rayonnement surfacique, définie par la loi de Stefan-Boltzmann.

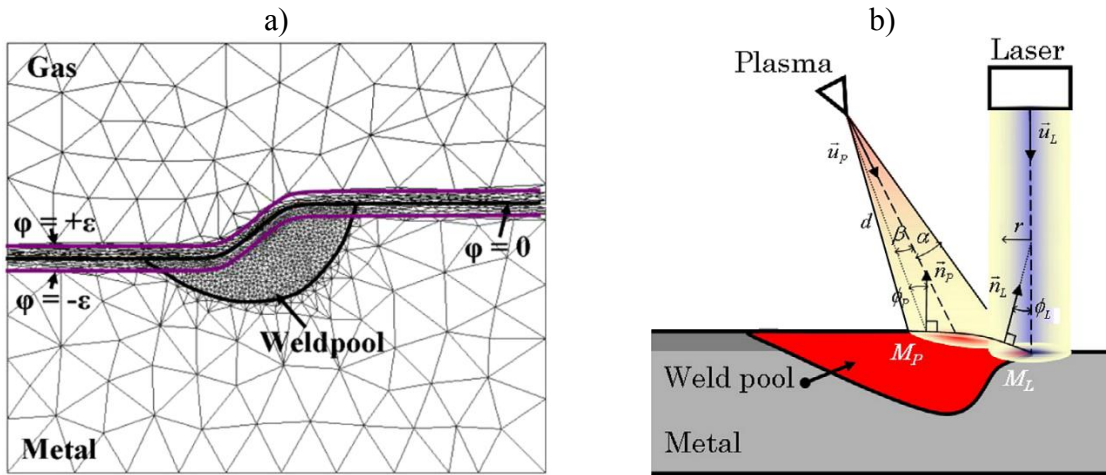


Fig. 4.2 [Des14] : a) Maillage LS développé pour la simulation du procédé montrant le raffinement de maillage associé au bain liquide et à l'interface LS. b) Sources de chaleur associées à l'électrode MIG/MAG et au laser.

L'intérêt de ces expressions est d'être définie localement par rapport à la normale à la surface impactée $\mathbf{n}$ (sous les formes $\mathbf{n}_L$ et $\mathbf{n}_P$) et aux directions d'émission des sources, $\mathbf{u}_L$ et $\mathbf{u}_P$. Cette source surfacique proposée est ainsi intéressante dans la mesure où elle est adaptable à des surfaces de géométries complexes, telles celles rencontrées à l'interface liquide/gaz en soudage, en conservant la puissance totale attendue. Concernant la source MIG, un second terme porte sur l'introduction de la source de chaleur associée aux gouttelettes. Le modèle proposé par Kumar [Kum94, Kum04] et Lancaster [Lan86], a été considéré, tel que détaillé en

partie 2.3 de [Des14] (Fig. 1. b-c et Fig. 3 de [Des14]). Ainsi, une cavité de rayon, R_c , double du rayon des gouttelettes, r_d , est définie, à partir du débit de matière et de la fréquence de détachement, f . Sa hauteur, H_c , est fonction de la vitesse d'arrivée des gouttelettes et obtenu du bilan de quantité de mouvement précédemment évoqué [Kim03, Jon98, Lin01]. Le fil possède un rayon r_w et est débité à la vitesse v_f . Ainsi, l'introduction de la matière et de la chaleur dans la cavité cylindrique liquide conduit aux termes sources respectifs, $\dot{\theta}_d$ et $\dot{Q}_d$:

$$\dot{\theta}_d = \begin{cases} \frac{r_w^2 v_w}{R_c^2 H_c} & \text{dans la cavité} \\ 0 & \text{hors de la cavité} \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\dot{Q}_d = \rho \dot{\theta}_d (h_d - h) \quad (4.4)$$

Le terme h_d représente l'enthalpie du fil chaud apporté et h l'enthalpie locale (section 2.2 de [Des14]). L'approche LS ne permet pas, cependant, d'introduire directement les termes surfaciques de source de chaleur comme termes volumiques. En reprenant l'approche *Continuum Surface Force* (CSF) proposée par Brackbill [Bra91], il est proposé de les multiplier par la fonction Dirac, δ , dérivée de la fonction Heaviside lissée, afin de les transformer en terme volumique. Au bilan, le terme source de chaleur s'écrit comme somme des termes associés au laser, au plasma, à l'introduction des gouttelettes et aux pertes surfaciques (Eq. (12) [Des14]).

Le développement du cordon est, ensuite, suivi par la résolution de l'équation de conservation de la quantité de mouvement associée à l'équation de conservation de la masse (Eq. (29) de [Des14]) avec l'usage d'une forte viscosité dynamique pour la phase liquide (*i.e.* 5 Pa.s). Dans l'approche simplifiée proposée, et afin de résoudre les problèmes rencontrés dans le champ de vitesse interfacial, les écoulements dans le liquide sont calculés mais pas exploités. Seule la détermination de l'évolution géométrique du cordon est recherchée. Les forces introduites dans le terme $\mathbf{F}$ sont celles liées à la gravité, $\mathbf{F}_g$, et la tension de surface, $\mathbf{T}_\gamma$:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \delta \times \mathbf{T}_\gamma \quad \text{où} \quad \mathbf{F}_g = \rho \mathbf{g} \quad \text{et} \quad \mathbf{T}_\gamma = \kappa \gamma \mathbf{n} \quad (4.5)$$

où κ est la courbure locale de l'interface de normale $\mathbf{n}$, γ le terme de tension de surface et $\mathbf{g}$ le vecteur gravité. On notera que, dans cette approche, les forces de Marangoni ne sont pas encore intégrées à la résolution, seules les forces modélisant le cordon étant nécessaires. De même, la tension de surface est multipliée par le Dirac, dans le cadre de l'approche CSF. Enfin, l'approche LS nécessite également de convecter la fonction distance, ψ , sur l'intégralité du domaine d'étude, afin d'actualiser la position de la frontière air / métal définissant la géométrie du cordon. Pour ce faire, on résout l'équation de transport :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (4.6)$$

La condition d'eikonal ($\|\nabla \psi\| = 1$) est ensuite obtenue par la résolution de l'équation d'Hamilton-Jacobi [Bas06]. Cette résolution ne permet pas cependant de conserver parfaitement cette condition et montre des limites dans son application. Des méthodes de réinitialisation géométrique ont ainsi été, largement, préférées dans l'ensemble des travaux ultérieurs liés au soudage et également à la modélisation des procédés de fabrication additive, comme discuté dans le chapitre suivant.

- Evolution thermique des pièces

Ce modèle a été développé pour permettre le suivi du dépôt d'un cordon en soudage hybride multipasse sur un acier de nuance 18MND5. La figure 4.3 présente la configuration investiguée dans le contexte d'intérêt industriel proposé par le partenaire Areva. L'objectif est de développer deux passes (*gauche* et *droite*) par couche pour combler entièrement le chanfrein. Cet exemple est associé aux cas d'intérêt du soudage hybride, avec l'assemblage de pièces de fortes épaisseurs, en chanfrein profond et étroit, avec un débit de matière et une vitesse de soudage importants, nécessaires pour le rendement du procédé. La puissance du laser défocalisé est de 5 kW, avec un rayon de 3 mm. La source MIG/MAG possède une puissance de ~ 8925 W, divisée en 2 parties, ~ 2750 W destinée à la source volumique dans le bain liquide, due à la chute de gouttelettes, et ~ 6175 W destinée au chauffage induit par le plasma d'arc¹. Le soudage se réalise à une vitesse de $1 \text{ m}\cdot\text{min}^{-1}$, avec une vitesse de fil de $10 \text{ m}\cdot\text{min}^{-1}$ et un diamètre de 1,2 mm. Ces valeurs, particulièrement élevées, sont représentatives du procédé [Ach18].

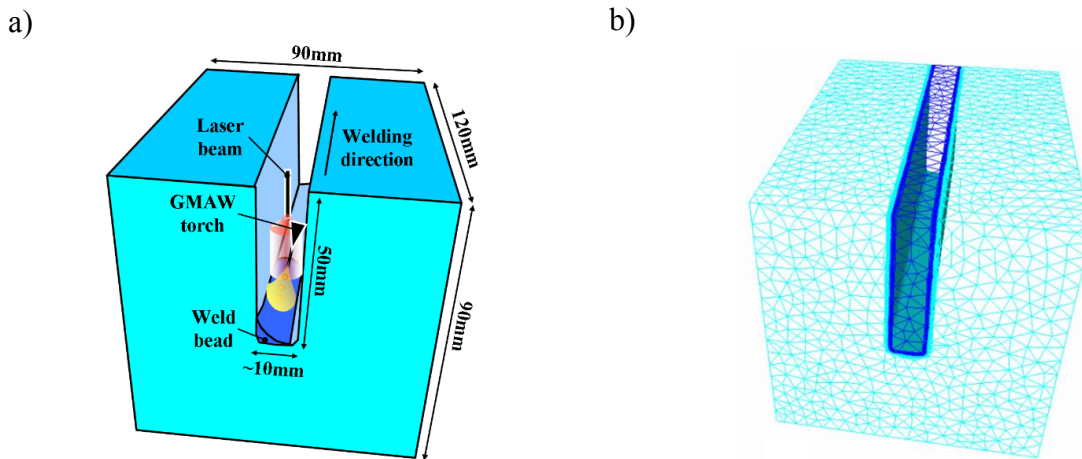


Fig 4.3 : [Des14] Configuration investiguée en soudage hybride MIG/Laser avec a) le schéma de la configuration d'étude et b) le maillage éléments finis initial dans l'approche LS montrant l'intégralité du domaine (métal et air).

En accord avec le travail de Hu et Tsai [Hu07], la température des gouttelettes, qui fixe la quantité de chaleur apportée par le métal d'apport, a été définie à 2500 K. Il est à noter que cette grandeur reste une inconnue dans cette approche, et nécessiterait des mesures expérimentales fines. Dans le cadre de l'approche de Bellet [Bel13], nous avons proposé, initialement, de simuler le procédé avec une conductivité thermique en phase liquide, λ_l , augmentée d'un facteur $f_\lambda = 20$ par rapport à sa valeur nominale de $34 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Cette méthodologie apparaît pertinente dans la mesure où elle permet de représenter l'effet thermique des écoulements, ignorés ici, qui tendent à diminuer les gradients thermiques et à homogénéiser la température du bain. Cette grandeur réduit également le temps de calcul, et permet d'accéder à une thermique correcte. La figure 4.4 présente les résultats obtenus dans la comparaison des zones fondues au regard des observations de l'ICB. L'approche proposée amène à retrouver les dimensions de cordon souhaitées (Fig. 4.4 a) avec une prédiction très correcte des géométries supérieures et des aires fondues. Des différences restent observées en bas de cordon, les courants de convection creusant le métal, induits par l'effet Marangoni, n'étant pas considérés. Le caractère 'pénétrant' du cordon, constaté expérimentalement, n'est ainsi pas observé ici.

¹ Les paramètres indiqués ici restent des valeurs approchées, pour des raisons de confidentialité industrielle.

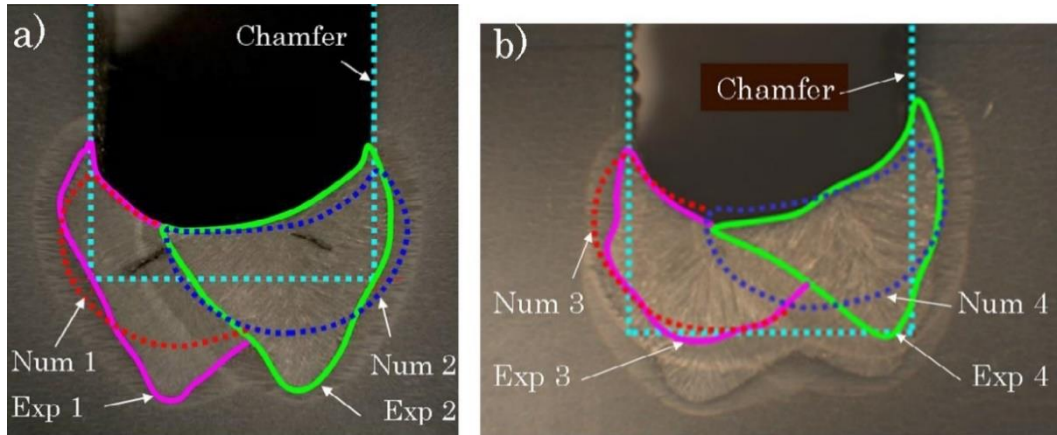


Fig. 4.4 : [Des14] Géométries de zones fondues dans une section transversale pour : a) la première couche b) la seconde couche. Comparaisons entre les observations expérimentales (Exp – ICB – ligne continue) et le résultat de la simulation (Num – CEMEF – ligne pointillée).

Ce point constitue une des premières limites de notre approche. Il est à noter que des comparaisons thermiques, non détaillées ici [Des13], ont été réalisées, montrant des évolutions en concordance avec l'expérience, bien que les pics de température ne soient pas retrouvés.

Afin de poursuivre la validation expérimentale du modèle, nous avons choisi d'investiguer l'effet du choix du terme multiplicatif de la conductivité thermique, f_λ , sur le bain liquide. La figure 4.5 présente les évolutions de ses dimensions selon le choix de ce terme, respectivement égal à 1, 5, 10 et 20, dans une coupe longitudinale. La figure 4.5 a) montre les évolutions marquées de l'étalement du bain et ses dimensions. Le bain tend à diminuer en longueur, et à gagner en profondeur quand f_λ augmente. Le domaine pâteux [$T_S = 1373^\circ\text{C} - T_L = 1511^\circ\text{C}$ soit 138°C] est également plus étendu dès lors que le coefficient est supérieur à 1, mais reste stable ensuite, seul le bain évoluant. Ces évolutions sont la conséquence de la diminution des gradients thermiques qui amènent à une homogénéité des dimensions du bain. De même, les températures maximales diminuent notablement de 2960°C ($f_\lambda = 1$) à 2390°C ($f_\lambda = 20$), la géométrie supérieure du cordon restant peu impactée par ce terme. Dans cette démarche d'analyse, nous avons pu bénéficier des observations expérimentales réalisées par l'ICB en caméra rapide. La figure 4.5 b) donne un aperçu du bain observé, de longueur 26 mm, et des résultats obtenus pour les différentes simulations (première passe). La valeur de $f_\lambda = 5$ aboutit à une comparaison pertinente et semble un choix approprié dans ces conditions, bien que la forme générale du bain ne soit pas entièrement retrouvée.

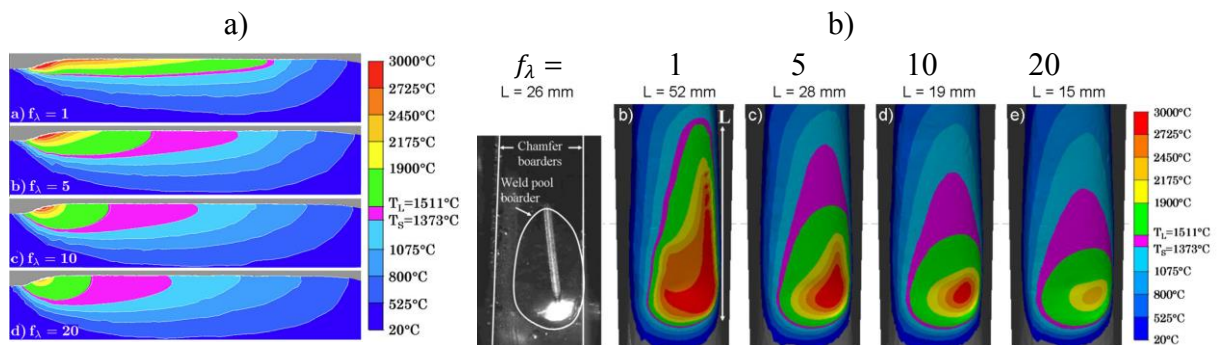


Fig 4.5 : [Des14] a) Evolution des températures dans un plan de coupe longitudinale pour la première passe pour différentes valeurs f_λ du coefficient multiplicatif de la conductivité thermique du bain ($t = 5.5$ s). b) Evolution des dimensions du bain liquide (L – isotherme du liquidus) pour les mêmes valeurs du coefficient f_λ et comparaison aux observations expérimentales du partenaire ICB (caméra rapide).

- Evolution mécanique des pièces

Il convient également de revenir sur les possibilités offertes par notre approche pour déterminer les évolutions mécaniques des pièces durant le procédé. En effet, le projet SISHYFE avait comme ambition de suivre l'évolution des contraintes et déformations des assemblages soudés en procédé hybride. En raison des évolutions thermiques, les pièces se trouvent soumises à des gradients de température locaux importants amenant à des dilatations thermiques localisées et au développement de contraintes mécaniques marquées. Ces contraintes peuvent conduire à l'apparition d'une fissuration à chaud [Nie13, Bor14] en partie arrière de la zone pâteuse et à des ruptures. Lors du refroidissement, ces mêmes contraintes peuvent, également, amener à une rupture à froid. Enfin, la présence de contraintes résiduelles conduit à des déformations des assemblages, rédhibitoires dans les contextes d'intérêt du procédé hybride, notamment nucléaire. Ce même état mécanique final influence également la tenue en service des pièces et peut limiter leur durée de vie. Ces différentes considérations démontrent l'intérêt évident de pouvoir estimer les évolutions mécaniques des matériaux lors des procédés de soudage, autant pour la maîtrise des contraintes finales que pour la prédiction des déformations. Ainsi, une simulation du comportement mécanique a été proposée par Desmaison [Des13]. Le solveur mécanique s'est basé sur les développements précédents de Hamide [Ham08], mais étendu au contexte de l'approche LS. L'équation d'équilibre dynamique résolue s'écrit :

$$\rho \frac{dv}{dt} - \nabla \cdot \sigma = F \quad (4.7)$$

où σ est le tenseur des contraintes ($\sigma = s - p I$), ρ la masse volumique et v le champ de vitesse. F représente les forces volumiques agissant, limité ici à la seule force de gravité, ρg . Il convient de distinguer le comportement du matériau selon les températures et phases locales, et de poser les équations exprimant la déformation. Ainsi, à l'état liquide, au-dessus de la température de liquidus, T_L , le métal est considéré comme un fluide newtonien, de viscosité dynamique η , et le tenseur de taux de déformations, $\dot{\epsilon}$, est décomposé en composantes mécanique, $\dot{\epsilon}^n$, et thermique, $\dot{\epsilon}^{th}$, associées au comportement newtonien et aux dilatations \ contractions thermiques :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^n = \frac{s}{2\eta} \\ \dot{\epsilon}^{th} = -\frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} I \end{cases} \quad (4.8)$$

A l'état pâteux, dans le domaine correspondant aux températures comprises entre le liquidus, T_L , et le solidus, T_S , (*i.e. intervalle de solidification*), le métal a un comportement viscoplastique (VP), correspondant au comportement mécanique moyenné des deux phases. Le milieu pâteux est ainsi considéré comme un fluide non-newtonien. Le tenseur des taux de déformations se décompose en composante visqueuse, $\dot{\epsilon}^{vp}$, et thermique, $\dot{\epsilon}^{th}$:

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^{vp} = \frac{3}{2K} \dot{\epsilon}^{1-m} s \\ \dot{\epsilon}^{th} = -\frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} I \end{cases} \quad (4.9)$$

où K représente la consistance visco-plastique, m la sensibilité de la contrainte au taux de déformation et $\dot{\epsilon}$ le taux de déformation équivalent.

L'expression de $\dot{\epsilon}^{vp}$ correspond à l'utilisation de la loi puissance de Norton-Hoff pour le comportement mécanique ($\bar{\sigma} = K \bar{\epsilon}^m$). La masse volumique, ρ , est estimée en considérant la fraction de solide, f_s , et les densités spécifiques des phases liquide, ρ_L , et solide, ρ_S , prises aux températures de liquidus et solidus. Il vient une expression de la densité locale fonction du chemin de solidification, permettant d'intégrer le taux de retrait dû à la solidification dans le comportement mécanique :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \text{tr}(\dot{\epsilon}) = \text{tr}(\dot{\epsilon}^{th}) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{dt} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d(\rho_S f_s + \rho_L f_L)}{dt} \simeq \frac{\rho_L - \rho_S}{\rho_L} \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.10)$$

A l'état solide, en dessous de T_S , le comportement mécanique est modélisé par un comportement élasto-visco-plastique (EVP), dans un contexte de petites déformations. La composante élastique supplémentaire, $\dot{\epsilon}^{el}$, exprimée avec la loi isotrope de Hooke amène à avoir :

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}^{el} = \frac{1+\nu}{E} \dot{\sigma} - \frac{\nu}{E} \text{tr}(\dot{\sigma}) \mathbf{I} \\ \dot{\epsilon}^{vp} = \frac{3}{2\bar{\sigma}} \left[\frac{\bar{\sigma} - \bar{\sigma}_y}{K \bar{\epsilon}^n} \right]_+^{\frac{1}{m}} \mathbf{s} \\ \dot{\epsilon}^{th} = -\frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \mathbf{I} \end{cases} \quad (4.11)$$

où E et ν représentent les coefficients de la loi de Hooke (module de Young et coefficient de Poisson). $\bar{\sigma}_y$ est la contrainte limite d'écoulement (ou *contrainte seuil*), correspondant au début de plasticité. Ainsi $\dot{\epsilon}^{vp}$ est défini dès lors que la contrainte seuil est dépassée. Le comportement liant contrainte équivalente, $\bar{\sigma}$, déformation équivalente, $\bar{\epsilon}$, et taux de déformation, $\dot{\bar{\epsilon}}$, dans l'expression de $\dot{\epsilon}^{vp}$ est équivalente à une loi multiplicative :

$$\bar{\sigma} = K \bar{\epsilon}^n \dot{\bar{\epsilon}}^m + \bar{\sigma}_y \quad (4.12)$$

K représente la consistance du matériau, n le coefficient d'écrouissage, m la sensibilité au taux de déformation et $\bar{\sigma}_y$ la contrainte seuil pour la plasticité. Il est à signaler que d'autres expressions sont possibles pour exprimer le lien entre $\dot{\epsilon}^{vp}$ et $\mathbf{s}$. Le solveur utilisé est celui développé par Jaouen [Jao98] permettant de modéliser le comportement newtonien, VP et EVP compressible des métaux au cours des étapes de chauffe et de refroidissement. Son originalité est de fixer le comportement mécanique par élément, selon la température, T^{elt} , au centre de celui-ci. De même, la valeur de T^{elt} fixe les propriétés dépendant de la température. Dans le cadre de l'approche LS, une viscosité, η_q , artificiellement augmentée, est utilisée pour l'air, permettant de limiter les effets du gaz dans la résolution mécanique, et de stabiliser celle-ci. Enfin, un gain de temps de calcul appréciable est obtenu par l'utilisation d'une fréquence $f_m=10$ pour la résolution mécanique qui n'est, en conséquence, pas réalisée à chaque incrément de temps, Δt . Les champs solutions dans l'approche EF sont les valeurs des vitesses de déplacement des nœuds, $\mathbf{v}$, et des pressions, p . La résolution, sur les pas de temps Δt , étant réalisée dans une approche lagrangienne, elle s'accompagne d'une actualisation de la position des nœuds du maillage du vecteur $\delta \mathbf{x} = f_m \mathbf{v} \Delta t$.

Ce modèle de résolution a pu être validé, notamment, en comparaison à l'outil R2Sol dans le cadre d'une étude d'un cas de chauffage 2D axisymétrique [Des13]. La figure 4.6 illustre l'un des résultats obtenus dans le cadre du projet SISHYFE, sur la pièce étudiée précédemment, destiné à valider expérimentalement cette approche. Nous nous sommes intéressés aux contraintes développées dans la configuration de soudage multipasses en chanfrein étroit (Fig. 4.3). Cependant, la résolution mécanique restant importante en temps de calcul, il n'a pas été possible de simuler l'intégralité des passes. La comparaison se limite aux contraintes résiduelles développées sur la première couche (1^{re} et 2^{de} passe). Les résultats expérimentaux présentés correspondent aux mesures réalisées par Areva, par l'utilisation de la méthode des contours, permettant l'obtention d'une cartographie complète des contraintes longitudinales mais obtenues après un nombre plus important de couches. Cette comparaison valide qualitativement les résultats, le domaine d'évolution des contraintes étant similaire et les contraintes maximales étant localisés aux mêmes profondeurs. La différence essentielle vient de l'étendue plus importante du champ de contrainte numérique, celles-ci se développant sur des distances marquées, comme l'ont montré également la comparaison des profils transversaux et verticaux des contraintes [Des13]. L'une des origines de ces écarts pourrait résider dans les données mécaniques provenant, ici, d'un acier 18M5 [Cos04], celles issues de l'acier 18MND5 investigué n'ayant pas été accessibles pour cette comparaison.

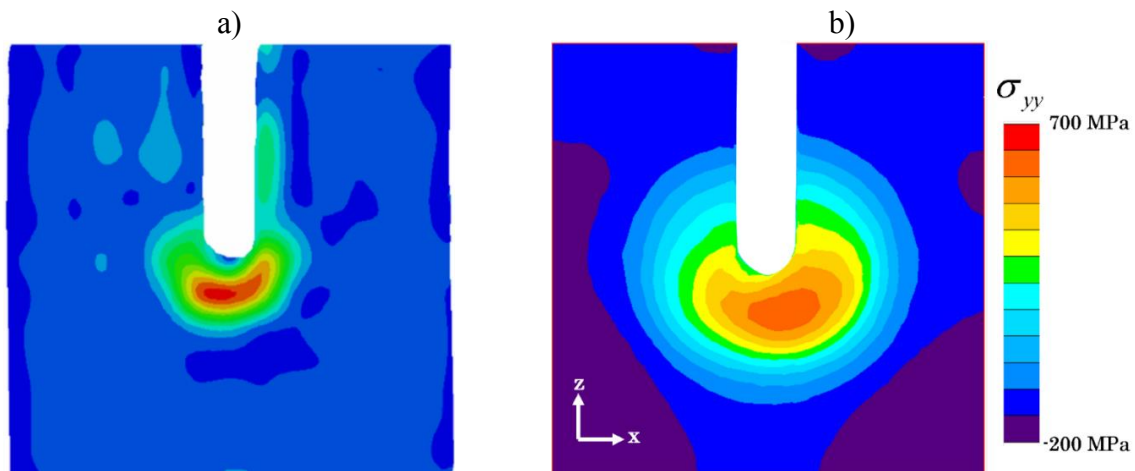


Fig 4.6: [Des13] Contraintes longitudinales (σ_{yy}) dans un plan de coupe transverse réalisé au milieu du bloc soudé : (a) Mesures expérimentales après trois couches (méthode des contours) (b) Simulation après la première couche.

ii. Evolution microstructurale – projet CSC + NEMESIS

• Contexte

Les développements numériques réalisés en doctorat par O. Desmaison sont apparus extrêmement prometteurs. Ils ont posé un cadre de modélisation pour de premières simulations pertinentes et représentatives des procédés de soudage par approche LS. Les évolutions thermiques, la géométrie des zones fondues ou les champs de contraintes résiduelles obtenus se sont révélés proches des valeurs attendues, mesurées dans le cadre de développement expérimentaux. Cependant, ce modèle a aussi montré ses limites. En particulier, il n'intégrait pas les transformations microstructurales subies en cours de solidification qui restent un point d'intérêt particulier. Ainsi la formation des structures de grain dendritiques, colonnaires ou équiaxes, lors de l'étape de solidification n'a pas été considérée dans cette approche malgré son

intérêt. Comme cela a été mentionné, l'un des objectifs du développement d'outils numériques pertinents, est de pouvoir les exploiter pour améliorer la prédiction des défauts, telle la fissuration à chaud [Wel01, Kou02]. Ce défaut, lié au développement de contraintes dans la zone pâteuse, est une des causes prévenant l'utilisation de procédés plus efficaces en termes énergétiques [Ten98], l'emploi de nouvelles nuances [Hol16] ou de matériaux dissimilaires [Sha14]. Il est ainsi directement relié, dans son apparition, aux orientations microstructurales rencontrées localement, ce défaut prenant naissance entre les branches primaires dendritiques [Dan09]. En ce sens, les orientations des microstructures, et la désorientation locale observée aux joints de grains, exercent une influence certaine sur sa survenue [Wan04]. Il serait également, à ce titre, important de considérer le caractère anisotrope du comportement mécanique des matériaux d'étude, lié à la texturation de la microstructure formée en cours de solidification, pour prédire plus finement son occurrence. En complément, il faut noter qu'une structure de grains fins diminue la sensibilité à ce défaut, en facilitant l'accommodation des déformations [Pie07], cette structure fine pouvant être provoquée [Wan22a]. La détection et l'estimation de l'ensemble des défauts de soudage est ainsi un sujet actuel, notamment à travers le développement de méthodes d'analyse CND ultrasonores (US) [Civ23]. Cependant, il est bien montré que la propagation US est largement dépendante des tailles [Wan21] et orientations locales des grains [Lhu17, Lhu22]. Le développement de modèles efficaces permettant le suivi de la croissance des microstructures répond, ainsi, à un double objectif, d'une part améliorer la prédiction des défauts, d'autre part, mieux détecter, par méthode CND, ces mêmes défauts.

En réponse à ces besoins, j'ai déposé auprès de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) dans le cadre de l'Appel à Projets Générique (AAPG) 2017 une demande de financement pour le projet NEMESIS² [Nem18]. Ce dernier a été accepté pour financement en tant que Projet de Recherche Collaborative – Entreprise (PRCE) et a débuté en avril 2018. Il a rassemblé trois laboratoires de recherche publics (ICB, LMGC, CEMEF), un institut de recherche technologique (CEA LIST) et trois organismes privés (EDF R&D, ArcelorMittal Montataire, Transvalor) sur une durée de 42 mois. Ce projet s'appuyait sur le constat que le développement des procédés de soudage novateurs souffre de la présence de défauts développés durant l'étape de solidification, et se proposait de rechercher les moyens d'en comprendre l'origine et de les maîtriser. La figure 4.7 présente l'organigramme des activités planifiées entre partenaires.

Les résultats de cette activité ont été intégrés au logiciel Transweld développé par Transvalor et destiné à la simulation thermo-mécanique des procédés de soudage [Tra24]. L'activité du CEMEF a eu pour objectif de simuler le développement des structures de grains, dans un contexte multi-physique, et de définir les critères d'apparition des fissures basés sur la connaissance locale des orientations de ces structures. Ces développements, portés par C. Xue, se sont basés sur les observations du LMGC (*banc instrumenté*) et de l'ICB (*banc de bi-traction après tir laser*), disposant de moyens d'essais avancés. Cette activité a fait suite aux travaux de Chen [Che14a, Che14b, Che16a] pour la modélisation CAFE (Cellular Automaton – Finite Element) des évolutions microstructurales et aux activités de T. Koshikawa [Kos16] et O. Cerri [Bel09] pour la prédiction des risques de fissuration lors de la solidification des aciers.

² Numerical metallurgy supporting arc welding processes: Virtual materials for mastering defects ; La métallurgie numérique au service des procédés de soudage à l'arc: Des matériaux virtuels pour maîtriser les défauts

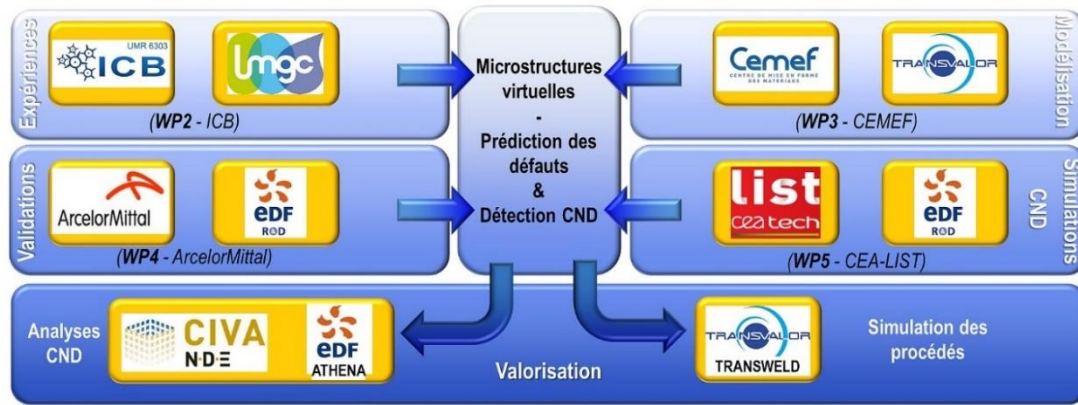


Fig. 4.7: Activités menées dans le cadre du projet NEMESIS et organisation entre partenaires avec les valorisations escomptées pour l'amélioration du contrôle CND des soudures et la simulation du procédé.

- Modélisation

Les approches développées pour le suivi de la croissance des grains se sont, ainsi, basées sur la méthode CAFE couplant une résolution éléments finis (FE) des équations de conservation moyennées, et un suivi du développement des structures de grains par une approche automate cellulaire (CA). Cette méthode a été initialement proposée par Gandin et Rappaz [Rap93, Gan94a] pour le suivi des processus de germination \ croissance des grains dans le contexte des procédés de fonderie et de soudage [Rap96]. Elle a, ensuite, été reprise par différents auteurs dans l'étude et l'analyse de la coulée continue [Luo12], de la fabrication additive, en DMD [Zha16a] ou LPBF [Zha19, Bau21], ou encore du suivi de la croissance dendritique et de l'interface solide – liquide [Zha12a]. Cette méthodologie a été, plus récemment, étendue et appliquée au CEMEF (*librairie Cimlib*) dans le contexte des outils de calculs parallélisés développés par Carozzani [Car13] dans son doctorat. Elle a, de même, été exploitée pour l'étude des processus de maclage lors de la solidification du silicium polycristallin [Pin20], démontrant – encore une fois – sa versatilité.

Cette approche est basée sur l'utilisation d'une grille de cellules régulières carrées (2D) ou cubiques (3D) servant de support au développement des grains. Cette grille est superposée à un maillage fixe (*maillage CA*) permettant le transfert d'information, notamment thermique, entre les champs calculés par la résolution FE (*maillage FE*) et la grille de cellules. Ainsi, les équations associées à la conservation de la chaleur, de la masse ou du moment sont résolues sur le maillage FE évolutif. Cette résolution permet d'accéder aux champs de température et de vitesse du liquide. À l'échelle de la grille, une enveloppe de croissance est associée à chaque cellule pour représenter l'évolution interne du domaine pâteux. Cette forme polygonale, représentant la structure en développement, s'appuie sur les pointes des dendrites en croissance. Ces dernières sont, en l'occurrence, pour nos cas d'étude portant sur des alliages de structure cubique, de direction cristallographique $\langle 10 \rangle$ ou $\langle 100 \rangle$, respectivement en 2D et 3D. La connaissance de la température locale permet d'associer une cinétique de croissance à ces pointes, par exemple par une modélisation KGT [Kur86a] ou la corrélation des lois de croissance. Un algorithme de croissance \ capture associé aux formes de croissance permet ensuite de suivre leur évolution, et de reproduire le mécanisme de développement des grains lors de l'étape de solidification [Car13].

Dans le cadre du doctorat de S. Chen, cette approche CAFE a été étendue aux procédés de soudage avec apport de matière et en approche LS (Fig. 4.8 a). Ainsi, le champ distance est exploité pour préciser la position spatiale du cordon, définissant le domaine de matière et son évolution au cours du temps. Les cellules évoluent (Fig. 4.8 c) entre différents états : gazeux, liquide, en croissance et solide, le basculement gaz $\rightarrow$ métal étant lié à la capture de la cellule par l'avancée de l'interface, cette dernière étape venant enrichir les précédentes modélisations [Car13]. Le maillage FE est raffiné au niveau de l'interface métal/gaz, pour suivre le cordon et l'évolution des propriétés de la matière issue de la loi de mélange (Fig. 4.8 b), à l'inverse du maillage CA resté fixe durant l'ensemble de la simulation (Fig. 4.8 d). Le modèle CAFE donne l'opportunité de suivre le développement des structures de grains formées dans le cordon, avec ou sans apport de matière. La modélisation la plus récemment développée est détaillée par C. Xue à la partie 3 de sa thèse [Xue22b]. Cependant, à la différence des procédés de coulée, la structure de grains se développe, en premier lieu, par un mécanisme de croissance épitaxiale, ce mécanisme se poursuivant à travers le dépôt des différentes passes, en amenant à la formation de grains de grandes dimensions traversant l'ensemble des couches déposées [Moy03]. Dans ce cadre, une particularité de notre approche est de devoir s'appuyer sur une structure préexistante pour proposer des résultats pertinents, la microstructure de base devant être représentée préalablement. Cette fonctionnalité est également utile pour les soudages multipasses.

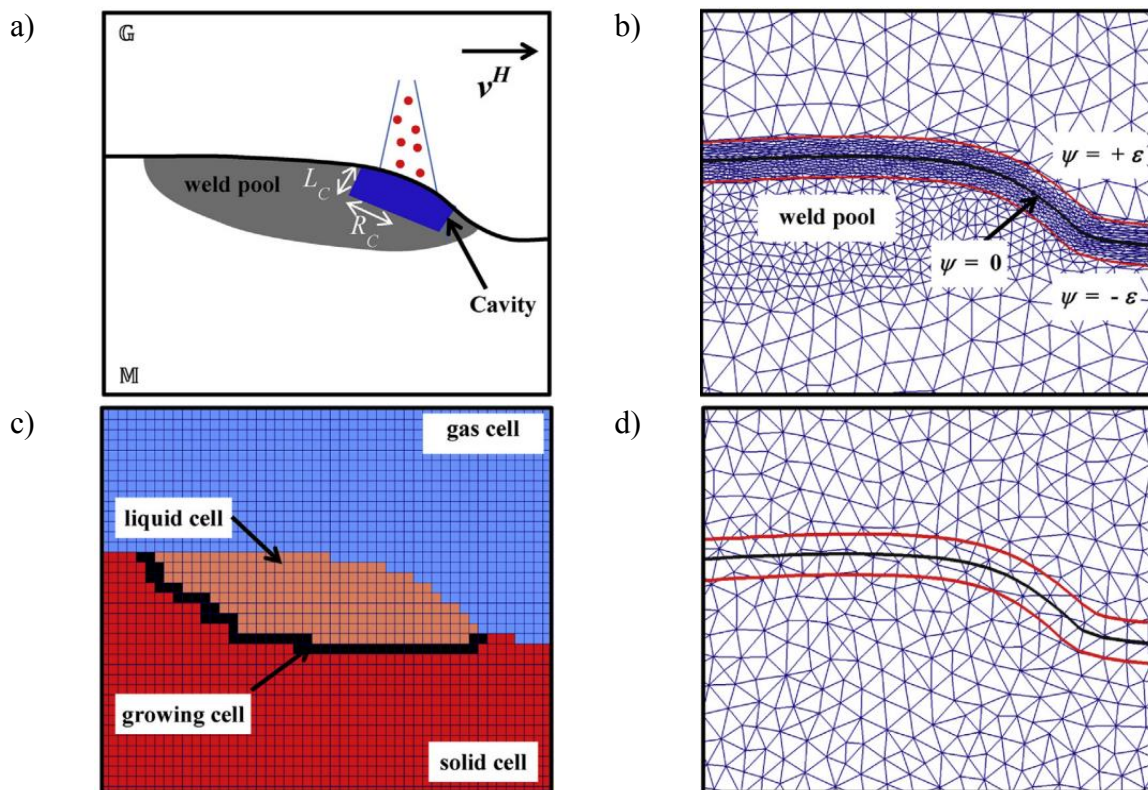


Fig 4.8: [Che16a] a) Représentation schématique d'un cordon de soudure déposé et du modèle d'apport de matière par cavité [Des14] en procédé MIG/MAG. b) Maillage FE adapté dynamiquement au voisinage de l'interface dans la zone de transition LS. c) Grille CA utilisée pour suivre le développement des structures, avec les différents états des cellules, marqués par les différentes couleurs. d) Maillage CA utilisé pour transporter, comme intermédiaire de communication, les informations du maillage macro- FE à la grille méso- CA.

Ainsi, C. Xue [Xue22a, Xue22b] s’est attaché à représenter numériquement la texture de grains observée expérimentalement en tirant aléatoirement les orientations des germes à partir des angles issus d’analyses EBSD, enrichissant la précédente approche [Che14a]. Les structures de grains virtuelles sont enregistrées sous forme d’un unique fichier binaire, de manière compacte, décrivant entièrement la microstructure. Ce fichier évolue ensuite durant la simulation du procédé à travers les processus d’activation \ désactivation des éléments du maillage CA [Car13, Che14a] pour conserver, à tout instant, une description de la microstructure courante. De manière complémentaire, il peut également être exploité, en fin de simulation, pour représenter des coupes dans la structure de grains finales, ou des observations EBSD associées aux simulations. Cette méthodologie permet un gain de mémoire appréciable, dans la mesure où elle évite l’enregistrement des microstructures sous forme de fichiers vtu, propre à l’outil de visualisation Paraview [Par15].

Les méthodologies mises en place par S. Chen [Che14a, Che16a] et C. Xue [Xue22a, Xue22b, Xue22c] ont donné l’opportunité, de simuler les évolutions microstructurales en soudage et de les exploiter pour améliorer les critères de prédiction des défauts de fissuration. Si les développements initiaux de S. Chen n’avaient pu être comparés de manière valable à des données expérimentales, le projet étant alors interne au CEMEF, le cadre collaboratif de NEMESIS a été une opportunité de réaliser ces comparaisons, et de valider les modèles et approches de résolution proposés. En particulier les mesures in-situ réalisées à l’ICB et au LMGC (WP2 – Fig. 4.7) ont permis de calibrer et valider les résultats en termes d’évolution thermique et microstructural. L’ensemble des applications était cependant restreint à des soudages réalisés sur des alliages d’acier inoxydable austénitique de nuance 316L.

La figure 4.9 [Xue22b] apporte un exemple des résultats obtenus en simulation du soudage TIG, sans apport de matière. Les paramètres associés sont rappelés dans le tableau 4.1 [Xue22b]. La simulation est réalisée dans le cadre d’une modélisation couplée, la fraction de zone pâteuse étant exploitée dans la résolution de l’équation de conservation de la chaleur, pour tronquer le chemin de solidification (*i.e. relation $g^s(T)$*) et libérer la chaleur latente.

Paramètre	Valeur	Unité
Procédé		
Tension	8.76	V
Intensité	81.3	A
Efficacité	0.65	-
Vitesse de soudage	3.3	mm·s ⁻¹
Longueur	100	mm
Simulation		
Loi de croissance	$v^{(100)} = 1.8 \cdot 10^{-6} \Delta T^{2.7}$	mm·s ⁻¹
Taille de cellule	20	μm
Volume maillage CA	40 × 7 × 1.8	mm ³
Volume maillage FE	150 × 75 × 7.5	mm ³
Densité de grains / Taille de grains	6.4 × 10 ¹³ / ~ 25	m ⁻³ / μm

Tab. 4.1 : [Xue22b] Paramètres de soudage exploités dans le soudage TIG d’acier 316L (essais LMGC) et paramètres numériques principaux des simulations décrites.

Ainsi, la figure 4.9 a) illustre les différents résultats obtenus lorsque le régime stationnaire est atteint. La zone fondue simulée (zone grisée) montre un bain étendu, lié au choix de la vitesse de soudage. La loi de croissance dendritique exploitée (Tab. 4.1) conduit au développement d'une zone liquide métastable, en surfusion, dans laquelle une germination de grains équiaxes pourrait potentiellement intervenir montrée par la position de l'isotherme du liquidus (ligne rouge). Le bain liquide prédit par le modèle est proche des observations expérimentales du LMGC (ligne jaune), en termes de forme et de position. On retrouve une longueur de bain de 11.9 mm (*simulation*) contre 11.7 mm (*expérience*) et une largeur de bain de 5.01 mm (*simulation*) contre 4.89 mm (*expérience*). De manière intéressante, ces écarts illustrent, par là même, la nécessité de proposer des lois de croissance valables, à même de représenter l'étendue du domaine en surfusion. Ainsi, une loi de croissance issue de l'outil KIND, interne à la librairie de calcul PhysalurgY [Phy24], avait été exploitée pour définir une cinétique de croissance basée sur les données thermodynamiques de l'alliage (Table 4 [Xue22b]). De manière intéressante, elle s'est révélée peu pertinente (Fig. 16 [Xue22b]), les surfusions de croissance étant fortement abaissées, amenant ainsi à préférer la loi donnée dans le tableau 4.1. Les raisons de cet échec pouvaient être liées au modèle KIND (*effet cinétique non considéré ...*) et aux données thermodynamiques mal estimées (*énergie de surface, ...*). De même, les valeurs des coefficients de diffusion peuvent aussi être improprement déterminées à hautes températures, amenant à des écarts avec les observations expérimentales. Enfin le modèle KIND n'intègre pas les effets des écoulements liquides sur la cinétique de croissance, bien que des méthodes soient actuellement disponibles [Gan03]. En complément, il faut aussi s'interroger sur la compétition de croissance dans l'acier 316L entre structures primaires α et γ qui modifie la cinétique de développement microstructurale [Mar24], et doit amener à discuter de la phase d'étude appropriée. L'ensemble de ces facteurs contraint encore à utiliser des lois de croissance obtenues par essais-erreurs au regard des données expérimentales comme dans le cas présenté ci-dessous.

Les structures de grain formées se développent en arrière du bain, selon le principe brièvement décrit précédemment (Fig. 4.8 a). Les conditions de simulations sont rappelées dans le Tableau 4.1. Les orientations de la structure de grains de base sont également issues des mesures EBSD rapportées par le LMGC. Suite à la refusion des cellules dont la température dépasse la température de liquidus, T_L , en front de fusion, on retrouve une structure de grains colonnaires formée par épitaxie sur la structure préexistante. Un mécanisme de sélection intervient par la suite, permettant aux grains les mieux orientés de croître en avant du front, bloquant les grains voisins [Rap93, Gan94a]. Ainsi, la structure de grains colonnaire apparaît plus grossière au centre du domaine et marquée par une légère désorientation liée aux évolutions des gradients de température. La progression en taille des grains est également visible dans la coupe transversale (Fig. 4.8 a), de même que leur désorientation, ceux-ci apparaissant partiellement dans ce plan. De plus, un affaissement est remarqué, lié à l'effondrement local du bain tendant à s'affaisser sous son poids. Cet affaissement, intéressant du point de vue pratique, reste difficilement prédictible, la valeur obtenue numériquement, de 120 μm (Fig 4.9 a), étant inférieure aux observations du LMGC de 190 μm . La raison principale des écarts pourrait être l'utilisation d'une viscosité dynamique importante, de 50 mPa.s, les contraintes et difficultés de résolutions numériques n'ayant pas permis de descendre en-dessous de cette valeur.

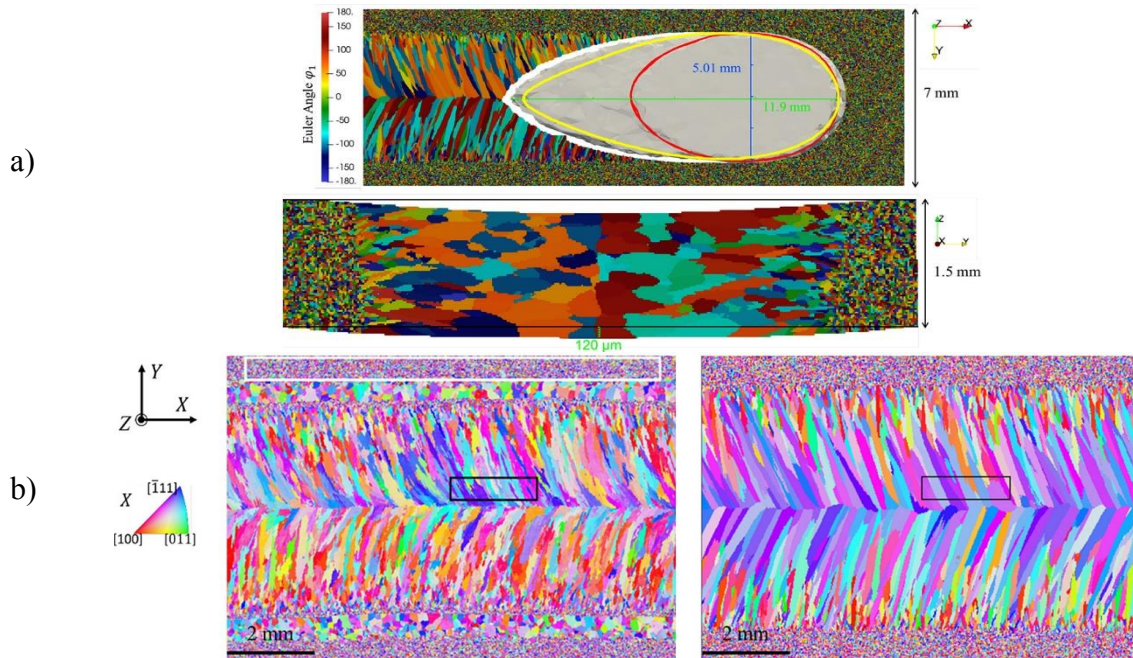


Fig 4.9: [Xue22b] Acier 316L a) Evolution des structures de grains en soudage par approche CAFE (premier angle d'Euler, ϕ_1) avec les vues (haut) de la surface inférieure et (bas) en coupe transversale après solidification. Le bain liquide (gris) obtenu de la résolution FE est comparé aux observations in-situ (contour jaune) (LMGC). L'isotherme du liquidus (contour rouge) est également présentée. b) Carte EBSD dans un plan horizontal proche de la surface inférieure représenté pour (à gauche) les observations expérimentales et (à droite) la simulation CAFE. Le code de couleur est donné pour la direction X, correspondant à l'axe de soudage.

La méthode couplée CAFE ayant proposé des prédictions valables sur les dimensions de zone fondue, il est intéressant de comparer plus finement les structures de grains formées aux données expérimentales. La figure 4.9 b) présente, ainsi, les cartes EBSD obtenues expérimentalement et numériquement, en proche surface, dans la direction X de soudage. Ces cartes montrent, par la similarité des couleurs, une bonne prédiction des orientations cristallographiques des grains, leur taille restant proche des observations expérimentales. Il est cependant intéressant d'observer, dans la carte EBSD, un domaine de grains grossis aux frontières du cordon, que le modèle CAFE ne permet pas actuellement de prédire. Des approches permettraient, sans doute, de proposer de premiers développements en ce sens, comme ceux basés sur la méthode de Potts [Pot52] et rapportés régulièrement dans la littérature [Zha12b, Zha16b, Tan17a]. Mais ces approches n'ont été que partiellement abordées dans les activités de l'équipe 2MS, lors d'un stage, et ce bien que des résultats préliminaires intéressants aient pu être obtenus. Ces approches n'en constitueraient pas moins des perspectives pertinentes pour la suite de ces travaux. La comparaison des résultats démontre, également, qu'il n'était pas nécessaire de tenir compte d'une possible germination de grains équiaxes dans le bain, celle-ci n'étant pas observée expérimentalement.

La figure 4.10 présente, en complément, la comparaison des figures de pôles obtenues pour les directions $\langle 100 \rangle$ dans le domaine resolidifié (rectangle noir, zone centrale) visible en Fig. 4.9 b). La structure de grains simulée (Fig. 4.10 b) montre les mêmes directions principales de croissance que les mesures (Fig. 4.10 a). Les pics sont localisés aux positions attendues, avec une désorientation de 25° par rapport à la direction transverse Y , la direction verticale Z portant une direction $\langle 011 \rangle$. L'article de C. Xue [Xue22b] propose une analyse approfondie des simulations des essais de soudage TIG du LMGC (*Partie 5 'Discussion'*).

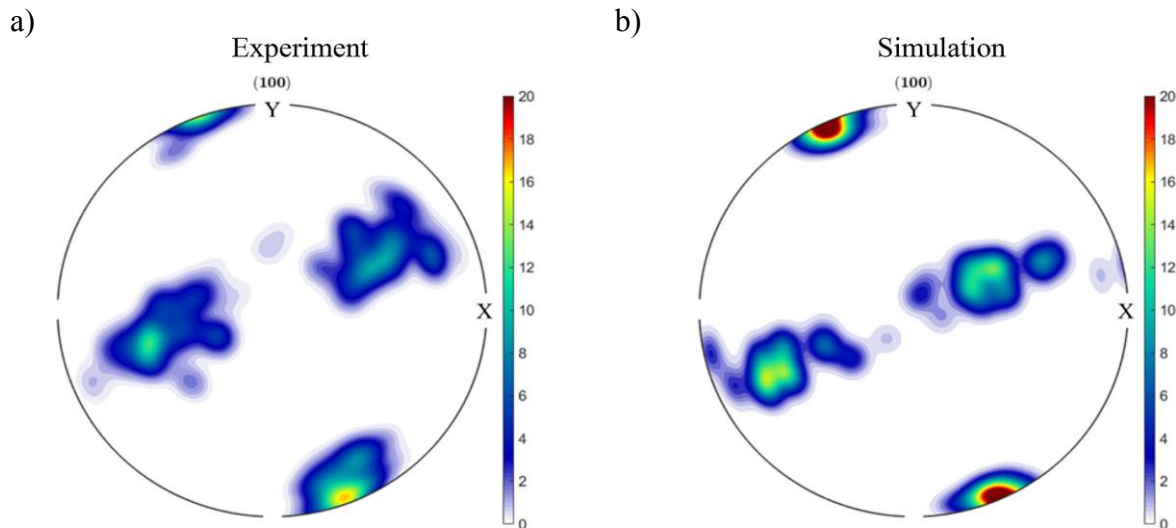


Fig 4.10: [Xue22b] Figure de pôle $\langle 100 \rangle$ des structures de grains localisées dans le rectangle noir (Fig. 4.9 b) représentée dans le plan (X,Y). Comparaison entre a) observations expérimentales (LMGC) et b) simulations.

Comme décrit précédemment, l'objectif du projet NEMESIS était, en premier lieu, de proposer des structures de grains virtuelles, basées sur le modèle CAFE, représentatives des procédés de soudage, pour étudier la problématique de l'interaction onde-structure dans l'analyse CND des procédés de soudage. Cette activité originale visait à améliorer les outils d'analyse ultra-sonore CND (Contrôle Non Destructifs) destinés à la détection des défauts en soudage. Notamment, le but était d'améliorer les outils CIVA [Civ23] et ATHENA, développés respectivement par les deux partenaires CEA LIST et EDF R&D. Plus largement, l'objectif visé était, également, de comprendre l'effet des structures de grains formées dans le chanfrein, au cours de passes successives, sur la dispersion de ces ondes ultra-sonores.

En termes d'applications, les développements dans le projet NEMESIS se sont concentrés sur des cas de simulation CAFE associés à des essais de soudage en chanfrein en U sur aciers 316L développés par l'ICB, comme détaillé par C. Xue dans son doctorat [Xue22a]. Les cas de dépôts, convenus dans le cadre des échanges avec EDF R&D, ont consisté dans la réalisation de 3 passes superposées. Le chanfrein était de 6 mm à la base. Les paramètres de soudage sont rappelés dans le tableau 4.2.

Paramètre	Valeur	Unité
Puissance	2860	W
Efficacité	0.8	-
Vitesse de soudage	1.67	mm·s ⁻¹
Vitesse de fil	31.67	mm·s ⁻¹
Diamètre de fil	0.9	mm
Longueur	100	mm

Tab. 4.2 : [Xue22a] Paramètres de soudage exploités dans le soudage MIG\MAG d'acier 316L (essais ICB)

Les résultats des essais sont détaillés en Fig. 4.11 et montrent une croissance colonnaire des grains depuis la base du chanfrein, avec une remontée de ces grains à travers les différentes passes. Il est à noter que la simulation de ces essais a nécessité une étape de calibration préalable des sources de chaleur. Dans ce cadre, le modèle développé par O. Desmaison [Des14] a été

enrichi afin de proposer des sources de chaleur angulaire (Eq. 4.2) de géométrie plus diversifiée, en particulier elliptique, représentative de la distribution de chaleur dans un chanfrein. De manière intéressante, la fig. 4.11 montre des écarts sur la géométrie de la zone fondue entre essai et simulation, la remontée de matière semblant plus importante dans les essais. L'origine de ces écarts serait due à la refermeture progressive du chanfrein, liée aux contraintes résiduelles, et non considérée dans la simulation CAFE. Au bilan, les cartes de structures montrent suffisamment de similarités pour valider le modèle CAFE, mais permettent également de mettre en évidence quelques-unes de ses limites pour la simulation multipasses.

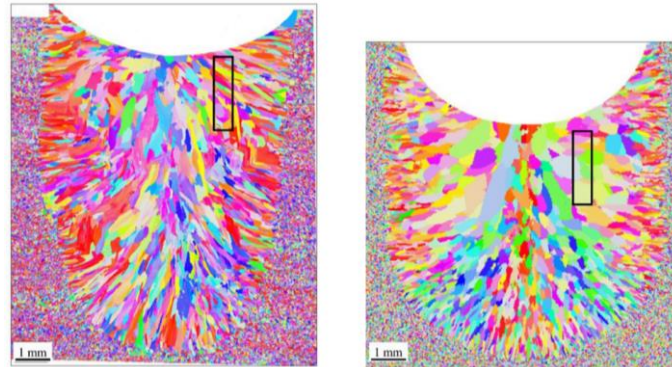


Fig 4.11: [Xue22a] Essais de soudage développés à l'ICB avec dépôt de trois passes : Comparaison de (gauche) la cartographie EBSD à (droite) la simulation CAFE du procédé.

Les structures de grains virtuelles ainsi obtenues ont été exploitées numériquement pour la simulation de la propagation des ondes ultrasonores, en réponse aux objectifs de NEMESIS. Ces essais et les analyses associées ont été développés en fin de projet, en raison du temps nécessaire à produire des structures réalistes, dans un format exploitable. La Fig. 4.12 montre ainsi la propagation des ondes US obtenue avec le logiciel CIVA (CEA LIST) [Xue22c]. L'influence de la microstructure de la zone de soudage sur cette propagation du signal ultrasonore est observée à travers la dispersion et l'étalement du signal, fonction des orientations locales des grains. En conséquence, l'effet de cette microstructure sur la qualité de la détection potentielle de défauts est clairement mis en évidence, le signal apparaissant plus diffus. Il est, en conséquence, plus complexe de détecter des défauts dans cette zone, le signal n'ayant pas la régularité visible sur une structure homogène.

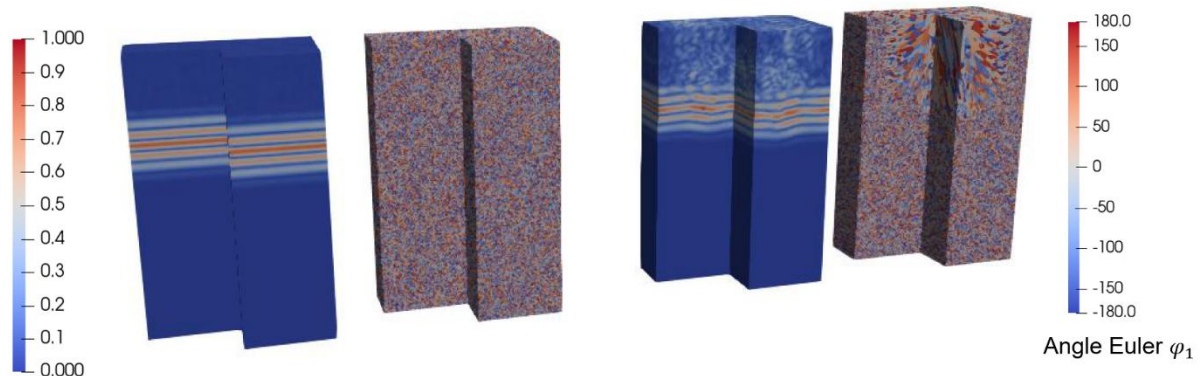
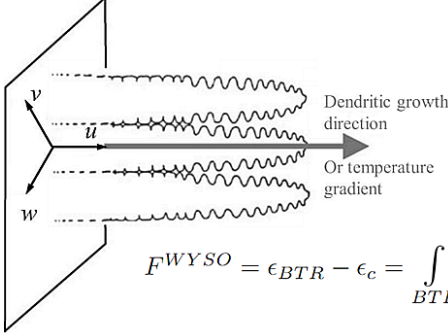


Fig 4.12: [Xue22c] Amplitude du signal US propagé dans les structures de grains virtuelles CAFE – Simulations développées avec le logiciel CIVA (CEA LIST). La simulation a été appliquée sur (gauche) une structure homogène et isotrope, associée au matériau de base, avant d'être testée sur (droite) une structure de grains obtenue par méthode CAFE (Fig. 4.11). L'amplitude de l'onde est donnée de manière adimensionnelle. La fréquence de la source est de 5 MHz et la longueur d'onde voisine de ~ 1 mm, caractéristique de la taille des défauts étudiés.

En réponse aux attentes de NEMESIS, une analyse a également été menée pour définir un risque de fissuration dans les pièces soudées, à travers un critère WYSO [Won00] amélioré. Ce dernier est basé sur les expressions présentées en Fig. 4.13 et consiste à déterminer la déformation cumulée au cours de la solidification, dans le domaine pâteux. Le calcul de cette déformation est limité au domaine de fragilité (BTR). Dans ce domaine, le matériau ne présente pas une consistance suffisante pour résister aux contraintes thermiques, permettant ainsi une ouverture des zones intergranulaires. Si la fraction de solide est suffisamment faible, le métal liquide peut pénétrer et ‘soigner’ la zone ouverte. À l’inverse, pour les fortes fractions de solide, la perméabilité n’est pas suffisante et le liquide ne peut pénétrer le domaine pâteux. On considère, ainsi, habituellement, un domaine de fragilité s’étendant des fractions de solide ‘seuil’, g^s , allant de 0.9 à 0.99.



$$F^{WYSO} = \epsilon_{BTR} - \epsilon_c = \int_{BTR} \dot{\epsilon}(t) - \frac{\varphi}{\dot{\epsilon}^{m^*} \Delta T_{BTR}^{n^*}}$$

$$F^{WYSO}(t) = \epsilon_{BTR}(t) - \epsilon_c(t) = \sum_{n_{BTR}=0}^{n_{BTR}} \dot{\epsilon}(t) \Delta t - \frac{\varphi}{\dot{\epsilon}(t)^{m^*} \Delta T_{BTR}^{n^*}}$$

Fig 4.13: [Xue22a] Présentation du critère WYSO destiné à la mesure du risque de fissuration. Le schéma indique le repère de référence ($\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$), dans lequel le tenseur des vitesses de déformations, $\dot{\epsilon}$, est remplacé. Les paramètres du modèle sont fixés à $\phi = 0.02821$, $m^* = 0.3131$ et $n^* = 0.8638$ [Won00].

La Fig. 4.13 présente le principe du calcul de ce critère WYSO, selon l’approche proposée par Bellet [Bel09]. La résolution mécanique donne accès au tenseur des vitesses de déformation dans le repère du laboratoire, qui est ensuite projeté dans le repère du grain ($\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$). Une sous-matrice en est extraite pour le plan ($\mathbf{v}, \mathbf{w}$), normal à la direction du gradient thermique considérée comme direction de propagation des structures granulaires. La plus forte des valeurs propres dans ce plan, $\dot{\epsilon}$, est ainsi calculée, comme représentative des déformations maximales rencontrées dans les directions de ruptures. Cette déformation est ensuite intégrée dans le temps, ou au cours des pas de temps de calcul. Le critère WYSO (Fig. 4.13) consiste ainsi à comparer la déformation cumulée, ϵ_{BTR} , à la déformation critique, ϵ_c , fonction des connaissances expérimentales. Si cette dernière est positive, un risque de fissuration à chaud apparaît. Les développements réalisés par C. Xue [Xue22a] ont enrichi le critère WYSO en bénéficiant des prédictions microstructurales développées par l’approche CAFE. Ainsi l’orientation cristallographique $\langle 100 \rangle$ de la structure de grains prédite localement, la plus proche du gradient thermique, ∇T , remplace le choix précédemment réalisé de cette dernière direction (Fig. 4.14 a), et est, ainsi, liée à la microstructure ‘réelle’. La figure 4.14 b) présente les résultats de ce nouveau modèle avec une prédiction du critère WYSO entre deux configurations, fissurante et non-fissurante, dans un même essai de soudage repris de conditions exploitées dans un précédent projet de l’équipe 2MS [Bel16] sur acier AISI321. On retrouve un critère de fissuration plus important en bord de domaine, montrant un risque de fissuration

élevé, ce qui est confirmé par l'analyse des capteurs placés dans ces positions [Xue22a]. De même, des évolutions différentes sont obtenues entre conditions de soudage fissurantes et non fissurantes comme visible sur la Fig. 4.14 b), les valeurs du critère WYSO étant plus importantes sur les conditions de soudage fissurantes. Il est à noter, cependant, que l'introduction de ce critère amélioré a montré des écarts réduits avec la précédente méthodologie. Xue explique ce point par la faible différence angulaire entre la direction $\mathbf{u}$ choisie et la direction locale du gradient de température. En effet, les grains colonnaires de la zone de soudage ont, dans le cas présent, une direction cristallographique de croissance proche de ∇T , ce qui doit réduire les écarts entre approches. Cependant, il est important de noter qu'une loi de comportement mécanique isotrope a été exploitée ici, ce qui contribue également aux faibles écarts et influences observés. Une loi anisotrope, basée sur la connaissance des orientations microstructurales, aurait permis de mettre en évidence des différences sans doute plus importantes et aurait, en conséquence, pu changer cette conclusion.

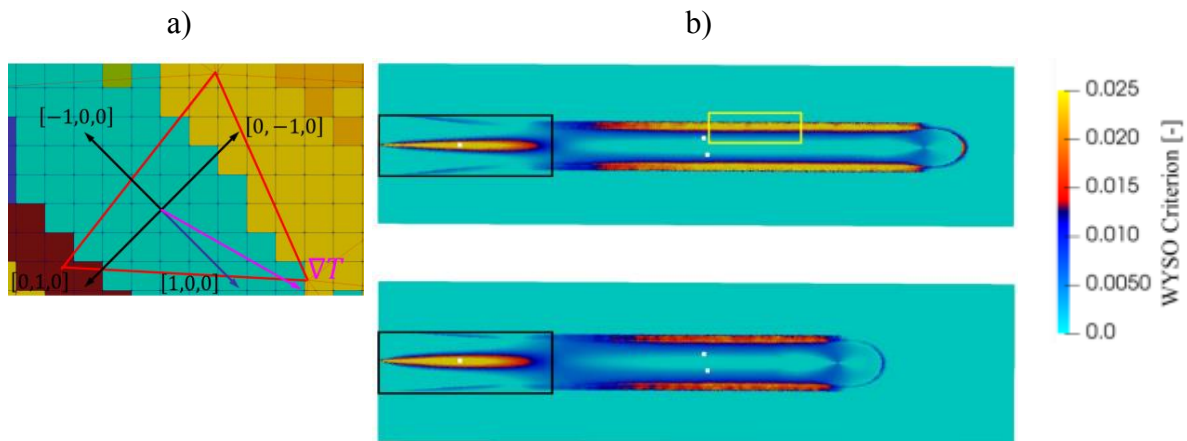


Fig. 4.14: [Xue22a] a) Sélection de la direction de croissance dendritique retenue pour le vecteur $\mathbf{u}$ (Fig. 4.13). b) Critère WYSO prédit pour les différentes configurations de soudage sur acier AISI 321 : haut) fissurante : vitesse de soudage $v = 280 \text{ mm.s}^{-1}$ et $I = 109 \text{ A}$. bas) non-fissurante : vitesse de soudage $v = 260 \text{ mm.s}^{-1}$ et $I = 102 \text{ A}$. La tension est fixée à 10 V et les pièces ont une largeur de 25 mm.

4.3 Bilan et perspectives

i. Synthèse

L'activité développée autour de la modélisation des procédés de soudage s'est faite en continuité avec les précédents travaux menés au CEMEF [Ham08]. Elle s'est réalisée à travers l'étude de différents procédés de soudage, hybride, MIG/MAG ou TIG avec apport de matière. L'ensemble des deux projets ANR mentionnés dans ce chapitre, SISHYFE (2010-2014) et NEMESIS (2018-2022), ont été développés dans le cadre de partenariats académiques et industriels forts, établis de manière pérenne avec différents industriels intéressés à l'optimisation des procédés de soudage.

D'une part, le projet SISHYFE a permis de développer une modélisation de ces procédés de soudage dans le cadre d'une approche LS, bénéficiant de nombreux avantages, notamment dans la gestion des problèmes de contact matière / matière en multipasses, ou le suivi en continu du développement du cordon. Cette approche a également bénéficié des outils de gestion de maillage FE du CEMEF, intégré dans la librairie de calcul collaborative Cimlib. Ces développements ont permis d'exploiter un maillage adapté à la résolution des problèmes posés, sur la base d'une métrique bien définie, tel que détaillée dans les travaux de O. Desmaison [Des13] ou C. Xue [Xue22a]. On pourra retenir de ces travaux les points marquants suivants :

- La modélisation thermo-mécanique du procédé de soudage hybride est réalisée à travers le développement de modèles de sources de chaleur réalistes, notamment par la proposition d'un modèle original de source MIG partagé entre une part angulaire (Eq. 4.2) et une part volumique (Eq. 4.4). Les évolutions thermiques simulées ont montré de bonnes concordances avec les observations expérimentales réalisées par thermocouples par le partenaire ICB, qui ont complété les analyses par caméra thermique. En particulier, les montées et descentes en températures expérimentalement observées sont très bien approchées par nos modèles [Xue22a].
- Le champ de vitesse déterminé par la résolution des équations de Navier-Stokes a permis de modéliser correctement l'avancée du cordon, notamment dans un contexte multipasses, amenant à des géométries de cordon très correctes au regard de celles observées expérimentalement, tant dans SISHYFE que NEMESIS. Ces comparaisons ont constitué une validation des travaux entrepris. En particulier, la proposition de travailler avec une conductivité augmentée, avec $f_\lambda = 5$ [Des14], a conduit à retrouver les dimensions de bains attendues. S'il n'a pas été possible de représenter les écoulements dans le bain liquide, initialement [Des14], en raison des instabilités numériques dues aux valeurs des propriétés de viscosité liquide, des améliorations ont été apportées par C. Xue [Xue22a]. De même, dans le cadre de la modélisation des procédés de fabrication additive, présentée dans le chapitre suivant, ces problèmes apparaissent actuellement mieux maîtrisés.
- L'objectif de modéliser le comportement mécanique des matériaux en soudage apparaît validé. Les résultats présentés et détaillés par Desmaison [Des13] ont montré des prédictions pertinentes, les champs de contraintes résiduels apparaissant similaires aux observations. On peut cependant regretter un manque de caractérisation mécanique précise du comportement à chaud de l'alliage d'étude, qui aurait permis de meilleures comparaisons. Ainsi, de manière

plus générale, l'une des limites potentielles des approches développées dans la modélisation du comportement mécanique reste le manque fréquent de connaissance des lois de comportement à chaud des alliages d'études. En ce sens, les développements récents autour de l'équipement Dedimet [Gao22a, Haz22] dans l'équipe 2MS sont, certainement, une réponse particulièrement prometteuse pour l'avenir.

D'autre part, le projet ANR NEMESIS m'a donné, en tant que porteur, l'opportunité de conduire un premier projet ambitieux autour de la maîtrise des procédés de soudage dans les contextes automobiles et nucléaires, et le développement, par approche CND, de méthodes de détection efficaces des potentiels défauts formés, à travers l'exploitation des structures de grains virtuelles CAFE simulées. Ce projet s'est ainsi fortement appuyé sur nos connaissances acquises dans le projet de doctorat de S. Chen [Che14a]. Nous avons ainsi su mettre en application, et fortement améliorer, les outils précédemment accessibles dans la Cimlib pour réaliser les microstructures nécessaires aux simulations CND développées par le CEA LIST et EDF R&D dans des contextes industriels, et sur des alliages d'intérêt. Les points suivants peuvent être identifiés dans cette activité :

- Concernant les évolutions microstructurales, NEMESIS a permis de développer une modélisation fine de la croissance des grains lors des procédés de soudage. La méthodologie CAFE a été appliquée au contexte du soudage TIG, avec et sans apport de matière. Les résultats apparaissent concluants avec une prédiction pertinente des orientations microstructurales, au regard des données EBSD transmises par le LMGC et EDF R&D [Xue22a, Xue22b]. Sur des volumes de plus grandes dimensions, on retrouve la formation de larges grains colonnaires, formés par croissance épitaxiale. Une des limites principales reste la détermination des cinétiques de croissance dendritiques. Comme montré par C. Xue, il est possible d'exploiter des outils couplés ThermoCalc (calcul thermodynamique) pour ces estimations. Cependant les lois de croissance obtenues se sont avérées peu pertinentes, nécessitant de les estimer à travers une calibration basée sur la comparaison des positions de zones fondues.
- De même, des critères de fissuration à chaud intégrant l'orientation des structures de grains ont pu être développés, pour enrichir le critère WYSO par la connaissance de la microstructure développée localement. Ceci a permis de construire des cartes indiquant les risques de fissuration locaux. Cependant, l'orientation retenue est restée proche de celle du gradient thermique [Xue22a]. Ainsi, peu d'écarts ont été observés dans le cas présent avec les anciennes estimations. De même, il n'a pas été procédé à des comparaisons expérimentales véritables avec les résultats du projet NEMESIS obtenus à l'ICB.
- Enfin, concernant le développement des structures de grains virtuelles, ce point étant l'objectif principal de NEMESIS, de premières données ont été obtenues par C. Xue, dans le cadre de soudages multipasses (ICB), et leurs analyses ont débuté [Xue22c] par le CEA List et EDF R&D avec les logiciels CIVA [Civ23] et ATHENA. Elles ont mis en évidence, de manière quantitative, la dispersion des ondes associées aux microstructures traversées, due à la présence d'une structure inhomogène et anisotrope. Bien que ces développements restent préliminaires, ils sont prometteurs et l'intérêt de poursuivre ce travail est manifeste de la part des industriels.

ii. Bilan et diffusion

Le bilan d'activité de ce travail sur la simulation des procédés de soudage, auquel j'ai contribué dans l'équipe 2MS, est le suivant :

- ▶ Cinq publications dans des journaux de rang A :
[RA14, RA16, RA17, RA20, RA41]
- ▶ Onze conférences internationales :
[CI26, CI27, CI28, CI29, CI32, CI36, CI72, CI77, CI79, CI84, CI85]
- ▶ Sept conférences nationales :
[CN10, CN11, CN12, CN13, CN15, CN24, CN30]
- ▶ Cinq communications nationales :
[CO3, CO4, CO35, CO41, CO43]
- ▶ Un séminaire de recherche :
[SR3]

De même, cette activité a donné lieu à :

- ▶ Trois encadrements de doctorat soutenus :
O. Desmaison (Projet ANR SISHYFE, Septembre 2010 – Septembre 2013)
S. Chen (Financement China Scholarship Council, Mai 2011 – Mai 2014)
C. Xue (Projet ANR NEMESIS, Octobre 2018 – Septembre 2021)
- ▶ Deux encadrements de Mastère spécialisé MaPMod :
A. Blazy (Octobre 2012 – Septembre 2013)
A. Rassane (Novembre 2021 – Octobre 2022)
- ▶ Six encadrements de stagiaires :
A. Blazy (Avril – Septembre 2012)
G. Lafforgue-Marmet, A. Berthier (Octobre – Novembre 2016)
L. Zolla (Janvier – Juillet 2018)
A. Rassane (Avril – Septembre 2021)
I. Bentaleb (Mars – Septembre 2023)

Ces travaux ont bénéficié d'une bonne visibilité, dans les conférences dédiées mentionnées, tant au niveau national (Journée Simulation Numérique du Soudage, Conférences Matériaux 2014, 2018, 2022) qu'international (Conférence IWS, Seggau, Autriche). Ils ont été reconnus comme une activité pertinente dans la modélisation instationnaire des procédés de soudage par fusion (Tomashchuk [Tom12]). Chen [Che16b] a également rappelé que notre modèle thermomécanique avait conduit à des résultats comparés valablement aux expériences. Cette validation a été montrée plus complètement par Xue [Xue22a, Xue22b] à travers le projet NEMESIS. Bai et Colegrove [Bai18] ont mentionné l'approche de modélisation proposée comme étant de type 'séparée', car ne considérant pas le plasma d'arc dans la résolution. Ils ont

souligné cependant son intérêt en ce qui concerne le temps de calcul, comparativement aux approches ‘unifiées’. En effet, le coût de calcul est, dans l’approche LS proposée, réduit, bien que l’évolution de la surface libre doive être calculée avec des conditions limites appropriées. Concernant les structures de grains [Che14b, Che16a], ce travail a été rapporté, pour son intérêt, dans des approches en fabrication additive (FA) dédiées aux structures de grains [Tan20], bien qu’il ait été souligné qu’il ne permet pas, actuellement, de suivre les évolutions structurales dans la ZAT (zone affectée thermiquement) [Wei17]. Il est intéressant, enfin, de noter que ces travaux ont été rapportés dans différentes activités liées à la modélisation des procédés FA telles celles développées par Hou [Hou15] et DebRoy [Deb18], pour la description de l’emploi des méthodes LS, ainsi que Palmeira Belotti [Pal23] pour analyser les changements d’orientations microstructurales observées dans ces mêmes procédés FA.

iii. Perspectives

Les limites rencontrées dans la modélisation des procédés de soudage décrivent parallèlement les développements futurs attendus. Il apparaît utile d’améliorer la modélisation des écoulements dans le bain liquide, sur la base d’un bilan d’efforts plus complet, intégrant les forces de Lorentz. Cette résolution permettrait d’accéder à des descriptions plus riches et précises des géométries de bain fondu et des évolutions thermiques. De même, il serait nécessaire de pouvoir mettre en œuvre des solveurs intégrant le terme de Darcy, pénalisant les écoulements dans la zone pâteuse, sans considération d’un terme de viscosité modifié, comme actuellement [Xue22a]. En complément, des modèles de perméabilité anisotrope, tenant compte des orientations des structures colonnaires, seraient également d’un intérêt certain pour une représentation plus correcte de ces écoulements et de leur interaction avec la zone pâteuse. De même, la mise en œuvre de résolutions mécaniques découplées entre les domaines liquide et solide, à l’image des développements réalisés par Zhang dans son doctorat [Zha20] amènerait à une meilleure représentation du comportement respectif des deux milieux.

Par ailleurs, les modèles développés [Des13, Che14a, Xue22a] n’intègrent pas les transformations microstructurales liées aux conditions thermiques. En particulier, les transformations induites par les étapes de chauffages et de refroidissements rapides n’ont pas été investiguées. Cependant, les procédés de soudage conduisent à des évolutions métallurgiques caractéristiques. On peut citer, dans les aciers, le développement de phases bainitiques, ou martensitiques, qui peut être suivi avec un diagramme TTT ou TRC approprié. Des approches ont déjà été proposées et implémentées par Hamide [Ham08]. Dans les alliages multicomposés ou multiphasés, ces transformations de phases amènent à la formation de domaines intermétalliques fragilisants dont l’analyse révèle les problématiques industrielles actuelles [Roy12, Say20]. Dans ce cadre, il serait intéressant de pouvoir suivre ces transformations, pour décrire l’état final du matériau, et de coupler ces évolutions à la résolution mécanique, aidée par une connaissance du comportement spécifique des phases présentes.

En complément, l’équipement Dedimet, précédemment mentionné, devrait également permettre d’avoir une meilleure connaissance des lois de comportement mécanique à hautes températures, dont la détermination est primordiale pour estimer le risque de fissuration à chaud sur les pièces soudées. L’identification de lois de comportement mécanique, à haute température, idéalement dans le domaine pâteux, associées aux alliages d’intérêt étudiés

permettrait ainsi de valoriser considérablement nos travaux à travers des simulations plus réalistes vis à vis du risque de fissuration à chaud.

Il pourrait, de même, être envisagé de faire évoluer le modèle vers une représentation plus complète du procédé, à l'image des résultats présentés en partie introductive de Xu et Tsai [Xu09] ou Traida et Roger [Tra11], en intégrant les évolutions du plasma d'arc et la formation des gouttelettes. Ce modèle de seconde génération, pour reprendre la terminologie de Jonsson [Jon94] ou unifié pour considérer celle de Bai et Colegrove [Bai18] lèverait un certain nombre d'inconnues sur les conditions aux limites actuellement appliquées dans notre approche. Il nécessiterait également de développer de nouveaux solveurs actuellement non accessibles dans la Cimlib pour résoudre les équations de l'électromagnétisme et suivre les évolutions des courants et champs induits. Ces solveurs donneraient, en conséquence, la possibilité de développer un modèle complet déterminant l'effet des Forces de Lorentz sur le bain liquide.

Enfin, les projets les plus récents ont été fortement portés par les activités en lien avec le CND, à travers le développement de microstructures virtuelles, et les collaborations réalisées avec le CEA LIST et EDF R&D, en lien avec les outils CIVA et ATHENA respectivement. Ces collaborations ont amené à une exploitation originale des structures de grains CAFE et méritent d'être poursuivies et enrichies dans le futur. Elles sont également révélatrices des besoins industriels actuels, notamment dans le domaine du nucléaire, de pouvoir améliorer le contrôle des soudures et la qualification des assemblages réalisés, sur site, afin de garantir leur tenue en service, sur le long terme, et dans des environnements de travail sans cesse plus sévères.

Plus généralement, il apparaît nécessaire de poursuivre et renforcer le couplage débuté entre les développements numériques et expérimentaux en étendant les partenariats actuels détaillés précédemment. Ainsi, les activités numériques présentées gagneraient à être développées, en recherchant de nouveaux partenariats industriels forts, dans l'objectif de poursuivre la validation des solutions numériques originales développées, et d'étendre leur diffusion. Ces collaborations présenteraient un bénéfice mutuel indéniable pour les différents acteurs, comme cela a été démontré dans les travaux de SISHYFE et NEMESIS. Les travaux présentés, dans les chapitres suivants se placent également dans cette même perspective.

Chapitre 5

Procédés de fabrication additive

« So I hope you can accept
nature as She is - absurd. »

*The Strange Theory of Light and Matter,
Richard P. Feynman, 1987*

Table des matières

5.1	Introduction	118
5.2	Activité de recherche	122
i.	Fabrication Additive sur lit de poudre – Description du procédé	122
ii.	Initiation des activités de modélisation – Projet CEFALE	124
	• Bilan de conservation – énergie	126
	• Bilan de conservation – quantité de mouvement	127
	• Evolution matière	128
	• Présentation des résultats marquants	129
iii.	Application aux alliages métalliques – Projet SAFRAN	132
	• Modélisation des processus de vaporisation	133
	• Validations expérimentales	136
iv.	Modélisation des évolutions microstructurales – Projet CETIM	140
5.3	Bilan et perspectives	145
i.	Synthèse	145
ii.	Bilan et diffusion	146
iii.	Perspectives	149

5.1 Introduction

Les procédés de fabrication additive (FA ou *Additive manufacturing* – AM) ont connu un essor spectaculaire durant la dernière décennie, confirmant qu'ils constituent l'un des éléments, sinon le principal, d'une nouvelle révolution industrielle [Ber12], également qualifiée de '*quatrième révolution*' [Tom22], se réalisant parallèlement au développement de l'*Industrie 4.0* [Elh22]. Ces procédés, par la liberté de conception offerte, soutiennent et entretiennent une part notable de l'innovation actuelle rencontrée dans le domaine de l'ingénierie [Cho22]. Ils amènent aussi à regarder, actuellement, comment ils peuvent s'adapter aux nouveaux matériaux industriels existant, voire permettre de les créer directement [Li19], notamment en travaillant sur leur architecture. La littérature scientifique dédiée à ces procédés s'est, en conséquence, particulièrement développée depuis une vingtaine d'années (Fig. 5.1 a, voir aussi Fig. 1 dans [May21b]) montrant l'intérêt des milieux académiques à étudier et maîtriser ces nouvelles technologies de fabrication. De plus, ces procédés se révèlent très diversifiés, notamment pour les applications dédiées aux matériaux métalliques, mais présentent également des variétés importantes de qualité de réalisation et de taux de dépôts (Fig. 5.1 b), nécessitant, au niveau industriel, un choix réfléchi du procédé à exploiter pour une application donnée, et la recherche d'un compromis dans la fabrication.

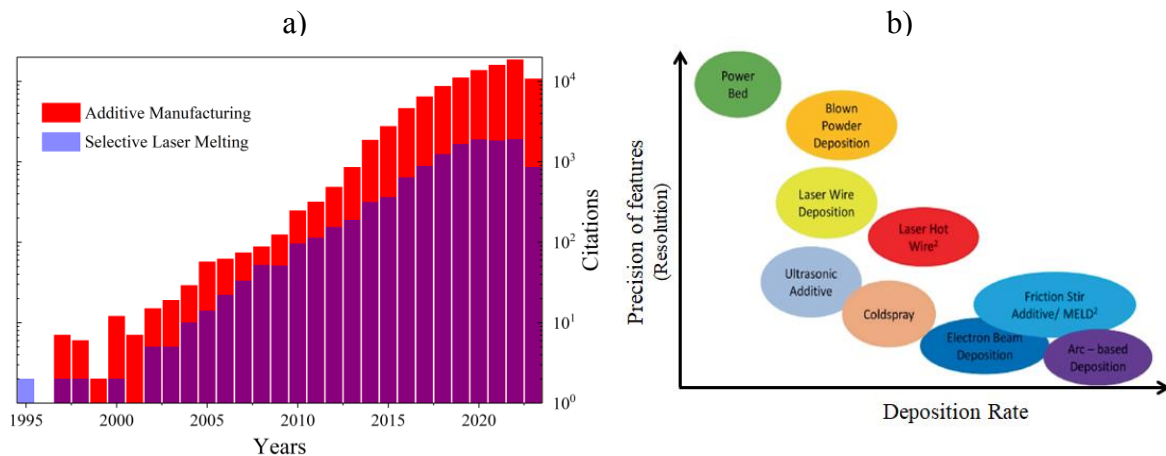


Fig 5.1 : a) Nombre de communications scientifiques annuelles consacrées aux procédés de fabrication additive (Additive Manufacturing) et, plus particulièrement, à ceux de fusion laser sélective (Selective Laser Melting) (Recherche Base de données Scopus sur les mots-clés 'Additive Manufacturing et 3D – Printing' et 'Selective Laser Melting et Laser Beam Melting'). b) Comparaison des débits de matière au regard de la précision de réalisation pour un ensemble de procédés de fabrication additive dédiés aux matériaux métalliques [Ram22].

De manière générale, ces procédés se basent, ainsi, sur une représentation numérique de la pièce à réaliser, qui est ensuite construite couche par couche, correspondant à un processus qualifié d'*Impression 3D*. Ces procédés d'*élaboration directe* suppriment les étapes intermédiaires et les contraintes rencontrées dans les autres procédés de réalisation et de mise en forme industriels, à l'image des procédés d'usinage ou de fonderie. En conséquence, ils apportent une réduction appréciable de la consommation de matière, avec une possibilité de réutilisation de la matière non fondue, à tout le moins dans les procédés de type '*poudre*'. De même, les étapes de parachèvement, avant usage, sont limitées, réduisant d'autant les coûts d'élaboration. En ce sens, même si les temps de fabrication demeurent encore importants, ces procédés permettent une conception rapide de la pièce à réaliser. Ils amènent, dans cette

approche, à développer des pièces de géométries complexes, optimisées ou nouvelles, qui seraient difficiles, sinon impossibles, à produire avec des procédés plus conventionnels. Ils conduisent aussi à une reconception de pièces dans un objectif de gain de masse et/ou de propriétés mécaniques [Hal16]. De plus, les procédés FA se sont adaptés (Fig. 5.2 a), permettant de travailler avec des matériaux métalliques, polymères ou céramiques. La liberté de réalisation offerte permet également de proposer des applications métalliques innovantes, de nouvelles géométries ou, à titre d'exemple, de travailler sur la porosité des pièces (Fig. 5.2 b).

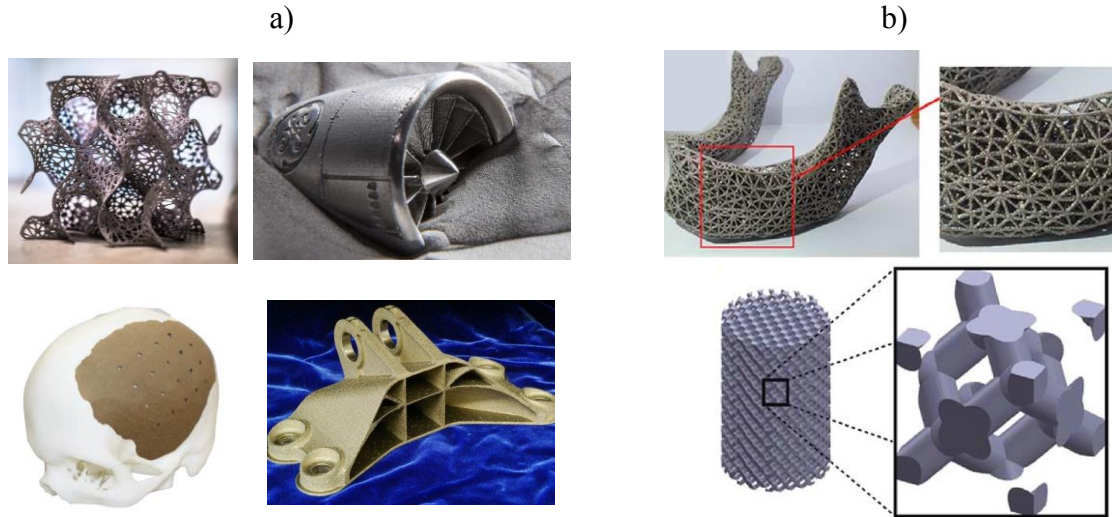


Fig 5.2 : a) Pièces réalisées par procédés FA montrant la diversité des applications (de gauche à droite), haut : Ti6Al4V / EBM [Ntn18], Direct metal laser melting (DMLM) [Ge17], bas : Réparation d'un crâne humain [OPM24], reconception d'un support de moteur à réaction [CW13]). b) [Cho22] Conceptions de pièces – haut : Prothèse mandibulaire avec structure architecturée 3D en Ti6Al4V (EBM) et bas : exemple de matériau poreux réalisable en fabrication additive (L-PBF)

Parmi les procédés FA métalliques actuellement développés, une attention marquée s'est portée sur les procédés de fusion laser (*Laser-based Additive Manufacturing* – LAM) qui ont rencontré l'intérêt des milieux industriels dans des domaines aussi divers que l'aéronautique, l'énergie ou la santé. Yan [Yan18] note ainsi que ces procédés présentent de nombreux avantages. Ainsi, les hautes densités d'énergie accessibles et les domaines affectés thermiquement réduits, amènent à des vitesses de refroidissement rapide dans le bain, de l'ordre de 10^3 à 10^4 K·s⁻¹ [Fra14]. Les microstructures formées sont de tailles caractéristiques réduites et permettent d'obtenir des propriétés mécaniques élevées. Ces mêmes énergies donnent la possibilité de travailler avec des matériaux difficilement usinables, ou aux températures de fusion élevées. On peut ainsi citer les superalliages base-Ni, les alliages de titane (Ti6Al4V) ou encore les alliages réfractaires Co-Cr [Fra14] comme exemples d'application. De même, un intérêt est apparu pour développer des matériaux à gradient de propriétés, par une évolution progressive des compositions de travail, comme Liu [Liu03] l'a investigué sur les alliages Ti / TiC, montrant la limitation du développement des fissures. Demir [Dem22] a, récemment, développé ces mêmes approches en combinant deux aciers austénitiques, 316L et Fe35Mn, à travers une variation des débits d'apports des poudres associées. Le mélange est bien réalisé, permettant de substituer Ni, Cr et Mo par Mn progressivement. Des gradients fonctionnels sont retrouvés, offrant une liberté de conception nouvelle à travers une modification locale des propriétés. Différents procédés LAM sont accessibles et commercialisés tels les procédés de

frittage laser sélectif (*Selective Laser Sintering* – SLS) ou de dépôt direct de métal (*Direct Metal Deposition* – DMD / *Direct Energy Deposition* – DED). Plus particulièrement, le procédé de fusion laser sélective (*Selective Laser Melting* – SLM, aussi dénommé *Laser Beam Melting* – LBM ou *Laser Powder Bed Fusion* – L-PBF, comme défini par la suite) a connu un intérêt industriel fort depuis une dizaine d’années (Fig. 5.1 a).

Le procédé L-PBF a été développé à partir des années 90’ au Fraunhofer Institute ILT (Aachen, Allemagne). Son principe est basé sur une fusion sélective et localisée d’un lit de poudre, amenant, couche par couche à la réalisation de la pièce dense. Ce procédé revêt un intérêt particulier en étant adaptable au travail des matériaux non métalliques, en particulier céramiques. Plus précisément, son application à ces dernières classes de matériaux a longtemps été ignorée en raison de leur absorption réduite au rayonnement laser et de leur faible résistance au choc thermique. En conséquence, bien que les matériaux céramiques présentent des propriétés particulièrement intéressantes, notamment pour des compositions eutectiques, la réalisation de pièces céramiques par procédés L-PBF reste encore limitée. À cet effet, il est apparu intéressant de développer une collaboration inter-laboratoire sur cette thématique de recherche prometteuse. Dans ce cadre le projet CEFALE a été proposé à l’institut Carnot M.I.N.E.S par M. H. Berger, C. Colin (CMAT – Centre des Matériaux, Evry) et M. Bellet (CEMEF) et accepté pour financement, en s’insérant dans un projet plus large, ACLAME. Ce dernier ambitionnait de développer, dans les centres des écoles des MINES, les compétences, associées à l’étude et à la maîtrise des procédés FA. L’objectif général de CEFALE (2014-2017, 489 k€) portait, plus spécifiquement, sur la maîtrise du procédé L-PBF appliqué aux matériaux céramiques, et le contrôle de l’apparition des défauts, à l’échelle du cordon, inhérents à ces matériaux. On pourra regarder utilement, à cet effet, la présentation qui en a été donnée par le CMAT [CMA16, CMA17].

L’activité à laquelle j’ai participé, autour de la modélisation thermo-mécanique des procédés de fabrication additive, a ainsi débuté dans le cadre de ce projet, en 2014, en continuité, et avec les compétences précédemment acquises dans les études développées sur l’analyse et la maîtrise des procédés de soudage par fusion. Cet enrichissement de nos activités de recherche est apparu naturelle pour nos équipes SP2 et TMP, en correspondance avec les problématiques de recherche du CEMEF et sa volonté de participer au développement des procédés de mise en forme industriels innovants. Plus particulièrement, concernant l’activité propre au CEMEF, un modèle thermo-mécanique pertinent pour simuler les procédés L-PBF à l’échelle du cordon par approche Level-Set (LS) a été proposé et développé par Q. Chen lors de son doctorat, que j’ai personnellement co-encadré [Che18b], avec le Pr. M. Bellet et Ch. A. Gandin, durant son projet de recherche réalisé entre les équipes SP2 et TMP.

Cette activité s’est ensuite poursuivie par le doctorat CIFRE débuté par Queva en 2017, et soutenu en 2021, en partenariat avec Safran Additive Manufacturing. Ce nouveau projet, que nous avons défini et dirigé, le Pr. M. Bellet et moi-même, a porté sur la modélisation du procédé L-PBF appliqué aux alliages d’intérêt aéronautique [Que21], en lien direct avec les besoins exprimés par Safran. Dans ce cadre, une nouvelle exploitation des modèles développés pour le L-PBF a été proposée, portant sur les superalliages base nickel Inconel (In718 \ In738) et l’alliage de titane Ti6Al4V. Le modèle a été enrichi ainsi, à travers une étude fine des

problématiques d'interaction laser/matière, et la modélisation des forces de vaporisation amenant à l'éjection de matière à haute température. Ces travaux ont, ensuite, permis de simuler la construction de structures plus importantes, associant plusieurs cordons déposés consécutivement, pour former des couches de matière (*draps, voiles*), superposées ensuite pour former des structures 'lattices'.

Enfin, nous avons également bénéficié, en 2017, d'un financement de l'ANR pour développer un projet de recherche, nommé MACCADAM (2018-2022, ANR-17-CE08-0052, 710 k€) [MAC17], portant sur la maîtrise des procédés de fabrication additive par dépôt de fil fondu à l'arc électrique (Wire + Arc Additive Manufacturing – WAAM), porté par l'Université de Montpellier. J'ai, également, été le responsable du WP5 de ce projet, portant sur la *Modélisation et la Simulation du Procédé*. Ce projet a débuté en 2018 au CEMEF par le recrutement en doctorat de L. Ravix dont j'ai coencadré l'activité [Rav22]. Le procédé WAAM, proche des procédés de soudage avec apport de matière, a été modélisé à deux échelles de construction intéressantes, méso- et macro-, à travers des approches spécifiques. Ces dernières ont permis d'étudier, autant le dépôt de matière et les évolutions du bain, que la construction générale de pièces d'intérêt en parallèle de leur comportement thermo-mécanique.

En complément, une activité plus récente a été développée, en collaboration avec le CETIM (Centre technique des industries mécaniques) dans le cadre de la plateforme collaborative AFH [AFH23]. Ce projet, encadré par Ch. A. Gandin et O. Senninger, a porté sur la maîtrise des évolutions microstructurales en procédé L-PBF appliqué aux alliages Inconel In718. Il visait, notamment, à développer l'usage de ce procédé pour des applications aéronautiques. En effet, la nuance In718 est habituellement mise en forme par fonderie – pouvant amener à la formation de défauts – ou usinage – conduisant à des pertes de matière marquées. Ces procédés limitent les géométries finales accessibles, démontrant, par là même, l'intérêt d'exploiter le procédé L-PBF. Cependant, les propriétés finales des pièces réalisées sont, alors, fortement influencées par les microstructures formées, montrant que ces dernières doivent être contrôlées, et leur développement maîtrisé. Dans cette idée, le doctorat CIFRE réalisé par T. Camus [Cam23a] avec le CETIM, a eu pour objectif de prédire les microstructures formées en procédé L-PBF sur l'alliage In718, à différentes échelles, en développant une approche CAFE (Cellular Automaton – Finite Element) originale, basée sur le transport des champs de température et de distance, en résolution Level Set [Cam23b].

L'objectif de ce chapitre est, plus spécifiquement, de revenir sur les activités développées autour de la modélisation thermo-mécanique des procédés de fabrication additive, en restreignant volontairement le propos au seul procédé L-PBF. Une rapide présentation du procédé sera, ainsi, proposée en préambule, rappelant les connaissances sur la physique des phénomènes impliqués. Nous détaillerons, ensuite, l'activité de recherche réalisée durant les doctorats de Q. Chen, A. Queva et T. Camus et quelques résultats marquants obtenus. Nous montrerons, ainsi, nos contributions à cette thématique, au regard des problématiques de maîtrise du procédé. Enfin, un bilan sera réalisé, et des perspectives esquissées, notamment en considérant les nouvelles activités débutées, en lien avec les procédés de fabrication additive.

5.2 Activité de recherche

i. Fabrication Additive sur lit de poudre – Description du procédé

Le procédé L-PBF se caractérise par la fusion localisée d'un lit de poudre fine par l'intermédiaire d'un laser focalisé dont le parcours est guidé par les mouvements rapides d'un miroir déflecteur (Fig. 5.3 a). La vitesse de lasage en procédé L-PBF évolue ainsi de quelques dizaines de centimètres à plusieurs mètres par seconde, selon la puissance du laser et la nature des matériaux fondus. L'épaisseur de poudre reste limitée à quelques dizaines de micromètres ($\sim 20\text{ }\mu\text{m}$ à $100\text{ }\mu\text{m}$ [Gu12]) avec une porosité de l'ordre de 40 à 60 % [Gus09], dépendant de la poudre utilisée et de son tassement. La taille des grains de poudres, proche de $10\text{ }\mu\text{m}$, peut également présenter des distributions optimisées. Un bain liquide élargi se développe rapidement lors de l'étape de fusion et, lors du processus de refroidissement, un cordon solide se forme, de manière jointive par rapport aux précédents dépôts. Après réalisation d'une couche, le plateau est abaissé et recouvert, de manière automatisée, de poudre provenant du bac d'alimentation. L'utilisation d'un racleur permet d'uniformiser l'épaisseur de cette couche. L'ensemble du procédé est réalisé dans une enceinte fermée, sous atmosphère protectrice, généralement d'argon, afin de limiter les risques d'oxydation du métal liquide. Les caractéristiques du laser (puissance, flux, dimension, ...), les paramètres procédés (vitesse de lasage, distance entre cordons, ...) et les propriétés du lit de poudre (épaisseur, granulométrie, porosité, composition, ...) influencent la qualité finale du dépôt de matière.

La figure 5.3 b) montre, à titre d'illustration, les géométries complexes réalisables en procédé L-PBF. Il faut noter que le coût élevé des poudres et des équipements, ainsi que le temps de fabrication important, contraignent les procédés L-PBF à la réalisation de pièces de hautes valeurs ajoutées, de géométries complexes (*e.g. optimisation topologique*) ou unique (*e.g. prothèses médicales*) (Fig. 5.2). Sur ce point, on doit noter des initiatives notables récentes tendant à 'démocratiser' le procédé, afin de poursuivre sa diffusion industrielle [IF16]. Ce procédé intéresse actuellement, en premier lieu, les domaines de haute technologie (aéronautique, spatial, énergie, naval ...), le domaine médical (implants, éléments dentaires, prothèses, ...) [Li12b, Cho22] ou encore celui de la bijouterie dans lesquels les applications se révèlent très diverses [Pr18]. Yan [Yan18] considère cependant que la qualité des produits actuellement réalisés par les différents procédés FA laser, dont les procédés L-PBF, n'atteint pas encore, trop souvent, le niveau attendu par les milieux industriels, ce qui obère le développement futur de ces procédés. Matthews [Mat16] développe une analyse similaire par comparaison aux qualités accessibles par des procédés plus 'traditionnels'. Il cite, en particulier, la formation des porosités dans le mode 'keyhole' du laser, la fusion incomplète des poudres, le développement des contraintes résiduelles, la formation de phases hors équilibres et la rugosité interfaciale des pièces comme des causes évidentes de dégradation des propriétés d'usage, notamment mécaniques.

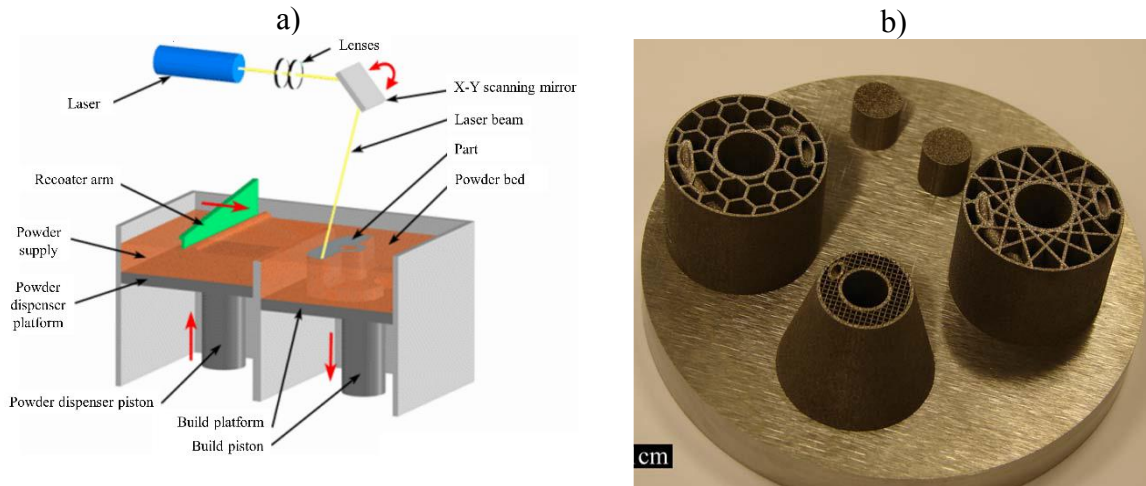


Fig. 5.3 : a) Présentation du fonctionnement du procédé L-PBF avec les plateformes associées à la formation de la pièce (piston descendant) et à l'alimentation en poudre (plateforme montante) [CP18]. b) Pièces réalisées en procédé L-PBF illustrant les géométries complexes, à parois minces, pouvant être développées [Gus09].

Les processus physiques associés au développement du cordon sont complexes et fortement couplés. La figure 5.4 a) illustre les phénomènes à l'œuvre durant la formation du cordon de matière, lors de la fusion du lit de poudre déposé. Ainsi, ce lit est rapidement fondu par la source. Celle-ci peut être de type Nd:YAG¹, Yb:YAG² ou encore CO₂. Les premières sources ont des longueurs d'onde plus réduites (1,064 μm et 1,070 μm respectivement) comparativement au laser CO₂ (10,6 μm), les rendant plus aptes à fondre les matériaux métalliques [Yap15]. De plus, la pénétration des lasers CO₂ est plus limitée, et ils restent techniquement plus complexes à contrôler. L'évolution technologique tend ainsi vers l'utilisation des lasers Yb:YAG qui présentent une plus grande bande d'absorption, une durée de vie élargie et un échauffement limité comparé aux sources Nd:YAG [Yap15].

Le diamètre de laser est de l'ordre de quelques dizaines à plusieurs dizaines de micromètres. Cependant, les matériaux céramiques restent transparents aux rayonnements des lasers YAG, ce qui nécessite leur dopage pour permettre une interaction laser/matière conséquente et une absorption dans l'épaisseur du lit de poudre (Fig. 5.4 b), comme on le rappellera dans le cadre de la présentation des résultats de CEFALE. Il apparaît, ainsi, nécessaire de maîtriser cette absorption du matériau au rayonnement laser pour contrôler le procédé. De plus, on doit noter que, en procédé L-PBF, le laser peut être utilisé en mode continu ou pulsé, ce qui influence les évolutions du bain liquide formé. Ainsi, dans le mode pulsé, le bain subit des processus de contraction et d'expansion durant la période du pulse, amenant également à des évolutions thermiques associées, comparativement à l'utilisation d'un laser non pulsé [Li17]. Des résultats bénéfiques ont aussi été observés avec un meilleur contrôle de l'apport d'énergie et des microstructures plus fines [Cho15]. Le rayonnement laser pénètre la matière en volume, sur une profondeur dépendant des coefficients d'absorption locaux des domaines rencontrés (poudre, substrat, métal liquide). Dans la poudre, l'absorption est réalisée sur une profondeur de l'ordre de plusieurs tailles de particules [Gus09] en raison des multi-réflexions, qui tendent également à élargir le domaine d'interaction laser, au-delà de son rayon initial. Cependant, l'interaction du laser avec le lit de poudre et le bain liquide reste une

¹ 'neodymium-doped yttrium aluminium garnet' ou grenat d'yttrium-aluminium dopé au néodyme ($\text{Nd}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$)

² 'ytterbium-doped yttrium aluminum garnet' ou grenat d'yttrium-aluminium dopé à l'ytterbium ($\text{Yb}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$)

thématique complexe à analyser, incomplètement comprise [Yan18], thématique dans lequel se sont également insérés les travaux de Queva [Que21] et Mayi [May21a]. Cependant, les observations en synchrotron apportent, plus récemment, une compréhension plus complète et fine de la physique des phénomènes, des étapes du processus de fusion et de l'évolution du bain [Cun19]. En particulier, ces équipements permettent de différencier les conditions conduisant à l'évolution du mode conductif (*bain fin circulaire*) au mode keyhole (*bain profond étroit*), et de valider, en complément, les modèles proposés pour estimer la géométrie des bains. Le développement d'outils de simulations à l'échelle micro-, méso- ou macroscopique, est, de même, une aide précieuse pour améliorer la compréhension des évolutions des systèmes étudiés. Il faut, cependant, noter que les phénomènes physiques investigués, et les objectifs visés par ces outils, sont différents selon les échelles d'application. Ces outils numériques sont aussi d'intérêt dans le cadre de la maîtrise du procédé et la recherche des conditions de travail industrielles optimales, associés à des puissances et vitesses de fabrication accrues. Les travaux développés dans notre équipe, autour de la modélisation numérique des procédés FA, se sont ainsi inscrits dans le cadre de ces objectifs généraux auxquels nous avons tenté de répondre.

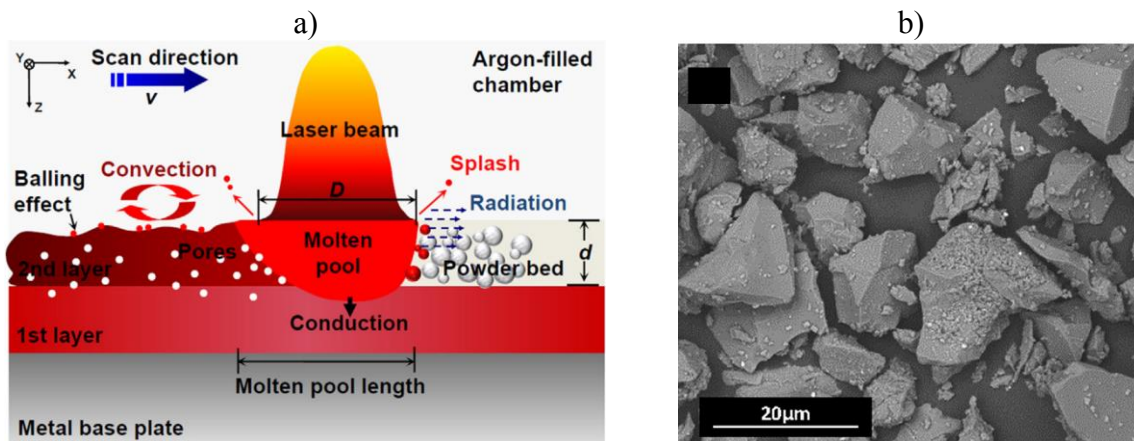


Fig. 5.4 : a) Schéma de la formation du cordon de matière en procédé L-PBF et des phénomènes physiques complexes développés [Yan18]. b) Imagerie MEB d'une poudre alumine Al_2O_3 dopée avec des particules β -SiC à hauteur de 1 % pds, visible sous la forme des dépôts dispersés en surface des grains [Mon18].

ii. Initiation des activités de modélisation – Projet CEFALÉ

Comme indiqué précédemment, le projet CEFALÉ a été proposé dans le cadre d'un appel CARNOT M.I.N.E.S. Ce projet, réalisé entre le CEMEF, le CMAT, et le SMS (centre des Sciences des Matériaux et des Structures, ENSM-St Etienne) visait à développer l'application des technologies L-PBF aux matériaux céramiques réfractaires, en particulier les alliages alumine-zircone ($Al_2O_3 - ZrO_2$). Il ambitionnait de proposer la fabrication de pièces tenaces à microstructure et santé métallurgique contrôlées par la maîtrise des différents maillons de la chaîne de réalisation (élaboration des poudres, modélisation du procédé et mise en forme par fusion laser). En effet, bien que les procédés L-PBF aient été largement étudiés dans le cadre des matériaux métalliques, peu d'études ont été consacrées aux céramiques, malgré leur résistance mécanique à hautes températures, qui pourrait permettre, par exemple, la fabrication d'aubes de turbine de nouvelle génération [CMA17]. Ils restent cependant difficiles à mettre en œuvre par L-PBF, en raison d'une absorption au rayonnement laser YAG réduite, et d'une faible

résistance aux chocs thermiques³. Le projet CEFALÉ visait, en conséquence, à maîtriser la fabrication L-PBF des matériaux céramiques alumine-zircone dans le cadre de futures applications aéronautiques. Deux projets de doctorat ont été réalisés, l'un basé au CEMEF, pour les développements numériques (Q. Chen) [Che18b], l'autre au CMAT pour l'analyse des conditions de réalisations de dépôts Al_2O_3 (L. Moniz) [Mon20]. Une collaboration étroite a été développée entre les activités aboutissant à des communications communes [Mon19, Che19].

- Bilan de conservation – énergie

La modélisation du procédé L-PBF réalisée par Chen s'appuie sur les travaux de Desmaison qui a mis en place une méthode de suivi par approche Level-Set (LS) du dépôt d'un cordon de matière dans le procédé de soudage hybride arc-laser (projet SISHYFE) [Des12, Des13, Des14], comme cela a été détaillé dans le chapitre précédent. Cette méthode a permis de suivre les évolutions thermomécaniques de pièces métalliques, par résolution EF (éléments finis), dans le cadre de soudages réalisés en chanfrein étroit. Cette approche de résolution a été étendue et améliorée par Chen, pour s'intéresser au développement de cordons céramiques en procédé L-PBF, en suivant les évolutions thermiques et mécaniques (*fluide et solide*) de la pièce. Les avantages de cette méthode LS sont également visibles dans ce cadre, où la simulation est enrichie par l'existence d'un domaine – supplémentaire – de poudre. Cette méthode conduit à exploiter un maillage unique, de frontière fixe, dans lequel est définie la fonction distance, ψ , par rapport à l'interface métal-gaz (Fig. 5.5 a), évitant la gestion d'un maillage conforme lié à la seule matière déposée et les difficultés numériques associées. Cette approche doit permettre également une gestion facilitée des contacts matière – matière pour la réalisation de structures multicordons. Il faut noter que la méthode LS est facilement mise en œuvre, les difficultés étant, cependant, de conserver un maillage correct, à même de suivre l'interface et son évolution temporelle. Dans le cadre d'application proposé, la figure 5.5 a) présente le modèle développé et schématise les différents milieux rencontrés.

La fonction distance, ψ , est ainsi exploitée, similairement aux équations de Desmaison pour (Eq. 1 de [Des14]) la définition de la fonction Heaviside, $H(\psi)$, et (Eq. 2 de [Des14]) pour la définition des propriétés moyennées $\{\chi\}$ entre les domaines matières et gaz. Le transport de cette fonction distance est réalisé comme montré à l'équation (3) de [Che17b], après résolution des équations de conservation de mouvement donnant la vitesse de transport, $\mathbf{u}^{ls}$. L'originalité de l'approche '*continue*' proposée, dans le cadre de notre modélisation mésoscopique, est d'assimiler le lit de poudre, à un milieu homogène, bien que cette approximation reste relativement discutable au regard des tailles de particules ($\sim 15 \mu\text{m}$) (Fig. 5.4 b) pour des lits de 30 à 50 μm d'épaisseur. Ce lit est fondu par l'intermédiaire du laser pour laisser place à un bain liquide, rapidement solidifié, sans porosité résiduelle. La source de chaleur laser, considérée gaussienne, permet la fusion de la poudre, le rayonnement diffusant à travers le volume, dans l'approche de Chen [Che18b], au regard des absorptivités des milieux rencontrés. Les paragraphes suivants rappellent les points principaux du modèle.

³ Il faut cependant noter que l'absorption peut être corrigée par l'utilisation de dopants mélangés à la poudre, comme détaillé précédemment [Mon18, Mon20] en permettant le transfert de chaleur du dopant aux particules céramique. La faible résistance aux chocs thermiques, et le risque de fissuration associé, peuvent être maîtrisés par un travail de préchauffage de la pièce, à haute température, juste en dessous de la température de fusion, ce qui permet d'éliminer largement ce risque d'apparition de fissures, comme démontré par Hagedorn [Hag10].

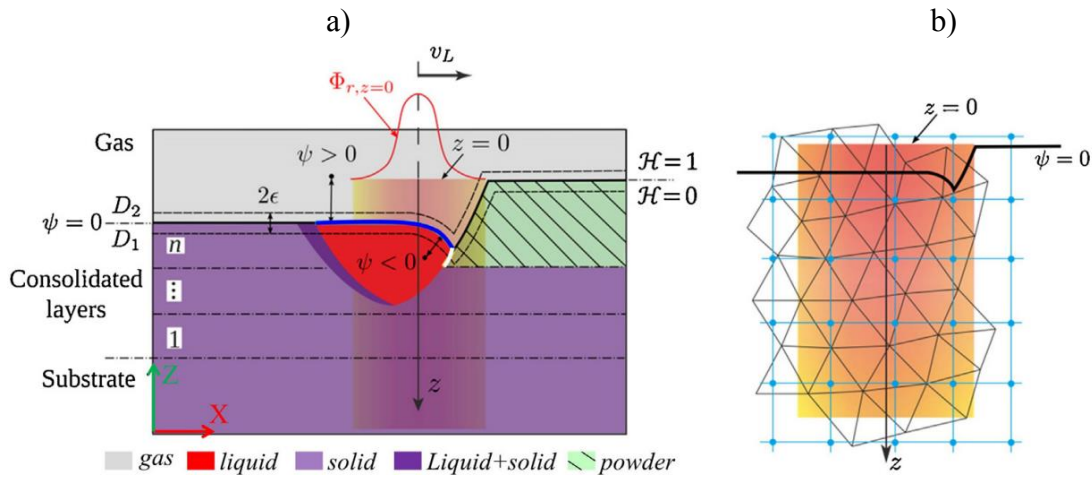


Fig. 5.5 : a) Modèle mis en œuvre pour la simulation du procédé L-PBF, avec les domaines suivis, dans le cadre d'une approche LS. L'isovaleur $\psi = 0$ représente l'interface gaz-matière. b) Implémentation numérique de la source de chaleur volumique avec le transport d'information entre le maillage adaptatif (noir) exploité dans la résolution EF et le maillage régulier (bleu) destiné au calcul de l'intégrale de parcours de l'absorption [Che17b].

- Bilan de conservation – énergie

Différentes équations de conservation sont posées en approche LS pour suivre le développement du cordon. Dans le cadre du suivi thermo-mécanique du procédé, une première résolution est celle associée à la conservation de l'énergie en formulation enthalpie :

$$\frac{\partial \{\rho h\}}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho h \mathbf{u}\} - \nabla \cdot \{\lambda \nabla T\} = \{q_L\} - \{q_r\} \quad (5.1)$$

avec h l'enthalpie massique locale, ρ la masse volumique, λ la conductivité thermique et $\mathbf{u}$ le champ de vitesse locale, déduit de la résolution mécanique des fluides. Les enthalpie et masse volumique des phases impliquées dans la détermination de $\{\rho h\}$ sont définies par l'utilisation de tabulations déduites de calculs thermodynamiques, basés sur l'outil Thermo-Calc, comme cela sera explicité dans le prochain chapitre [Phy24] ou en reprenant des données de la littérature. Ces tabulations sont données de manière explicite dans les scripts de calcul. Il faut noter que la résolution en température, T , proposée ici, de l'équation dans sa formulation enthalpique, s'appuie sur les travaux de Saad [Saa15]. Elle permet de déterminer un champ de température solution, dans une résolution non linéaire, le champ enthalpique étant redéfini à chaque itération par l'exploitation des tabulations précitées. Ainsi, bien que T soit solution, les températures, masses volumiques et enthalpies restent cohérentes en sortie de solveur, en particulier dans le cadre de la description choisie, en zone, structure et phase, rappelée en Section 3.1 de [Che17b].

Deux termes interviennent dans le bilan énergétique (Eq 5.1), le premier associé à la source de chaleur laser, $\{q_L\}$, et le second aux pertes par radiation et transfert thermique, $\{q_r\}$. Les matériaux céramiques présentant une transparence au rayonnement laser, il est admis que le rayonnement laser diffuse dans le matériau (poudre, liquide, solide ...). Ainsi, une source volumique a été définie (Fig. 5.5 b) pour $\{q_L\}$ associée à l'atténuation progressive du flux du rayonnement laser, ϕ , dans la matière donnée par l'équation de Beer-Lambert [Che17b] :

$$\frac{\partial \ln(\phi)}{\partial z} = -\alpha \quad (5.2)$$

Le rayonnement est propagé dans la direction z descendante (Fig. 5.5 b), α représentant le coefficient d'absorption du matériau, fonction des phases présentes. La valeur locale du flux de chaleur volumique est donnée, après intégration de (5.2), par l'équation (6) de [Che17b] soit :

$$\{q_L\} = \phi_{z=0} \alpha \exp\left(-\int_0^z \alpha dl\right) \quad (5.3)$$

où le flux de chaleur surfacique, $\phi_{z=0}$, est fonction de la géométrie de la source employée, de sa puissance, P_L , de son rayon, R_L , et du coefficient de réflexion surfacique, R . Pour une source gaussienne, on aboutit à l'expression radiale proposée dans l'équation (7) de [Che17b] :

$$\phi_{z=0}(r) = (1 - R) \frac{2 P_L}{\pi R_L^2} \exp\left(-2 \frac{r^2}{R_L^2}\right) \quad (5.4)$$

Comme on le voit, la détermination du terme source volumique, dans le cadre d'une résolution EF, dépend du calcul de l'intégrale de parcours du rayonnement laser dans la matière (Eq. 5.3), et des valeurs α rencontrées. Cette intégrale ne peut être déterminée aisément en EF, en raison du caractère non structuré du maillage. Il apparaît bien plus simple (cf. Fig. 5.5 b), d'en faire le calcul sur une grille régulière (grille bleue), après y avoir transporté le champ $\{\alpha\}$, depuis le maillage de résolution EF (grille noire). Dans cette grille, l'intégration est réalisée aisément par une méthode des trapèzes avant que le champ ne soit réinterpolé sur le maillage EF. Cette approche a également fait l'objet de validations au regard de solutions analytiques par Chen (voir Fig. 2.17 et Fig. 2.18 en section 2.6.2 [Che18b]) lors de son développement dans la Cimlib.

Les termes de pertes, $\{q_r\}$, sont essentiellement associés au rayonnement surfacique de la matière, dans ce modèle préliminaire proposé par Chen. L'approche LS ne permet pas, cependant, de les appliquer directement sur l'interface, celle-ci n'étant pas définie explicitement. Ainsi, l'approche CSF (Continuum Surface Force) de Brackbill [Bra91] est exploitée, comme dans l'étude des procédés de soudage, aboutissant à :

$$\{q_r\} = \delta \varepsilon_r \sigma (T^4 - T_0^4) \quad (5.5)$$

où δ est la fonction de Dirac, dérivée de la fonction Heaviside lissée et ε_r est l'émissivité locale (poudre, liquide ou solide). Il est cependant à noter que ce terme reste modéré au regard du flux de chaleur diffusé dans le substrat par simple conduction.

- Bilan de conservation – quantité de mouvement

Dans la modélisation du procédé L-PBF, il n'est pas considéré, ici, que des porosités internes puissent persister, la poudre étant entièrement fondue et le gaz n'étant pas piégé. Ainsi, la compaction du lit est liée à la seule fusion de la poudre, ce qui est modélisé par l'augmentation rapide et continue de la densité apparente locale, partant du matériau 'poudre' poreux (~50% de taux de porosité) pour aboutir à un matériau compact. La vitesse de retrait et celle des écoulements du bain et du gaz sont obtenus en formulation LS par la résolution de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, écrite avec l'approche de Boussinesq [Che17b] :

$$\{\rho\} \left(\frac{\partial \{\mathbf{u}\}}{\partial t} + (\{\mathbf{u}\} \cdot \nabla) \{\mathbf{u}\} \right) - \nabla \cdot \{\boldsymbol{\sigma}\} = \{\mathbf{f}_s\} + \{\rho\} \mathbf{g} \quad (5.6)$$

où $\{\mathbf{u}\}$ est le champ de vitesse. $\{\mathbf{f}_s\}$ représente la force de tension de surface et $\{\rho\} \mathbf{g}$ le terme de gravité. Le modèle a été enrichi, par la suite, par le terme de force de Marangoni, $\{\mathbf{f}_m\}$, par Chen [Che18a]. Pour le tenseur des contraintes locales, $\{\boldsymbol{\sigma}\}$, une loi de comportement newtonienne compressible est utilisée pour s'adapter au comportement de la poudre :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s} - p \mathbf{I} \quad \text{avec} \quad \mathbf{s} = 2\mu \left(\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \frac{1}{3} \text{Tr}(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}) \mathbf{I} \right) \quad \text{et} \quad \text{Tr}(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}) = \nabla \cdot \{\mathbf{u}\} \quad (5.7)$$

où p est la pression, μ la viscosité dynamique, $\mathbf{s}$ le tenseur déviatorique des contraintes et $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ le tenseur des vitesses de déformation. La divergence de la vitesse, $\nabla \cdot \{\mathbf{u}\}$, est déduite de la loi de conservation de la masse et de l'expression de la masse volumique des milieux, en relation également avec la température, T . La partie 2.2.3 (Mass Conservation) de [Che17b] présente ainsi la manière dont l'équation de conservation de la masse est établie, sur la base de la même équation considérée dans les deux milieux, et de la compressibilité du milieu poudre. Au final, l'équation (24) [Che17b] donne la valeur estimée du terme de retrait, $\nabla \cdot \{\mathbf{u}\}$, au regard des valeurs de densité locale rencontrées.

L'expression (5.6) mentionne le terme de tension de surface dans le bilan de conservation du moment, appliquée aux interfaces liquide/gaz. La force associée, $\{\mathbf{f}_s\} = \gamma \kappa \mathbf{n}$, est définie à travers la tension de surface, γ , et la courbure de la surface, κ . Cette force est appliquée dans la direction opposée à la normale sortante à l'interface $\mathbf{n}$, dans les domaines en contact avec le gaz ou la poudre. En particulier, Chen a proposé une nouvelle méthode de résolution en développant une expression implicite de ce terme dans la résolution EF, conduisant à une meilleure stabilité numérique, notamment pour les pas de temps larges. La méthodologie proposée est détaillée dans la section 2.2.2 de l'article de Chen [Che17b].

- Evolution matière

L'une des originalités de l'approche descriptive de Chen consiste, ainsi, à définir un matériau dont le comportement, complexe, peut être suivi progressivement à travers des étapes de *compaction*, pour la poudre, avec une transformation vers un matériau dense, et de *fusion/solidification* pour ce même matériau dense.

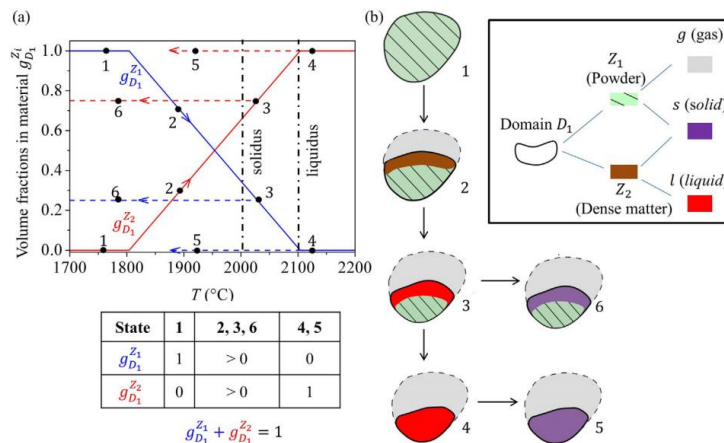


Fig. 5.6 : Transformation unidirectionnelle de poudre (zone Z_1) en matière dense (zone Z_2) avec (a) fractions volumiques des zones dans le domaine D_1 et (b) illustration de la répartition des zones et des phases en fonction de la température de chauffage maximale atteinte au cours de l'histoire thermique, (état 5) au-dessus et (état 6) au-dessous de la température de fusion de la matière dense [Che17b].

La figure 5.6 illustre, ainsi, la transformation en sens unique imposée à la poudre (zone Z_1), pour l'amener à un milieu dense (zone Z_2), selon l'histoire thermique locale. Il faut noter que l'application du modèle est réalisée pour le seul matériau alumine pur, sans existence d'un domaine pâteux. L'hypothèse est faite que la compaction de la poudre est totale à la température de fusion, $T_m = 2054\text{ °C}$, et débute, arbitrairement, 300 °C avant. Ainsi, cette compaction peut n'être que partielle, dans la situation où la température de fusion n'est pas atteinte (évolution 3 $\rightarrow$ 6), ou complète si cette température est atteinte, sinon dépassée (évolution 4 $\rightarrow$ 5).

- Présentation des résultats marquants

La figure 5.7 montre une capture de la simulation développée (bibliothèque Cimlib), sur la base du modèle développé par Chen, pour $P_L(1 - R) = 80\text{ W}$, $R_L = 35\text{ }\mu\text{m}$, $v_L = 0.2\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, en considérant une hauteur de poudre de $30\text{ }\mu\text{m}$. Le lasage est réalisé de manière unidirectionnelle. La forme du bain représentée, à $t = 2\text{ ms}$ est stable à ce temps. La capacité du maillage à s'adapter à la problématique posée est bien illustrée en Fig. 5.7 (a) montrant une bonne capture de l'interface gaz/matière et, également, la formation des gouttelettes liée à la fusion de la poudre à l'approche du laser, ces dernières alimentant progressivement le bain liquide. L'insert en Fig. 5.7 (e) montre les différentes étapes de formation des gouttes, qui, progressivement, par capillarité, alimentent ensuite le bain. Par là même, ces résultats sont une illustration des capacités du modèle EF à rendre compte, à l'échelle mésoscopique, de la physique des phénomènes en jeu. Le développement de ces gouttelettes est aussi en lien direct avec le choix fait des viscosités et tension de surface (Tab. 2 dans [Che17b]). Ces différents phénomènes sont correctement suivis grâce au développement d'un maillage adaptif (Fig. 5.7 a), évoluant selon l'estimateur d'erreurs proposé par Coupez [Cou11], régulièrement exploité dans nos différents travaux. Le nombre d'éléments est de l'ordre de $700\,000$, réduit au regard des développements plus récents, présentés par la suite. Le champ de température est visible en Fig. 5.7 (b) avec un gradient thermique de $\sim 3 \cdot 10^5\text{ K} \cdot \text{mm}^{-1}$ devant le front en construction.

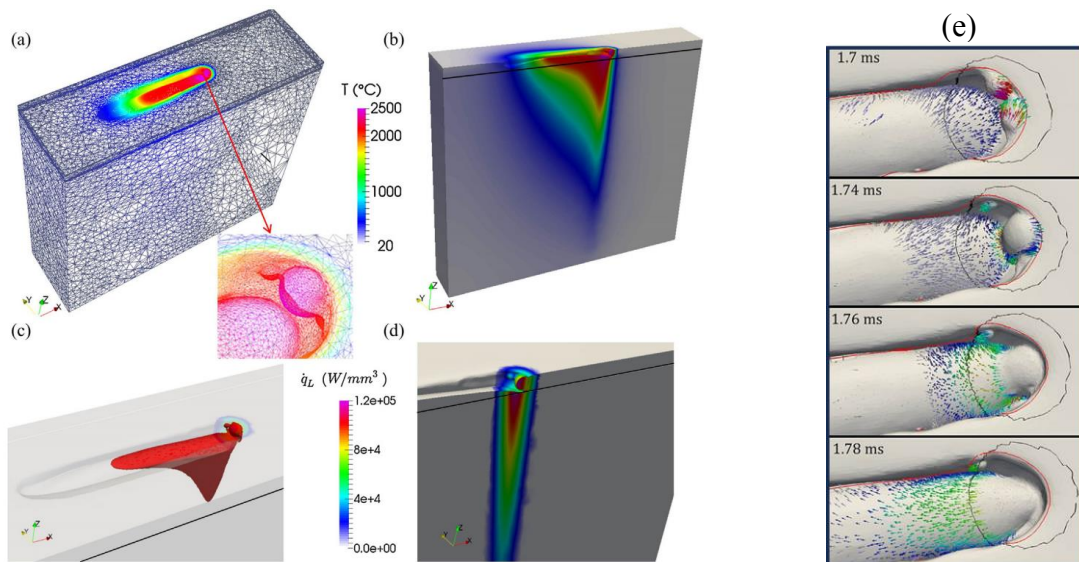


Fig. 5.7 : Instantané (cas de référence à $t = 2\text{ ms}$) illustrant (a,b) l'adaptation du maillage EF au voisinage de la surface du bain et le champ de température, (c-d) le bain de fusion, par transparence et la distribution de la source de chaleur volumique en coupe verticale. (e) Evolution de la formation des gouttes, au cours du temps, alimentant le bain. Le gaz est invisible et la ligne noire indique la limite poudre/substrat. Le volume du domaine total est de $1 \times 0.3 \times 1\text{ mm}^3$ [Che17b].

La forme du champ de température et du bain associé (Fig. 5.7 (b-c)) est caractéristique, liée à la faible absorption du rayonnement, conduisant à une forte pénétration de la source de chaleur volumique, $\{q_L\}$, largement supérieure à l'épaisseur du lit de poudre (5.7 d). L'interaction du laser avec la poudre reste importante en raison de ces coefficients d'absorption réduits. Le bain apparaît, ainsi, particulièrement profond et se prolonge avec une queue longue.

Le modèle proposé a, ensuite, été appliqué à la construction d'un nombre restreint de cordons, afin d'investiguer l'effet des conditions de scans. La figure 5.8 présente les évolutions thermiques observées pour des dépôts de cordons *unidirectionnels* ou *alternés*, reproduisant les conditions de constructions les plus simples des pièces industrielles. Le bain se développe progressivement lors de la première passe. Cependant, dans le cas #A, la seconde passe est réalisée au voisinage du début du premier cordon, dans un domaine solidifié, proche de la température ambiante. Dans la stratégie #B, la seconde passe se développe au voisinage d'un bain déjà formé et encore présent, amenant, comparativement, à un élargissement du bain ($t = 4.48$ ms) et à des températures plus élevées dans le domaine liquide et son environnement, ce qui aurait des conséquences microstructurales. Une fragmentation du bain apparaît ($t = 5.6$ ms) simultanément. De plus, on remarque une refusion partielle des cordons formés en lasage unidirectionnel (refusion du second cordon) amenant à des cordons élargis. À l'inverse, dans les stratégies alternées, la connexion a lieu en fin de cordons, lorsque l'accumulation de chaleur conduit à un bain de grande dimension, au moment du changement de direction.

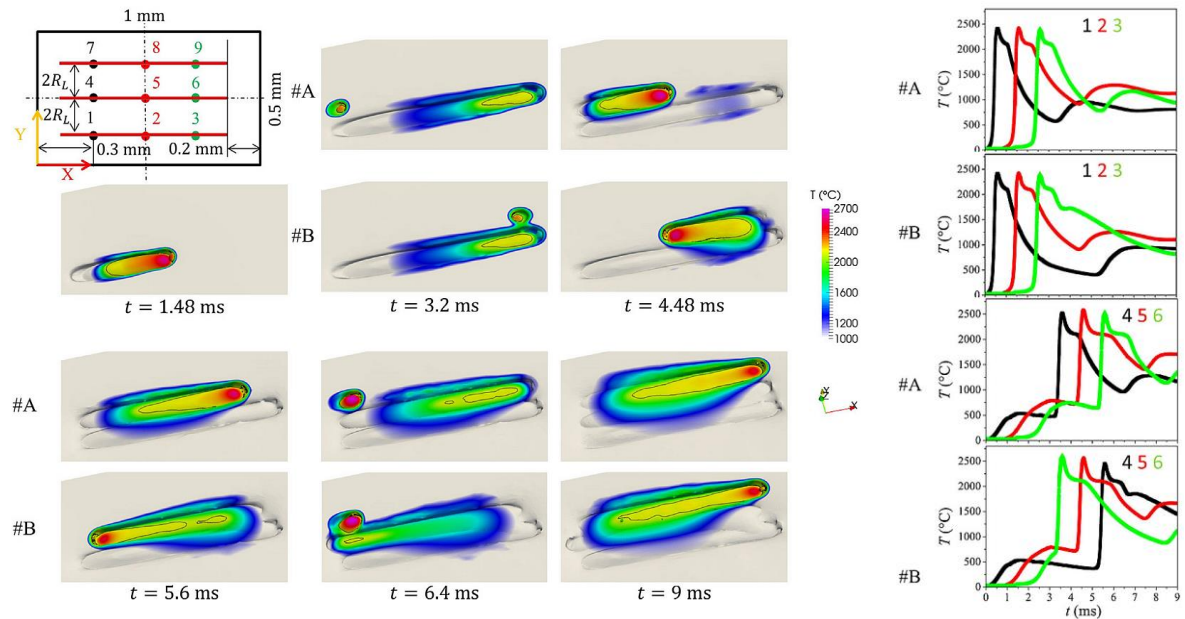


Fig. 5.8 : Champ de température durant les 3 lasages avec balayage (#A) unidirectionnel et (#B) alterné. Le contour noir représente le bain ($T > T_L$). La distance entre passes est $2 R_L = 70 \mu m$. Le domaine de simulation est de $1 \times 0.5 \times 1 \text{ mm}^3$. Les évolutions thermiques durant les deux premiers lasages, aux positions (1 – 6) indiquées par les capteurs, sont rapportées à droite [Che17b].

Les développements réalisés par Chen ont, comme mentionné, été appliqués, dans le cadre de son doctorat, à la prédiction des morphologies des cordons formés en fabrication additive L-PBF de poudres d'alumine, et à la recherche des conditions de formations de cordons de géométries optimales. En particulier, Chen s'est intéressé aux effets des conditions procédés sur l'évolution géométrique des cordons. L'objectif est ainsi de rechercher les paramétries

aboutissant à une refusion partielle des dépôts précédents, tout en limitant la formation de morphologies pénétrantes, de type keyhole, ces dernières étant associées à des problèmes de vaporisation marquée et la formation de porosités. Dans le cadre de CEFALE, des comparaisons des géométries numériques aux observations expérimentales ont, ainsi, été menées parallèlement, en bénéficiant des essais réalisés par Moniz da Silva Sancho [Mon20] au CMAT. La figure 5.9 a) [Mon19] illustre les comparaisons développées avec les données expérimentales obtenues au MEB. Le bain liquide devient, ainsi, plus large et profond quand la puissance laser augmente et la vitesse de lasage diminue. Des fissures sont également visibles entre le substrat compact et le bain. La concordance entre simulations et expériences montre que les prédictions réalisées, après calibration des coefficients d'absorption, α_l et α_s , et des rayons de source, r_{int} , sont très correctes, l'accord étant particulièrement bon dans le domaine intermédiaire. Ce travail de calibration mené par Chen et Moniz est précisément détaillé dans la section 4.1 de [Mon19] à travers la minimisation de la fonction d'erreur décrite dans l'équation (13). Les écarts sont plus visibles dans le domaine de faible puissance, où la morphologie s'éloigne de la forme de *clou* observée.

Par la suite, les possibilités offertes par le modèle dans la compréhension de l'origine des défauts en L-PBF ont été investiguées. Plus précisément, afin de mieux comprendre le développement de domaines solides isolés (*effet de balling*), une série de simulations ont été réalisées dans les conditions amenant à l'apparition de ces défauts (i.e. *forte vitesse de scan*) pour une puissance de laser constante. La figure 5.9 b) montre la formation de ces structures.

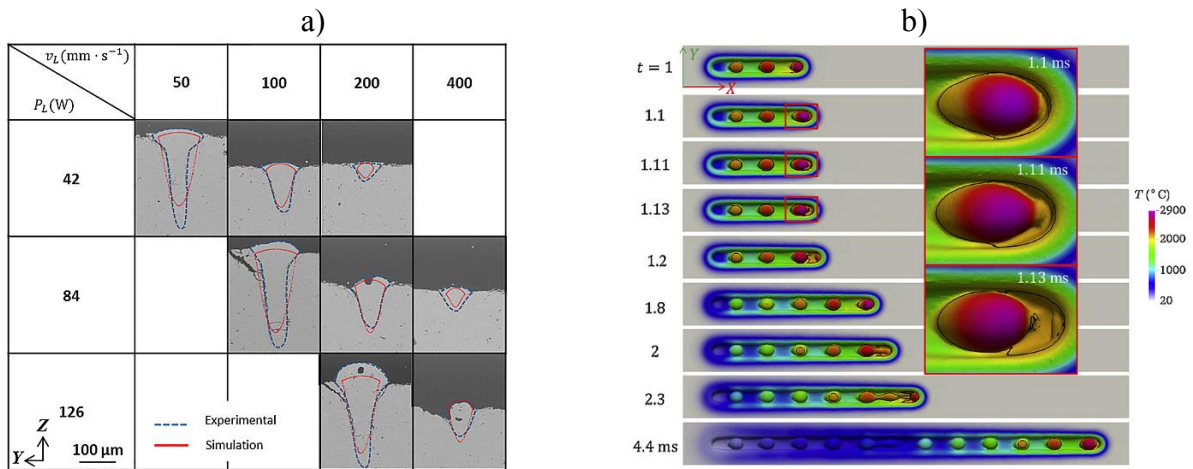


Fig. 5.9 : a) Coupes transverses des monocordons révélant les formes du bain dans différentes conditions procédés (P_L , v_L) (bleu – expérience vs. rouge – simulation). b) Répartition de la température à différents instants (condition $P_L = 84 \text{ W}$, $v_L = 600 \text{ mm.s}^{-1}$). Les contours noirs correspondent aux zones liquides [Mon19].

Ainsi, à $t = 1.1 \text{ ms}$, un bain allongé, en cours de construction est visible, tendant à s'amincir localement au temps $t = 1.11 \text{ ms}$ dans le domaine de contact avec la poudre. La diminution de contact entre le liquide et le substrat limite, également, les échanges thermiques et augmente la température du bain à $T = 2900 \text{ K}$, proche de la vaporisation. La zone amincie se rompt ensuite à $t = 1.13 \text{ ms}$ et le bain se rétracte sous l'effet de la tension de surface, formant un îlot de matière isolé, sans contact avec les domaines voisins. Par la suite, le processus se reproduit régulièrement et conduit à former des gouttelettes solidifiées isolées, avec la réalisation d'un cordon incohérent, impropre à la création d'une pièce. Ce défaut, relativement

commun [Gu07], est particulièrement bien mis en évidence dans cette simulation, et montre un point fort du modèle thermo-mécanique dans la capacité à le prédire et à décrire son origine.

iii. Application aux alliages métalliques – Projet SAFRAN

Les développements réalisés par Chen ont permis de poursuivre l'activité de modélisation des procédés de fabrication additive L-PBF en s'intéressant aux alliages métalliques d'intérêt aéronautique, en particulier les nuances Inconel In718 et In738, ainsi que les alliages de titane de nuance Ti6Al4V. En effet, un intérêt croissant est apparu pour la réalisation de pièces aéronautiques par l'exploitation des procédés de fabrication additive, en lien avec les avantages de ces procédés, tels que décrits précédemment. Ces nouveaux procédés permettent la fabrication de pièces de géométries variées, en recherchant les conditions de réalisation optimisant la masse, et offrent de nombreux avantages par rapport aux procédés conventionnels. Il est apparu naturel, dans le milieu aéronautique, de chercher à développer des équipements basés sur ces procédés, et en particulier le procédé L-PBF. Ces travaux ont été réalisés dans le cadre d'un projet commun porté par Safran Additive Manufacturing (SAMC) regroupant trois projets de doctorats menés en parallèle, dans différents laboratoires :

- L'*Institut de Mécanique et d'Ingénierie* (I2M) à Bordeaux, sur la compréhension des mécanismes d'écoulement des particules de poudre lors de son étalement, durant le procédé d'étalement, et la modélisation de la formation de ces lits lors du processus de raclage (logiciel GranOO) – Doctorat de K. Marchais [Mar21a]

- Le laboratoire *Procédés et Ingénierie en Mécanique et Matériaux* (PIMM) des Arts et Métiers ParisTech, sur la modélisation numérique multiphysique de l'interaction laser-matière à l'échelle mésoscopique, et le développement d'une compréhension fine des phénomènes d'échanges thermiques dans le lit de poudre et dans le bain de fusion (logiciel Comsol) – Doctorat de Mayi [May21a]

- Le Centre de Mise En Forme des Matériaux (CEMEF) de Mines Paris PSL sur le développement d'un modèle numérique multiphysique permettant une description des différents modes de transfert thermique lors de la construction de cordons L-PBF, destiné à la simulation du dépôt de matière, pour des échelles allant du tir statique à la fabrication de quelques couches superposées (bibliothèque Cimlib) – Doctorat de Queva [Que21]

Ces travaux ont été menés en parallèle à partir de l'automne 2017, par les doctorants cités, et ont donné lieu à des soutenances réalisées au cours de l'année 2021. Ils ont apporté une meilleure compréhension des processus physiques se déroulant lors du procédé L-PBF, en particulier à une échelle fine, associés à différentes étapes, allant de la construction du lit de poudre, aux transferts d'énergie laser – matière (*poudre et matériau dense*), au processus de vaporisation, aux écoulements liquides ou aux étapes de solidification. Particulièrement riche en résultats, ce projet a donné lieu à différents articles de la part des partenaires du projet, couvrant le large éventail des thématiques abordées [Que20, Gra21, May21b, Mar21b, May23]. Pour ma part, j'ai participé à l'encadrement du doctorat de Queva réalisé au CEMEF, et ai suivi les progrès réalisés dans la bibliothèque Cimlib visant à développer la modélisation mésoscopique du procédé L-PBF, en enrichissant les travaux de Chen, et en permettant la simulation du dépôt de structures multicordons.

- Modélisation des processus de vaporisation

La figure 5.10 illustre certains des phénomènes physiques les plus influents sur la réalisation d'un cordon en L-PBF, et en particulier sur sa qualité. Des processus de dénudation peuvent se développer à proximité du cordon, liés aux écoulements gazeux, ou à des effets de capillarité du liquide. Des observations fines, récentes, mettent ainsi particulièrement en évidence l'effet important de la dynamique des vapeurs métalliques ou du gaz de protection, autour du bain dans ce processus de dénudation, comme observé par Bidare *et al.* [Bid18]. Ces phénomènes restent, cependant, encore difficiles à considérer dans des modélisations réalisées aux échelles méso- ou macro-. À une échelle plus locale, cependant, la vaporisation du bain liquide, sous l'effet de la source laser focalisée, entraîne une force de recul importante, creusant le bain liquide et conduisant, dans les cas extrêmes à la formation d'un keyhole (Fig. 5.10), qui rend impropre la construction en raison de la formation de défauts, notamment de porosité.

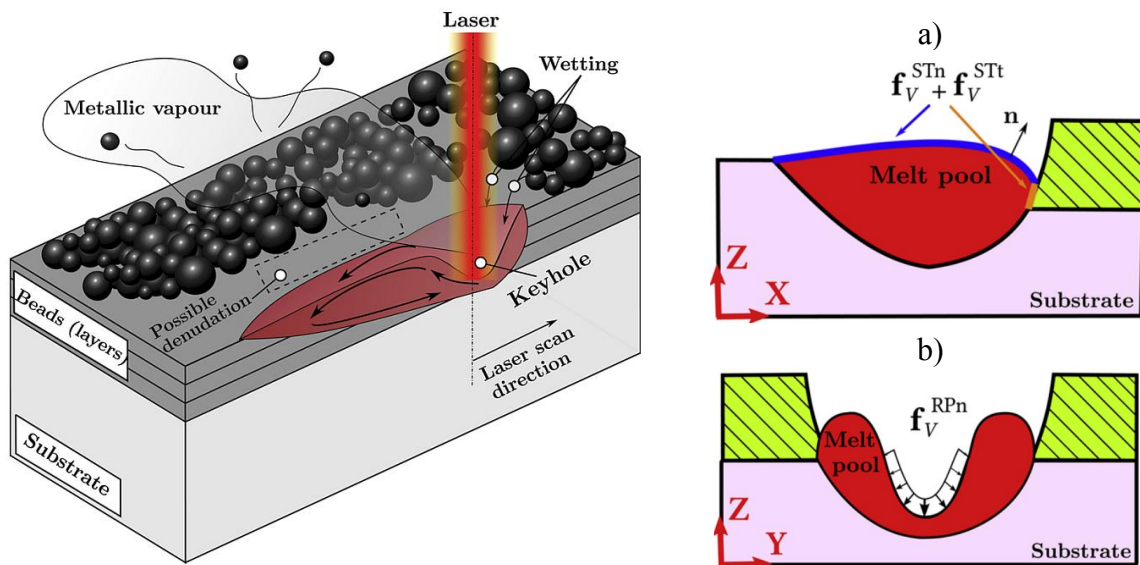


Fig. 5.10 : (gauche) Procédé L-PBF – Présentation des différents phénomènes physiques influents. (droit) a) Représentation des forces de tension de surface et de Marangoni appliquées simultanément aux interfaces liquide\gaz (ligne bleue) et liquide\poudre (ligne jaune). b) Répartition spatiale de la pression de recul induite par la vaporisation du liquide [Que20].

Queva a ainsi démontré, dans son travail, l'importance de considérer ce phénomène dans la modélisation multiphysique du procédé, l'approche LS étant appropriée dans la mesure où elle permet, aisément, d'introduire ce phénomène. La figure 5.10 a) présente les forces considérées par Queva guidant les écoulements dans le bain et modelant la forme finale du cordon. Ainsi, les termes f_v^{STn} et f_v^{STt} sont associés, respectivement, aux forces de tension et de Marangoni précédemment exposées. Ces forces sont appliquées à l'ensemble des interfaces entre liquide et gaz, et notamment le milieu poudre. Les équations (17-19) [Que20] indiquent précisément la construction de ces termes dans le bilan d'effort. En complément, un terme de vaporisation est considéré comme illustré en figure 5.10 b), contribuant autant à une perte d'énergie par vaporisation qu'à l'application d'un effort sur la surface supérieure du liquide. Le terme de perte d'énergie interfaciale se rajoute aux contributions présentées dans l'équation (5.1) et est précisé dans l'équation (5.8).

$$\{q_v\} = (1 - \beta_r) \sqrt{\frac{M}{2 \pi R T}} P_0 \exp\left(\frac{L_v M}{R T_v} \frac{T - T_v}{T}\right) \quad (5.8)$$

où β_r représente un coefficient de rétrodiffusion, M la masse molaire de l'alliage, R la constante universelle des gaz, P_0 la pression atmosphérique et L_v la chaleur latente de vaporisation par unité de masse. La valeur de T est la température locale au point considéré dans le maillage EF. De même, l'effort associé à cette vaporisation correspond à une force verticale dirigée vers le liquide, contribuant au creusement du bain. Elle se rajoute aux contributions mentionnées précédemment dans l'équation (5. 6) et est définie localement par :

$$f_V^{RPn} = -\frac{1+\beta_r}{2} P_0 \exp\left(\frac{L_v M}{R T_v} \frac{T - T_v}{T}\right) \delta \mathbf{n} \quad (5.9)$$

où δ représente la fonction de Dirac à l'interface liquide - gaz. Les figures 5.11 (a-d) illustrent ainsi les différentes étapes associées à un tir statique sur un alliage In718 avec prise en considération du processus de vaporisation, sur un temps de $t = 300 \mu s$. Par là même, cette simulation rappelle l'extrême brièveté des phénomènes physiques se déroulant en L-PBF lors des étapes successives de compaction / fusion / solidification, et la nécessité de les simuler sur des échelles de temps courtes avec des pas de temps réduits ($\Delta t \approx 1 \mu s$).

Les étapes visibles en figure 5.11 montrent successivement, a) la compaction du lit de poudre (porosité $\approx 50\%$) amenant à la diminution immédiate de la hauteur du lit avant d'atteindre une structure dense, b) la formation du bain liquide en partie inférieure au-delà du liquidus ($T > T_L = 1336 \text{ °C}$), c) Le bain s'étend ensuite, en raison de la fusion du lit de poudre et du substrat solide. Une sphéroïdisation du bain débute, sous l'effet de la tension de surface, les forces de Marangoni tendant au processus inverse ($\partial\gamma/\partial T \approx -1.1 \cdot 10^{-4} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ étant négatif) amenant le bain à s'étendre. Lorsque la température de surface dépasse la température de vaporisation à pression atmosphérique ($T > T_v = 2913 \text{ °C}$), la force de recul se manifeste et déforme le domaine liquide, creusant le bain, ce qui conduit à une pénétration plus marquée, notamment dans le cas de dépôts multipasses. Enfin, d) le bain se solidifie à l'arrêt du laser ($t = 300 \mu s$), et l'absence de pression de recul permet au bain de retrouver une forme sphéroïdale de hauteur importante, observée dans la construction de cordons lors du déplacement de la source. Les figures 5.11 (e-f) présentent les évolutions de morphologie du bain et du cordon, avec et sans considération de la force de recul, illustrant clairement son effet autant lors de la formation du bain que sur la géométrie finale du dépôt. Un creusement marqué est visible dans le premier cas, la pression de recul contrebalançant largement la tension de surface. Un effet, que l'on peut qualifier de 'piston', se manifeste, le liquide chassé par la cavité formée étant repoussé sur les pourtours du bain, devant et en arrière de ce dernier, conduisant à des vitesses d'écoulement importantes. La profondeur refondue devient plus grande. De plus, la forte vaporisation, et les écoulements conduisent à des gradients thermiques plus réduits et une température maximale de bain de près de 1000 °C plus faible. Les forces de Marangoni sont donc, également, plus réduites, et le bain de largeur plus étroite lorsque cette vaporisation est introduite, comparativement au second cas. Au bilan, après solidification, bien que les hauteurs apparentes soient similaires, les profondeurs refondues sont très différentes entre les deux situations, illustrant bien le grand intérêt d'enrichir la modélisation de l'interaction laser-matière en procédé L-PBF.

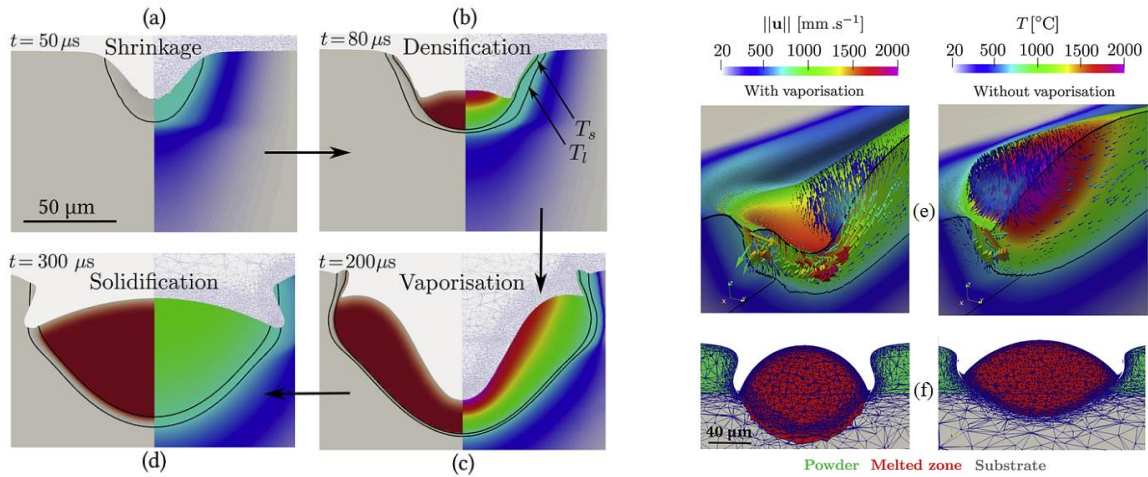


Fig. 5.11 : Simulation L-PBF sur alliage In718 ($P_L = 250 \text{ W}$, $r_L = 50 \mu\text{m}$, $h_p = 50 \mu\text{m}$) (gauche) Tir statique : Etapes successives rencontrées en lasage lors de l'interaction laser matière : (a) Densification de la poudre (b) Développement du bain liquide. (c) Vaporisation et effet de la pression de recul. (d) Arrêt du laser – début de solidification. (droite) Construction d'un monocordon ($v_L = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$) (e) Zoom sur le domaine d'interaction laser – matière avec (f) Coupe transversale montrant le domaine fondu. Deux situations sont considérées dans le modèle, avec et sans prise en compte du processus de vaporisation [Que20].

Le modèle thermohydraulique détaillé ici, et proposé par Queva, a ensuite été comparé aux développements réalisés au PIMM par Mayi [May21a], sous Comsol [Com23], en réponse à un benchmark présenté dans [May21b]. Cette comparaison des deux outils de simulation exploités et développés dans le projet collaboratif a été conduite dans le cadre des conclusions d'études menées par le NIST (American National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, Etats-Unis). Ce dernier développe régulièrement des essais instrumentés en fabrication additive, dans le but d'analyser la capacité actuelle des outils numériques de la littérature à prédire les résultats expérimentaux obtenus [Nis23a] et de valider les modèles. L'une des conclusions répétées est que les outils numériques présents ne semblent pas pouvoir prédire correctement les dimensions du bain liquide, à tout le moins avec une précision suffisante pour les besoins industriels et académiques. Ainsi, le benchmark numérique de Mayi et Queva, détaillé dans [May21b], était réalisé avec la volonté de proposer des cas tests 'minimal' de simulations L-PBF multiphysiques, avant d'aborder, par la suite, toute comparaison avec des données expérimentales de la littérature. L'objectif était de rechercher les limitations des deux modèles numériques construits concurremment et de discuter les points d'améliorations éventuels. En particulier, la méthodologie proposée par Mayi [May21a] pour simuler le procédé L-PBF se basait sur une description explicite de l'interface matière-gaz, en s'appuyant sur un maillage conforme associé à la matière, la suivant dans son mouvement. La résolution numérique proposée était de type ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian). Cette approche était donc foncièrement différente de l'approche LS décrite précédemment et exploitée par Queva, dans le cadre de laquelle l'interface matière – gaz est 'immergée' dans le maillage EF et définie par la fonction distance. Ainsi, ce type de benchmark a l'intérêt de permettre de voir les éventuelles limitations des deux approches et les voies d'amélioration possibles. L'une des conclusions de ce benchmark a, cependant, été que ces approches conduisent, dans les cas investigués d'un tir statique sur substrat et d'un tir sur lit de poudre, à retrouver des résultats extrêmement proches, tant en termes de dimension des zones fondues, que d'évolution thermique dans le bain, les tendances générales attendues étant également

observées. Les isocontours de température sont similaires, validant l'étape de résolution thermique et les modèles d'introduction d'énergie [May21a]. Les écarts sont sensiblement plus importants sur la prédiction des champs de vitesse, dus à l'utilisation d'une approche CSF (Continuum Surface Force) dans la résolution LS, mais restent néanmoins modérés. La conclusion générale de ce travail était que les approches numériques proposées étaient, toutes deux, particulièrement valables.

- Validations expérimentales

Les travaux développés par Queva, et validés dans les étapes précédemment détaillées, ont ensuite été confrontés à des observations expérimentales. Bien que plusieurs dépôts de cordons et de couches aient été réalisés par Safran Additive Manufacturing, et exploités par la suite, tel que détaillé par Queva dans son mémoire de doctorat [Que21], il a paru intéressant de pouvoir, également, s'appuyer sur d'autres données, extérieures au projet. En particulier, Grange, réalisait, parallèlement, sur la même période au CMAT un travail de doctorat [Gra20] portant sur la maîtrise du procédé L-PBF appliqué aux alliages Inconel In738 et René 77, et le risque de fissuration associé, notamment lié aux chemins de solidification suivis au cours du refroidissement. Les développements expérimentaux de Grange ont conduit à définir, préalablement, les conditions de réalisation optimales de structures monocordons, dans le cadre d'un plan d'expériences soigné, basé sur la recherche de puissances, P_L , et de vitesses laser, v_L , optimisées (Fig. 5.12 a) (*En aparté, on notera les différences importantes des paramètres procédés exploités ici avec ceux précédemment rapportés pour le travail réalisé sur l'alumine en Fig. 5.9*). Ce plan d'expériences a, ainsi, été exploité par Queva, pour valider ses développements numériques et son modèle de résolution thermohydraulique. De plus, il a permis, à travers une stratégie originale, de réaliser une estimation fine des rendements du procédé L-PBF, et en proposer une expression analytique, liée aux paramètres procédés.

Grange discute ainsi l'influence des conditions opératoires sur la morphologie du cordon, à la Fig. 2 et dans la section 2.2 de [Gra21]. Dans un domaine de puissance intermédiaire, $0.22 < E_l < 0.5 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-1}$, les cordons présentent une morphologie 'saine' associant une bonne pénétration avec un ratio H_{RZ}/H_{app} de 1 à 3 (voir insert Fig. 5.12 a pour la définition des termes). La refusion est suffisante pour éviter les manques de fusion, et permettre les 'réparations' en cas de défauts et l'accroche entre couches successives est importante. À l'inverse, pour de hautes densités d'énergie ($E_l > 0.5 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-1}$), les cordons ont une forme allongée et montrent un keyhole amenant au développement de porosités, rendant ainsi le cordon impropre. À faible puissance linéique ($E_l < 0.22 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-1}$), les cordons présentent une pénétration limitée et un angle de mouillage marqué, amenant aussi à des instabilités. Au bilan, seuls huit cordons, associés au domaine intermédiaire, apparaissent aptes à la réalisation de pièces et ont fait l'objet d'investigations par Queva et Grange [Gra20], notamment pour comparer les simulations aux observations telles que rapportées en Fig. 5.12 a).

Préalablement, une méthodologie a, ainsi, été mise en place conduisant à réaliser des simulations 'test' pour différentes valeurs d'absorptivité, $A = 1 - R$, en débutant à la valeur de $A = 0.3$ (surface plane [Tra17]). Les dimensions des zones fondues, S_{MP} , sont ensuite comparées aux mesures expérimentales de ces mêmes grandeurs (Fig. 5.12 b). Une évolution affine entre l'absorptivité et la mesure du terme S_{MP} est observée, permettant une calibration

aisée et une estimation pertinente de A (e.g. 0.72 dans le cas illustré). Ce travail a été reproduit pour les huit cas d'intérêt et conduit, ensuite, à travers les valeurs d'absorptivité estimées, aux résultats de simulations présentés en Fig. 5.12 a). La comparaison aux observations semble excellente, les morphologies et dimensions des bains apparaissant particulièrement bien prédites, pour une large gamme de valeurs E_l , bien que la calibration se soit basée sur la seule grandeur S_{MP} . À titre d'exemple, la figure 5.12 b) montre la comparaison de l'ensemble des hauteurs de zone refondue, H_{RZ} , entre simulations et expériences (écart maximum de 6.6 %), et démontre la capacité de l'approche proposée à retrouver les données expérimentales.

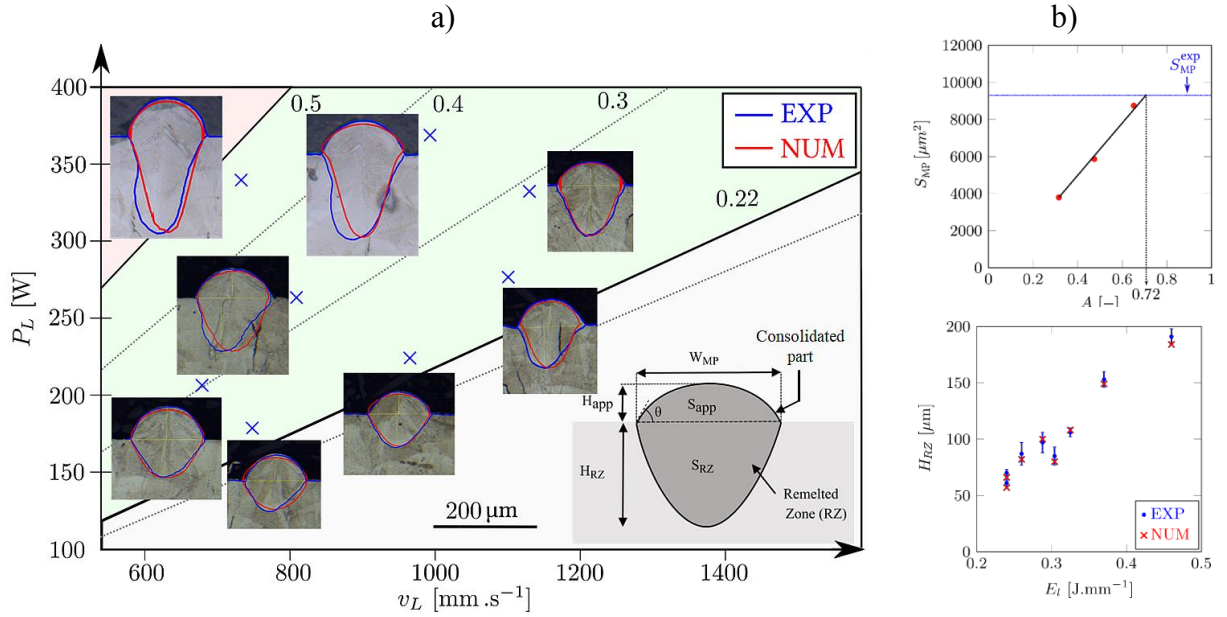


Fig. 5.12 : a) Comparaison entre résultats numériques et expérimentaux en construction de monocordons en In738 ($h_p = 55\mu m$). Les contours bleu et rouge représentent, en section transverse, les limites des zones fondues obtenues, respectivement, expérimentalement et numériquement. Les lignes pointillées sont des isovaleurs de puissance linéique déposée, $E_l = P_L/v_L$. L'insert présente les grandeurs caractérisant les dépôts. b) (haut) Méthodologie de calibration du terme d'absorptivité, A , pour $P_L = 230$ W et $v_L = 960$ mm.s⁻¹. (bas) évolution de la surface du bain $S_{MP} = S_{RZ} + S_{app}$, en fonction de l'énergie linéique, E_l , après calibration [Gra21].

Les valeurs élevées de coefficients d'absorptivité trouvées ($A \simeq 0.66 - 0.86$) s'expliquent par la formation d'un keyhole (cf. 5.11 e), dans lequel le rayonnement pénètre profondément et ne ressort qu'à la suite de multi-réflexions, comme illustré en Fig. 9 de [Gra21]. Le rayonnement est ainsi, pour une large part, absorbé, conduisant aux valeurs élevées du coefficient A estimées. Ces conclusions sont similaires à celles de Trapp *et al.* [Tra17] qui explique que les valeurs de A dépendent, en premier lieu, de la morphologie du cordon.

Les figures 5.13 a-b) illustrent les situations extrêmes observées pour la formation du cordon, pour les plus faibles et fortes valeurs d'énergie linéique E_l . Dans le premier cas, on observe un keyhole peu prononcé, et des écoulements réduits, l'effet 'piston' et les forces de Marangoni étant peu marquées. Dans le cadre d'une valeur élevée de E_l , le creusement apparaît, à l'inverse, particulièrement marqué, de près de trois fois la hauteur de poudre, et les écoulements sont notoirement violents, le liquide étant chassé sur les parois de la cavité. De même, un brassage actif du bain est visible sur une longueur importante.

À la suite de ces travaux, il est apparu intéressant à Grange et Queva d'analyser les évolutions du coefficient d'absorptivité au regard des paramètres procédés, et en particulier

l'énergie linéique, E_l . La figure 5.13 c) présentent ces évolutions, en complément de celles obtenues expérimentalement par Trapp *et al.* [Tra17] sur un acier 316L. Les données apparaissent mutuellement cohérentes, montrant – également – un profil d'évolution classique. Ce dernier débute par un mode d'absorption de la poudre seule ($A \simeq 0.6$), à travers les réflexions du rayonnement dans le lit, à un mode de conduction sur le film liquide ($A \simeq 0.3$) avant de voir se développer, progressivement, le mode keyhole. Dans ce dernier cas, le piégeage du rayonnement amène à une croissance de A avec l'augmentation de la puissance linéique. Mayi [May21a] (chapitre 1.3) apporte une discussion détaillée sur ces évolutions et leur origine physique à laquelle on pourra utilement se rapporter. Sur la base de cette évolution, Grange et Queva (section 4.2 de [Gra21]) proposent une estimation du coefficient d'absorptivité en relation avec les paramètres procédés, en reprenant de précédentes analyses. Ils aboutissent à l'expression suivante dont la comparaison avec l'expérience est rapportée en Fig. 5.13 d).

$$A = 0.95 \sqrt{P_L^{0.2} v_L^{-0.06} - 1.4} \quad (5.10)$$

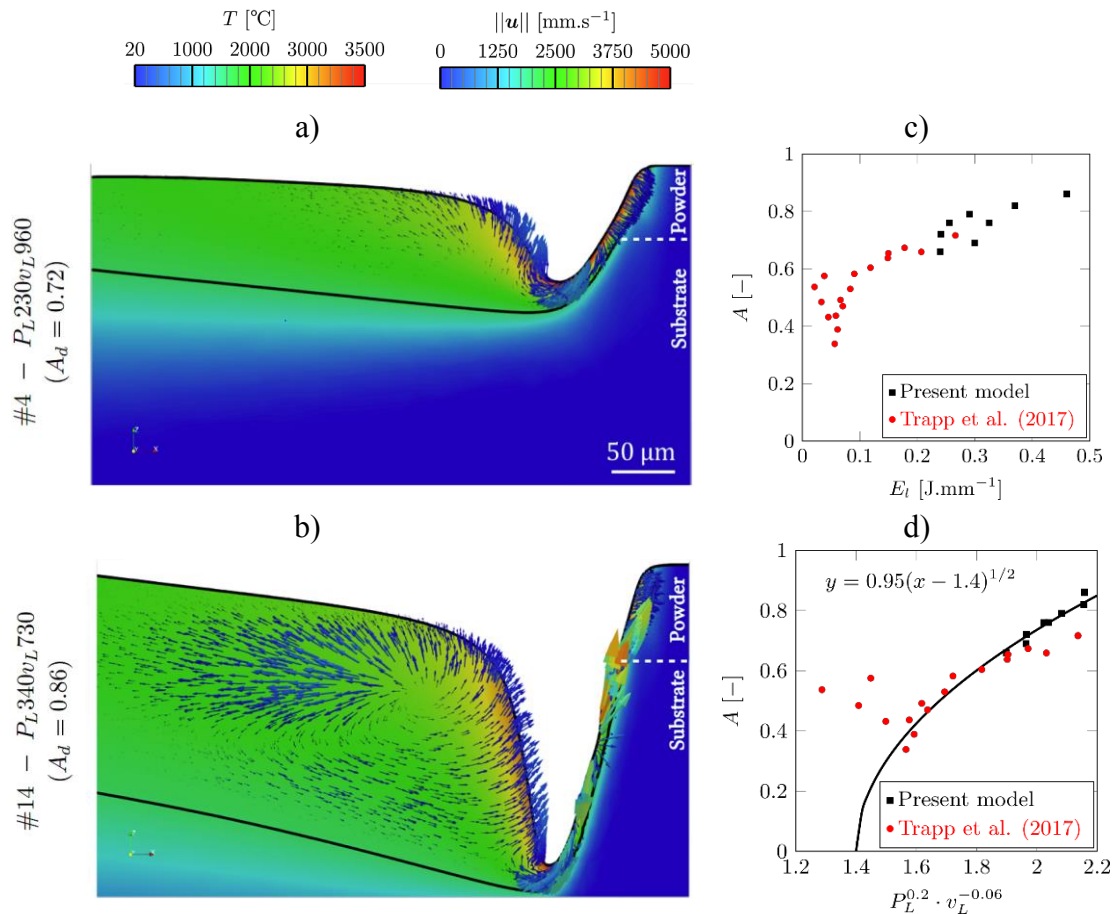


Fig. 5.13 : a-b) Comparaison entre simulations numériques et expériences sur des sections transverses pour les deux énergies linéiques extrêmes exploitées [Que21] ($P_L = 230 \text{ W}$, $v_L = 960 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$, $E_l = 0.24 \text{ W} \cdot \text{mm}^{-1}$ et $P_L = 340 \text{ W}$, $v_L = 730 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$, $E_l = 0.47 \text{ W} \cdot \text{mm}^{-1}$). c) Coefficients d'absorptivité, A , obtenus après étalonnage (points noirs) complétés des mesures expérimentales réalisées par Trapp [Tra17] sur un acier 316L (points rouges) [Gra21]. d) Calibration analytique proposée pour le coefficient d'absorptivité [Gra21].

Il est remarquable que cette expression simple retrouve l'intégralité de l'évolution attendue du coefficient A , dès la sortie du mode de conduction. De même, elle démontre la forte influence de la puissance laser, P_L , sur le coefficient d'absorptivité au regard de la vitesse v_L .

Les développements précédents ont ainsi démontré la capacité des outils numériques proposés à suivre le dépôt d'un cordon de matière. Ces travaux avaient été étendus au suivi du dépôt de structures multicordons jointifs (voir section 4.3 dans [Que20]) pour les alliages In718 et Ti6Al4V, permettant de montrer la formation de défauts éventuels, liés aux morphologies de cordons, en lien avec les distances interpasses. De manière plus intéressante, Queva a également développé, en fin de doctorat, et en conformité avec les objectifs initiaux du projet, des comparaisons sur des constructions plus 'ambitieuses' constituées de dépôts multicouches. L'objectif était également d'investiguer, dans ce cadre, la construction de 'structures lattices' offrant une masse réduite, et – en conséquence – une meilleure performance, notamment pour les applications aéronautiques visées par Safran. Ces structures sont constituées de réseaux très fins, associés à des dépôts de largeurs millimétriques, tels qu'illustrées en Fig. 5.2. Afin de réaliser une confrontation du modèle aux expériences, des constructions illustratrices de ces dépôts 'lattices' mais limitées à un faible nombre de couches ont été réalisées par Safran sur une machine M290 (EOS), dont on retrouvera le détail de la réalisation dans [Que21], avec les comparaisons expérimentales. La figure 5.14 a) illustre les possibilités offertes par le modèle, à travers la simulation de la construction de la troisième couche (*stratégie aller-retour*), montrant le développement progressif d'un bain de grande dimension, liée à la solidification ralentie des domaines liquides, et à l'augmentation progressive de la température du bain formé. Une augmentation du taux de recouvrement est également visible au fur et à mesure de la construction, la zone fondue couvrant la largeur de trois cordons. Le bain est entretenu et voit son volume croître par coalescence, continuellement, en cours de construction.

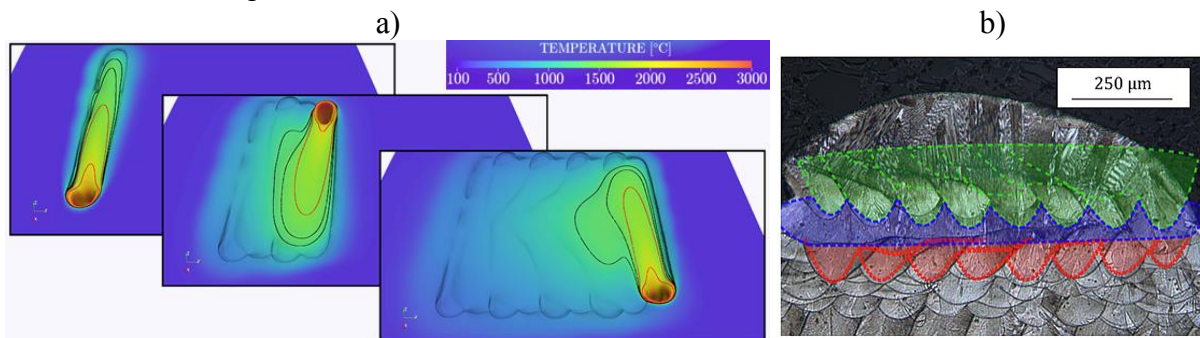


Fig. 5.14 : a) vue de dessus avec le champ de température de la fabrication de cordons (1^{er}, 4^e et 9^e cordons), lors de la réalisation de la 3^e couche en fabrication de structures L-PBF multipasses. b) comparaison entre simulation numérique et expériences sur un pilier constitué de trois couches. Les résultats numériques sont représentés, respectivement, par les couleurs rouge, bleue et verte, pour les couches (1), (2) et (3) [Que21].

Queva a également démontré précisément que ces évolutions sont liées au choix des paramètres procédés dont certains, comme le temps d'attente entre deux cordons (durée de 'skywriting'), sont très difficilement rendus accessibles par les constructeurs. Les comparaisons entre simulations et expériences (Fig. 5.14 b) montre également une prédiction très correcte de la profondeur des bains de fusion. Des écarts sont cependant visibles sur les parties supérieures des dépôts, où une géométrie 'épaisse' est observée expérimentalement, liée au développement d'un bain très large couvrant différents cordons, et adoptant une morphologie bombée, directement liée aux forces de capillarité, s'exerçant avant la solidification complète du bain. Ces écarts entre simulations et expériences doivent, pour une large part, s'expliquer par la durée du skywriting choisi, numériquement, à une valeur large de $t_{sky} = 400 \mu s$.

iv. Modélisation des évolutions microstructurales – Projet CETIM

Les sections précédentes ont démontré la capacité des outils numériques proposés à suivre le développement d'un cordon de matière, ou d'un ensemble de cordons déposés sur un substrat, tout en permettant de retrouver les résultats des observations expérimentales. Il apparaît cependant nécessaire de réaliser une calibration soignée de certaines grandeurs liées aux évolutions de la morphologie du bain, tels les termes d'absorptivité. Plus récemment, un besoin est également apparu, dans le domaine industriel, de bénéficier d'outils complémentaires permettant une prédiction, à une échelle fine, des évolutions microstructurales en L-PBF. Ce besoin est aussi en lien avec le caractère anisotrope de ces microstructures, et leur développement dans des conditions très spécifiques associées à de hauts gradients thermiques ($\nabla T \sim 10^6 - 10^7 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1}$) et de hautes vitesses de refroidissement ($\dot{T} \sim 10^5 - 10^6 \text{ K}^{-1}$). En particulier, dans l'équipe 2MS, nous avons été sollicités par le CETIM (CEntre Technique des Industries Mécaniques [CET23]) pour suivre et encadrer une thèse CIFRE s'insérant dans le cadre de la plateforme AFH [AFH23] et destinée à la maîtrise des évolutions microstructurales en fabrication additive L-PBF. Plus précisément, le contexte intéressant le CETIM était celui de la réalisation, par procédé L-PBF, de pièces d'intérêt aéronautique en alliage In718, cet alliage étant particulièrement exploité, pour la réalisation de différents éléments (disque, turbines, rotor ...) [Kay20], en raison de ses propriétés mécaniques élevées à haute température. La réalisation de ces éléments est, habituellement, basée sur des procédés de mise en forme par usinage ou fonderie, mais qui amènent, respectivement, à des pertes de matière importantes, ou au risque de créer des défauts de solidification, tels des ségrégations marquées ou des porosités. L'intérêt est ainsi important, industriellement, de pouvoir réaliser des pièces en In718 par procédé L-PBF, en bénéficiant – en complément – d'une plus grande liberté de conception. Dans ce cadre, cependant, les microstructures formées sont alors très différentes des autres procédés, et ce en lien avec les conditions de leur développement. La microstructure est marquée, présentant une texturation spécifique, en termes d'orientation cristallographique et de morphologie des grains, directement liée aux évolutions thermiques rencontrées lors de la solidification. De plus, la microstructure attendue est également fortement anisotrope, en lien avec l'orientation des gradients thermiques locaux. Il est ainsi primordial de pouvoir prédire cette microstructure afin de contrôler et maîtriser les propriétés d'usage des pièces, notamment mécaniques. Le développement d'approches couplées Cellular Automaton – Finite Element (CAFE) constitue, en conséquence, une méthode pertinente et efficace pour simuler les évolutions microstructurales des pièces In718, au cours de leur fabrication. Le projet de doctorat CIFRE CETIM - CEMEF s'est ainsi réalisé dans ce cadre, en s'appuyant sur cette méthodologie déjà présentée dans le chapitre consacré à la modélisation des procédés de soudage.

Ce projet a constitué une suite naturelle à nos précédents développements numériques, en bénéficiant des travaux de Carozzani, Chen (*Shijia*), Chen (*Qiang*), Queva et Xue sur lesquels nous nous sommes appuyés. Le doctorat de Camus [Cam23a] s'est, en conséquence, réalisé avec l'objectif de modéliser les évolutions de structures de grain en procédé L-PBF sur des domaines de construction pertinents, au regard des besoins industriels. Afin de répondre à cet objectif, il a été proposé de développer une nouvelle méthodologie, différente de celle exploitée précédemment par Xue [Xue22a]. En effet, bien qu'efficace, Camus a montré que les temps de simulation CAFE restaient prohibitifs [Cam23a, Cam23c], de l'ordre de sept jours de calcul

pour la réalisation d'un millimètre de cordon, dont seulement une quarantaine de minutes étaient nécessaires pour la résolution CA et le suivi du développement des grains. Dans ce cadre, il est apparu que de nouvelles stratégies devaient être envisagées, limitant autant que possible les calculs associés à la résolution thermohydraulique EF, pour se centrer sur les seules résolutions CA. Ceci a conduit Camus à proposer une nouvelle stratégie de résolution [Cam23a, Cam23b, Cam23c], nommée 'hybride' ($\{H^{FE}\}$), illustrée en Fig. 5.15. Cette approche consiste à suivre le développement d'un unique monocordon par une résolution EF thermohydraulique multiphysiques (Fig. 5.15 a), tel que proposé par Chen et Queva, jusqu'à atteindre un régime stationnaire (*ou périodique pour des conditions de constructions plus complexes* [Cam23a]), résumé dans les Eq. (1-4) de [Cam23b]. Le champ thermique associé, T , est alors projeté sur une grille régulière délimitée par un parallélépipède (cadre noir - Fig. 5.15 a). De même, la morphologie finale du cordon solidifié est similairement extraite numériquement. Dans cette approche, ces deux informations sont les seules nécessaires pour modéliser les évolutions microstructurales en régime stationnaire de croissance, dans lequel nous nous plaçons.

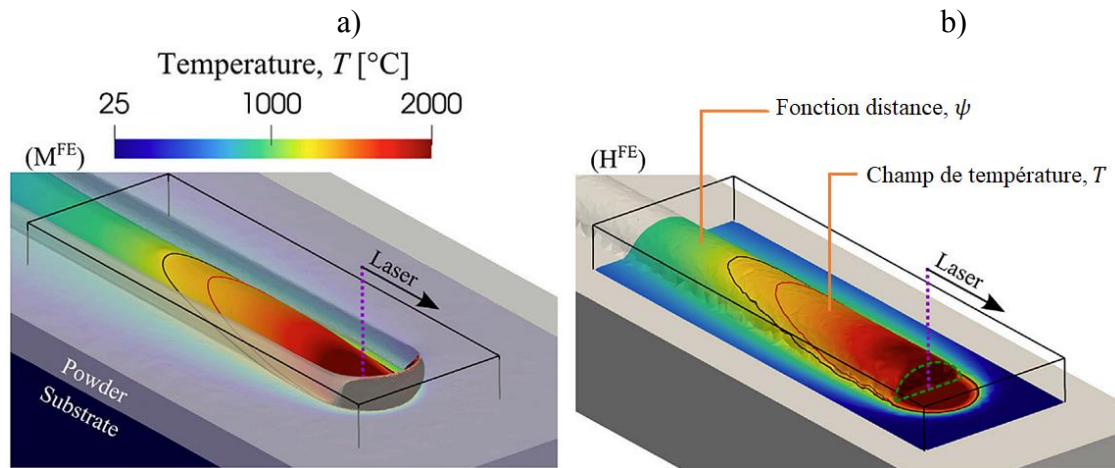


Fig. 5.15 : Température et forme de cordon obtenues avec a) (M^{FE}) le modèle thermohydraulique complet visualisé à l'aide du maillage EF et b) (H^{FE}) la méthodologie hybride exploitant le champ de température stocké dans la boîte noire (M^{FE}) et appliqué sur le maillage CA, avec la forme du cordon extrudée (cf. position du laser) définie en utilisant la forme de section finale du cordon (M^{FE}) [Cam23b].

Ainsi, l'hypothèse est faite que les microstructures formées, et nous intéressent, sont obtenues en régime thermique stationnaire dans lequel la majorité de la construction est réalisée. Dans un second temps, ces informations (*champ de température et forme de cordon*) sont, ainsi, simplement translatées le long de la trajectoire du laser (Fig. 5.15 b) et interpolées, à chaque pas de temps, au niveau des nœuds du maillage CA, avant d'être réinterpolées à l'échelle des cellules pour développer la structure de grains, selon la méthodologie habituelle, le champ de température permettant de définir les cinétiques de croissance, et l'isovaleur $\psi = 0$, identifiant le domaine d'apport de matière. Cette stratégie permet de ramener le temps de construction d'un millimètre de cordon, à la quarantaine de minutes précédemment mentionnée, et donc se révèle particulièrement efficace. Cette optimisation de la durée de simulation a été, également, améliorée au regard de la partition faite du maillage CA, dans le cadre de la parallélisation des calculs, tel qu'analysé par T. Camus dans son manuscrit [Cam23a].

Une présentation détaillée des résultats obtenus, et de leur comparaison à des données expérimentales, est proposée par Camus [Cam23a]. En particulier, différentes stratégies de

construction ont été investiguées dans le cadre de pièces simples. Une étude a, ainsi, porté sur les évolutions de texturation des microstructures formées pour des stratégies industrielles courantes détaillées en Fig. 5.16 a). Trois configurations sont investiguées telles que présentées : S_L^X – balayage bidirectionnel similaire entre couches consécutives, S_L^{XY} – décalage de $\pm 90^\circ$ entre couches et S_L^{67} – décalage de 67° entre couches. Les simulations sont réalisées avec une taille de cellule de $1.5 \mu\text{m}$ soit $120 \cdot 10^6$ cellules pour l'ensemble du domaine d'étude. Les temps de simulation de ~ 300 h restent très raisonnables. Les différentes simulations ont été exécutées sur les 14 cœurs (28 threads) d'un processeur Intel® Xeon® E5-2680V4 2.40 GHz. La démarche d'étude consiste ensuite à extraire des VER au centre des domaines, de volume $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$, pour limiter les effets de bord et amène aux observations rapportées en Fig. 5.16 b) présentant les cartes IPF des trois faces de chaque cube.

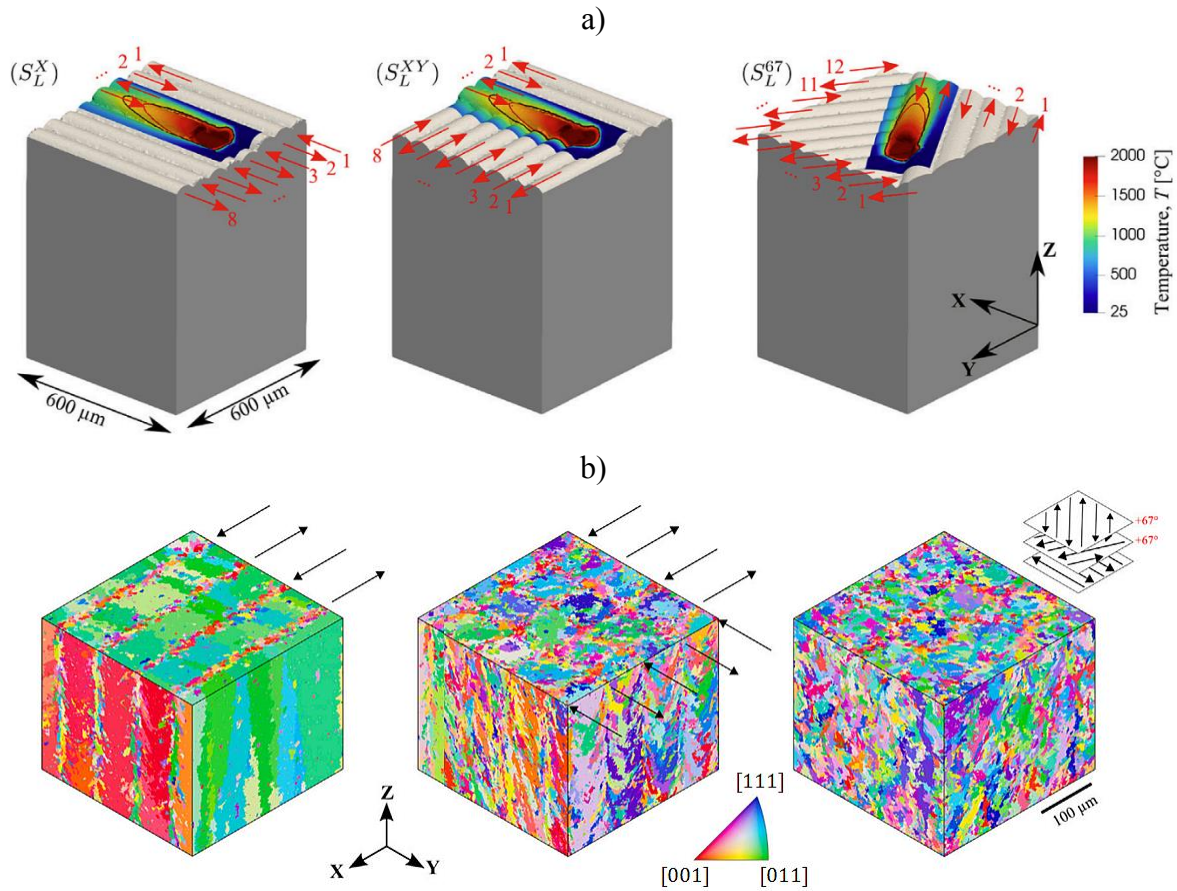


Fig. 5.16 : a) Vue globale du VER (alliage In718) en cours de fabrication, avec le champ de température (H^{FE}) hybride, correspondant à un nom réduit de couches déposées, au regard de la pièce finale constituée de 40 couches et de hauteur finale $1100 \mu\text{m}$. Trois configurations de scans sont illustrées, S_L^X , S_L^{XY} et S_L^{67} , pour le même choix de paramètre procédés ($P_L = 120 \text{ W}$, $v_L = 400 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ et un rendement $\eta = 0.62$). La densité de germes en résolution CA est de 10^7 mm^{-3} , la taille de cellule étant de $1.5 \mu\text{m}$. b) Sous-domaines associés (cube de $300 \mu\text{m}$ de côté), extrait au centre de la microstructure formée en résolution (H^{FE}). Les faces des cubes présentent les cartes d'orientation microstructurale IPF pour la normale associée [Cam23b].

On note une texture particulièrement marquée pour la première stratégie S_L^X . On observe ainsi la formation, majoritaire, de grains de grande dimension, similaire à la distance interpasse, dont l'une des directions $\langle 100 \rangle$ est proche de la direction x de lasage, les deux autres directions $\langle 100 \rangle$ étant orientées à 45° par rapport à la direction de construction, z , comme le montrent les cartes IPF des faces de normales y et z . Les lignes de lasage permettent d'observer, en

complément, une microstructure de grains fins formée par germination, d'orientation [100] essentiellement dans la direction verticale z . À l'inverse, les constructions S_L^{XY} et S_L^{67} permettent, comme attendu, de limiter le caractère de croissance épitaxiale de la microstructure, et amène à une morphologie en 'damier' sur la face supérieure. On observe, également, une dispersion bien plus marquée des orientations, avec une structure constituée de grains fins dispersés. La microstructure apparaît bien moins structurée, en S_L^{XY} sur la face supérieure au regard de la construction S_L^X . Il est intéressant de noter que, en accord avec les observations expérimentales habituelles de la littérature, la stratégie S_L^{67} fait disparaître, sur l'ensemble des faces, les texturations précédemment observées. Les figures de pôles discutées en Fig. 9 et 11 de [Cam23b] apportent, en complément, une analyse détaillée des textures formées, notamment au regard des géométries des bains fondus, sur lesquelles s'appuie le processus de croissance épitaxiale. Elles démontrent également l'absence de texturation dans les directions de construction dès l'emploi des stratégies S_L^{XY} et S_L^{67} . Des stratégies de construction supplémentaires (Tab. 3 de [Cam23b]) sont également analysées dans ce même article.

Différentes confrontations expérimentales ont été proposées par Camus pour les développements numériques réalisés, validant, ainsi, la méthodologie hybride proposée pour modéliser les processus de germination \ croissance des structures de grains par approche CA hybride. On trouvera, notamment, un détail de ces confrontations dans les derniers chapitres de [Cam23a]. La figure 5.17 illustre, ici, une première validation réalisée sur les mêmes structures présentées précédemment, et associées aux trois stratégies de scans décrites. Cette figure présente, ainsi, une comparaison des résultats des simulations aux données expérimentales de Nadammal *et al.* [Nad21]. Ces derniers ont, notamment, développé des constructions de pièces en alliage inconel In718 en étudiant l'influence des stratégies de construction. En particulier, les stratégies de dépôt S_L^X , S_L^{XY} et S_L^{67} ont été explorées par les auteurs. Il faut noter, cependant, que le dépôt d'énergie était sensiblement plus réduit, de $68 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-3}$, contre $98 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-3}$ dans les applications de Camus. On retrouve, cependant, à travers les cartes IPF, des orientations très similaires des microstructures formées sur la face supérieure des grains. Les mêmes orientations cristallographiques sont rapportées, en stratégie S_L^X , avec la formation de gros grains entre les passes, d'orientation commune [011], séparés par les liserés de grains germés présentant, de même, une orientation [001].

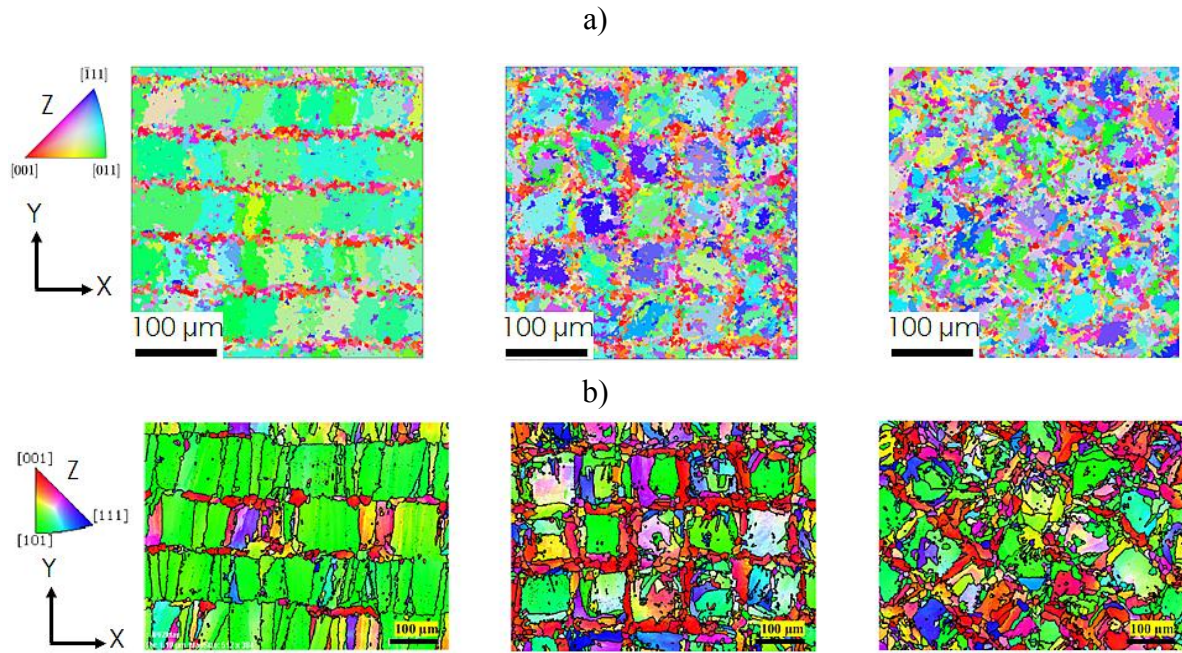


Fig. 5.17 : a) Carte IPF des structures de grains observées sur la face supérieure des trois cubes extraits des VER pour les constructions respectives (gauche à droite) S_L^X , S_L^{XY} et S_L^{67} ($E_v = 98 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-3}$) [Cam23b, Cam23c]. b) Données expérimentales de Nadammal pour des stratégies de dépôt équivalentes ($E_v = 68 \text{ J} \cdot \text{mm}^{-3}$) [Nad21].

Il faut noter également que, dans le cadre des collaborations développées avec le CMAT durant ce projet, des conditions de constructions bien plus complexes ont été explorées (*formation de structure en bandes*) devant conduire à une morphologie de grains fins équiaxes, liée à des mécanismes de transition colonnaire\équiaxes, ou due à des effets de brassage et de refusion du domaine pâteux préalablement formé. Des validations expérimentales intéressantes ont été également obtenues dans ce cadre de construction, que l'on trouvera rapportées dans [Cam23a, Cam23c], avec les limites et problèmes de calibration associés.

5.3 Bilan et perspectives

i. Synthèse

Les activités présentées dans ce chapitre, consacré à la modélisation des procédés de fabrication additive, se sont inscrites, initialement, dans une logique de valorisation des travaux développés autour de la modélisation des procédés de soudage, et, ainsi, dans une continuité logique aux approches numériques présentées dans le précédent chapitre. En complément, ces développements ont enrichi la librairie de calcul Cimlib, à travers des modèles physiques supplémentaires et des résolutions numériques améliorées. Les activités de recherche portées dans ce domaine dans l'équipe 2MS se sont voulues, aussi, être une réponse à des besoins, autant académique, de mieux comprendre la physique des phénomènes en jeu, qu'industriels, de disposer d'outils permettant de mieux contrôler ces nouveaux procédés de fabrication et de maîtriser les propriétés finales des pièces élaborées. Pour ces raisons, ces travaux ont été réalisés et portés dans le cadre de partenariats académiques ou industriels forts, comme cela a été largement rappelé. Ainsi, le projet Mines CARNOT CEFAL dans lequel s'est inscrit le projet de Chen a été un élément moteur pour intéresser, ensuite, de nouveaux partenaires industriels à soutenir ces activités, tel SAMC (*Safran Additive Manufacturing Campus*), AFH (*Additive Factory Hub*) [AFH23] ou le CETIM [CET23], et leur permettre de développer leurs compétences. En ce sens, ces activités ont permis de débiter plusieurs collaborations industrielles. La richesse des projets portés a également conduit à couvrir différents procédés de fabrication additive, à travers des activités achevées, ou en cours de réalisation, portant sur les approches L-PBF, WAAM ou – plus récemment – WLAM. Il est aussi intéressant de rappeler la diversité des matériaux étudiés, les études présentées ayant débuté sur des alliages céramiques, alumine et zircone, avant de s'orienter sur des alliages Inconel (In718, In738), de titane (Ti6Al4V) ou d'acier inoxydable austénitique (316L). On peut ainsi résumer les points marquants des travaux développés ci-après :

- Les modèles de source de chaleur ont été fortement enrichis pour intégrer la physique de l'interaction laser-matière en procédé L-PBF. Ainsi, une approche originale (Fig. 5.5 b), reposant sur le modèle de Beer-Lambert (Eq. 5.2), a été proposée pour transférer l'énergie du laser dans la matière, en lien avec les coefficients d'absorptivité locaux des différents milieux (poudre, liquide, solide) rencontrés [Che17b, Che18b]. Une méthodologie basée sur l'intégration des coefficients d'absorption (Eq. 5.3) le long du parcours du rayonnement laser, en s'appuyant sur une grille régulière, a été mise en œuvre par Chen, déterminant les sources d'énergie volumique locale. Des comparaisons aux solutions analytiques ont également validé ce modèle. En complément, Queva [Que20] a introduit des modèles de sources thermiques gaussiennes, plus à même de représenter l'interaction laser – métal liquide, avec une absorption du rayonnement en surface. Ces deux approches se complètent pour apporter une versatilité importante aux modèles d'apport d'énergie.
- L'un des objectifs de la modélisation des procédés L-PBF dans le cadre de son application aux superalliages bases Nickel (projet SAFRAN) était de pouvoir considérer les processus de vaporisation dans le bain liquide, responsable d'effet keyhole amenant au creusement du bain (Fig. 5.11-12) et une modification de sa morphologie. Ces effets ont ainsi été introduits dans le cadre d'une représentation des forces de recul exercées sur le bain liquide

(Eq. 5.9), et de ses conséquences sur les pertes thermiques (Eq. 5.8). La prise en considération de ces processus a permis, en complément du travail de calibration du coefficient d'absorptivité (Eq. 5.10), de retrouver les géométries de zones fondues expérimentales, validant ainsi le modèle de suivi thermo-mécanique (Fig. 5.12-14).

- Bien que cela ait été peu décrit ici, le travail de modélisation des procédés FA a été, également, réalisé à différentes échelles. Ainsi, les travaux présentés se sont attachés à décrire les résultats obtenus aux échelles mésoscopiques essentiellement. Cependant, des activités ont été également entreprises aux échelles macroscopiques pour prédire les évolutions thermiques et mécaniques des pièces sur des constructions centimétriques. Ces activités ont été réalisées, notamment, dans le cadre des thématiques encadrées par Zhang [Zha18a, Zha18b] et ont permis de suivre les évolutions des pièces durant leur réalisation. Ces approches, détaillées dans les articles cités, se basent ainsi sur des méthodologies plus simples, sans résolution mécanique des fluides, et avec un apport de chaleur transitoire lié à la durée d'illumination de la poudre. De même, le dépôt de matière est imposé sous forme de cordons prédéfinis, sans considération des forces qui modèlent l'interface. Elles offrent cependant l'intérêt évident de suivre la construction de pièces réelles, en donnant accès aux évolutions des températures, contraintes et déformations dans la matière. Cette même approche était reprise par Ravix pour la modélisation du procédé WAAM [Rav22]. On notera cependant qu'aucune action de couplage entre ces deux échelles de résolution n'a été valablement entreprise dans l'équipe à ce jour.

- Enfin, un dernier point doit être mentionné sur les activités les plus récemment encadrées, relatives à la modélisation CAFE appliquée au suivi des évolutions microstructurales, et développées à travers une collaboration forte avec le CETIM (Projet CIFRE \ Doctorat Camus). Ainsi, les travaux réalisés avec cet organisme ont permis de nous intéresser à une nouvelle thématique. En bénéficiant des méthodes numériques solidement établies pour suivre les évolutions thermiques des cordons, il a été possible de s'intéresser aux évolutions microstructurales en procédé L-PBF, ce sujet étant d'un intérêt particulier pour un grand nombre d'études sur les alliages métalliques comme rapportés dans la littérature récente [San21, Yu22, Nar22]. De même, ces activités ont été validées lors des collaborations initiées avec le Centre des Matériaux, ces dernières étant, sur ce sujet de la maîtrise des procédés FA, actives depuis le début de nos travaux.

ii. Bilan et diffusion

Mon bilan d'activité sur ce travail de recherche dédié à la modélisation des procédés additifs, dont seul une partie a pu être décrite dans ce chapitre, est le suivant :

► Neuf publications dans des journaux de rang A :

[RA21, RA26, RA34, RA24, RA27, RA30, RA37, RA39, RA45]

► Dix-sept conférences internationales :

[CI38, CI40, CI43, CI46, CI58, CI60⁴, CI61, CI65, CI67, CI73, CI74, CI75, CI76, CI78, CI87, CI89, CI92]

⁴ Best poster award, Joint ICASP-5 & CSSCR-5, 2019

- ▶ Neuf conférences nationales :
[CN19, CN20, CN21, CN22, CN23, CN28, CN29, CN31, CN32]
- ▶ Onze communications nationales :
[CO25, CO26, CO27, CO28, CO34, CO36, CO37, CO39, CO40, CO42, CO44]
- ▶ Un chapitre d'ouvrage à diffusion internationale :
[OI2]
- ▶ Cinq séminaires de recherche :
[SR2, SR6, SR7, SR8, SR9]
- ▶ Trois actes de vulgarisation scientifique :
[VP1, VC1, VM1]

Différents encadrements ont également été réalisés, liés à la thématique de la FA :

- ▶ Quatre doctorats soutenus :

Q. Chen (Financement CARNOT, Projet CEFALÉ, Octobre 2014 – Avril 2018)

A. Queva (Contrat CIFRE SAFRAN, Octobre 2017 – Septembre 2020)

L. Ravix (Projet ANR MACCADAM, Octobre 2018 – Septembre 2021)

T. Camus (Contrat CIFRE CETIM, Novembre 2019 – Juin 2023)

- ▶ Deux doctorats en cours :

P. Martin (Contrat CIFRE SAFRAN – Projet NILS, Octobre 2021 – Septembre 2024)

Z. Khong (Projet ANR COLUMBO, Novembre 2022 – Octobre 2025)

- ▶ Deux encadrements de Mastère spécialisé MaPMod :

I. Karroumi (Octobre 2018 – Septembre 2019)

M. Jebali (Octobre 2018 – Septembre 2019)

Les différents travaux évoqués ici ont, ainsi, eu une visibilité importante, tant au niveau national qu'international. Ils ont permis d'asseoir, en huit ans, la visibilité de l'équipe 2MS, dans la communauté scientifique française et internationale sur les thématiques de recherche présentées, en lien avec la modélisation des procédés FA. On rappellera, également, la richesse et la diversité des travaux précédemment développés ou en cours de réalisation. Ainsi, cette thématique recouvre, dans l'équipe, plusieurs procédés de fabrication additive allant du L-PBF (Doctorats de Chen, Queva et Camus, Masters Karroumi et Jebali) au procédé WAAM (Doctorat Ravix). Par là même, on relèvera la versatilité des outils numériques développés, qui ont permis de travailler sur une très large gamme de matériaux, en réponse, notamment, aux besoins industriels exprimés.

En termes de réseau, ces activités ont été reconnues à travers l'implication croissante de l'équipe 2MS dans des structures de recherche associées aux procédés de fabrication additive métallique. Ainsi, notre équipe participe activement au GDR (Groupement de Recherche) CNRS ALMA (Alliages Métalliques par/pour la fabrication additive) [Alm23] dirigé par le Pr. Eric Hug. À ce titre, nous sommes invités régulièrement dans les journées thématiques ou les

rencontres annuelles organisées par ce GDR pour présenter nos travaux. En particulier, je suis animateur, avec M. Carin (Laboratoire IRDL, Lorient), du thème transversal ‘Modélisation’ du GDR ALMA. De même, nous avons organisé, ensemble, dans ce cadre, un Séminaire ‘Simulation numérique des procédés de fabrication additive métallique’, au CEMEF, à Sophia Antipolis, les 22 et 23 Septembre 2022. Il doit aussi être mentionné que l’équipe 2MS est membre du GIS (Groupement d’intérêt scientifique) CNRS HEAD (HEAD - Hautes énergies en fabrication additive) et a obtenu un financement de doctorat à ce titre en 2022 (*Doct. Zixuan Li, dirigé par M. Bellet, Y. Zhang et M. Upadhyay du LMS, Polytechnique*) dans le cadre d’un projet de recherche portant sur l’influence des microstructures sur le comportement mécanique des pièces réalisées en FA.

Les communications listées précédemment sont, également, particulièrement bien référencées dans la littérature. L’originalité de nos travaux initiaux, portant sur l’application de la FA aux céramiques, semble avoir été appréciée, avec l’utilisation du modèle de Beer pour estimer la puissance absorbée localement par la matière [Liu21]. On notera ainsi la présentation faite des travaux de Chen par Pfeiffer *et al.* [Pfe21] dans leur analyse de l’état de l’art des procédés FA appliqués aux céramiques à hautes performances, reprenant également des illustrations de nos travaux, en montrant les performances de nos approches et la capacité offerte de prédire les défauts de ‘balling’. Les auteurs rappellent, cependant, les limites associées aux approches choisies pour définir les absorptivités des différents milieux. De même, les travaux de revue de Soundararajan *et al.* [Sou21], Goh *et al.* [Goh21], Zhang *et al.* [Zha21a] ou Alinejadian *et al.* [Ali22], pour les plus récents, rapportent bien les activités de notre équipe autour de la modélisation des procédés FA appliqués aux céramiques. Ces articles précisent, clairement, le choix des stratégies exploitées, basées sur une méthode LS, et la richesse des modèles ainsi définis. Les limites de ces résolutions EF à l’échelle mésoscopique sont, parfois, mentionnées, notamment en termes de durée de simulation, qui ne permettent pas d’aborder la construction de pièces entières avec la même finesse de résolution. On peut, cependant, apprécier de voir nos travaux régulièrement rapportés dans les articles de revues de référence sur les procédés FA, correspondant à une marque de reconnaissance de leur qualité.

Les développements réalisés par Queva sont particulièrement bien visibles, ayant été également rapportés dans des travaux de revues tels ceux de Bayat *et al.* [Bay21]. Ce dernier détaille la progression de nos activités, partant du travail réalisé sur les céramiques, pour aller vers les matériaux métalliques, et apporte une explication détaillée de nos approches de modélisation (voir Fig. 11 et Tab. 9 de [Bay21]). Les avantages offerts sont bien rapportés par différents auteurs tel Coen *et al.* [Coe22], de même que leur capacité à rendre compte des évolutions attendues du bain au regard des paramètres, comme Volpato *et al.* [Vol22] ou Wang *et al.* [Wan22b]. Le travail de calibration nécessaire de l’absorptivité (Eq. 10) est rappelé par Ebrahimi *et al.* [Ebr22]. Les limites de ces activités sont, aussi, régulièrement rappelées, notamment au regard des temps de simulation, de l’ordre de plusieurs heures, sinon jours, de temps de calculs.

iii. Perspectives

Le travail débuté sur cette thématique de la modélisation thermo-mécanique et microstructurale des procédés FA a été particulièrement dynamique durant les dernières années, en couvrant différents procédés et classes de matériaux, comme rappelé précédemment. Plusieurs limites restent encore présentes et mériteraient d'amener à de nouveaux développements.

On peut citer, en premier lieu, l'absence de couplage entre les différentes échelles de résolution. Ainsi, des approches méso- et macroscopiques ont été développées dans les différents projets présentés mais peu de travaux ont été menés pour réaliser des couplages directs entre ces résolutions, malgré quelques tentatives ou discussions sur ce sujet tels que proposées par Queva [Que21] et Ravix [Rav22]. Il reste ainsi à construire des méthodologies de couplage, en particulier sur les aspects thermiques. Il doit ainsi être envisageable d'améliorer les modèles définis en résolution macroscopique pour les sources de chaleur, sur la base des sorties des résolutions mésoscopiques (dimension \ profondeur des bains formés ...). De même, les résolutions macroscopiques réalisées apportent des informations importantes sur le champ thermique dans l'environnement de la zone de dépôt, en cours de construction. Ces évolutions doivent pouvoir être exploitées pour les simulations méso- pour définir des conditions limites plus appropriées et éventuellement évolutives en temps, selon le nombre de couches déposées, en considérant l'échauffement progressif des pièces. À terme, ces conditions limites devraient permettre d'améliorer les résolutions mésoscopiques et les résultats liés.

Concernant la physique des phénomènes étudiés, les modèles développés se sont progressivement enrichis à travers les différentes activités présentées. Cependant, différents phénomènes physiques, intéressants, mériteraient d'être considérés dans les résolutions proposées. On peut ainsi réfléchir aux problèmes de dénudation, avec les pertes de poudre au voisinage du lit construit, ou aux phénomènes de 'spaterring' avec l'éjection de métal liquide, lié aux écoulements complexes dans le bain. Les termes d'absorptivité, dont l'estimation est réalisée sur la base d'une loi calibrée, pourraient également être mieux estimés à travers des méthodes de lancer de rayons réalisées sur la base de la connaissance, apportée dans les travaux actuels, de la géométrie du bain liquide. Enfin, une meilleure connaissance des propriétés des alliages à haute température serait nécessaire pour fiabiliser les simulations. Ces informations sont, pour partie, apportées par l'exploitation de logiciels couplés à la thermodynamique, comme PhysalurgY, discuté dans le chapitre suivant. De même, nous cherchons à collaborer avec des équipes travaillant déjà sur ces sujets, telle l'association AFTherMat [Aft23], en complément des échanges intervenants dans le GDR ALMA ou le GIS HEAD.

Les perspectives aux activités présentées sont aussi associées à des recherches ayant récemment débuté dans l'équipe, et non détaillées dans ce chapitre. Concernant la valorisation des développements microstructuraux, on doit notamment citer le projet ANR JCJC GRAMME porté par Zhang qui doit bénéficier de cette prédiction des évolutions microstructurales pour enrichir la modélisation du comportement mécanique des pièces en cours de construction FA. De même, un sujet de recherche a débuté dans l'équipe portant sur le procédé WLAM (Wire Laser Additive Manufacturing) dans le cadre du projet ANR Columbo (Multiscale Characterization and cOntrollability by Laser Ultrasounds of WLAM components) [Col21]

porté par le CEA LIST. Ce projet nous conduira à développer des approches permettant de suivre les évolutions des microstructures, afin de créer des structures de grain virtuelles. À l’image des travaux déjà menés dans le cadre de NEMESIS, ces sorties seront exploitées dans des logiciels d’analyse CND, dans le but d’améliorer les méthodes de contrôle des pièces, en cours de fabrication. Le projet a débuté en 2022 pour 4 années, et a donné lieu au recrutement de Kong en doctorat au CEMEF. Des alliages base aluminium et base nickel seront exploités en raison de leur intérêt industriel et de leur différence importante de degré d’anisotropie. Sur cette même thématique, le projet ANR PRCE FALSTAFF (Fabrication additive d’alliages magnétiques à faibles pertes par feuilletage 3D) [Fal22] vient de débuter en 2023 dans notre équipe de recherche. Ce projet, porté par Bouvier (Laboratoire Roberval, UTC - Compiègne) vise à démontrer la possibilité de réaliser des pièces en alliages magnétiques de nuance Fe-Si et Fe-Co-V par procédé L-PBF ou DMD. Nous nous intéresserons ainsi, dans le cadre d’un projet de doctorat, à modéliser et simuler la construction de pièces associées à ces matériaux, et en particulier à en suivre les évolutions microstructurales. Les caractérisations de ces microstructures devront ensuite être validées sur la base des développements expérimentaux des partenaires académiques, et permettre de définir les propriétés d’usages des pièces, au regard des comportements mécanique et magnétique attendus. On retient également de ces différents travaux la nécessité, persistante, de pouvoir produire des microstructures représentatives des matériaux, à l’échelle des pièces d’étude, en des temps de simulation raisonnables, et ce pour des applications diverses.

Il est nécessaire de rappeler, enfin, que les collaborations avec Safran se sont poursuivies avec l’équipe 2MS et ont donné lieu au projet NILS visant à maîtriser la construction de pièces en superalliages base Nickel, pour des applications aéronautiques, par procédé L-PBF, et – en particulier – à contrôler le risque de survenue de défauts, notamment de fissuration à chaud. Ce projet est réalisé dans la continuité des activités de Queva [Que21] (CEMEF) et Grange [Gra20] (CMAT). Quatre doctorats sont prévus sur les années 2021-2026 (deux CMAT, Evry et deux CEMEF, Sophia Antipolis) dans cet objectif. En particulier, la collaboration réalisée vise à développer des approches mettant en œuvre des opérations de chauffage inter-couches par balayage laser (procédé L-PBF++) tel que proposées par Grange, dans l’objectif de contrôler les gradients thermiques et conditions de refroidissement des pièces, et limiter le risque de formation de défauts. Le doctorat de Martin (2021-2024) a débuté dans ce cadre et sera complété de celui de Ducottet (2023-2026) pour les encadrements réalisés de mon côté.

Chapitre 6

Couplages thermodynamiques

« Thermodynamics is a funny subject. The first time you go through it, you don't understand it at all. The second time you go through it, you think you understand it, except for one or two small points. The third time you go through it, you know you don't understand it, but by that time you are used to it, so it doesn't bother you anymore. »

Arnold Sommerfeld

Table des matières

6.1	Introduction	152
i.	Besoins de couplages thermodynamiques	153
ii.	Développement de l'outil PhysalurgY	156
6.2	Activité de recherche	160
i.	Description thermodynamique – Méthodologie	160
ii.	Suivi du développement des précipités	163
iii.	Cinétique de croissance dendritique	171
iv.	Introduction des effets cinétiques	182
6.3	Bilan et perspectives	188
i.	Synthèse	188
ii.	Bilan et diffusion	189
iii.	Perspectives	191

6.1 Introduction

Nous nous sommes précédemment intéressés à différents procédés de mise en forme industriels, liés au soudage et à la fabrication additive, correspondant aux activités développées ou encadrées, de mon côté, au CEMEF. Plus précisément, une partie importante de ces activités a porté sur la modélisation de ces procédés, et le suivi des transformations de phases dans les matériaux métalliques d'intérêt s'opérant lors des étapes de fusion \ solidification, ou à plus basse température, à l'état solide. Cependant, le développement d'une modélisation fine et précise des transformations de la matière, durant ces procédés, tant au regard de la nature des phases formées que des cinétiques de leur formation, dépend, très largement, de la connaissance que nous possédons des propriétés thermodynamiques de ces alliages et des équilibres associés lors de leur présence mutuelle. Cette connaissance, dans la littérature, est apportée, actuellement, par différentes voies éprouvées, théoriques, expérimentales ou numériques.

La principale approche, naturelle, correspond au développement de mesures physiques pour lesquelles de très nombreuses méthodes sont disponibles, complétées par des analyses permettant de déterminer autant la nature que la composition chimique des phases formées. Ces méthodes, telles la DRX, se sont également enrichies à travers l'appel aux 'grands instruments', de nouveaux moyens techniques permettant une caractérisation des matériaux métalliques à des échelles spatiales fines ou sur des temps réduits [Kvi17]. Plus récemment, en réponse aux besoins de caractérisation à haute température, de nouvelles approches ont été proposées, basées sur la lévitation électromagnétique de gouttelettes d'alliages métalliques permettant, en complément du suivi du processus de solidification, d'accéder aux valeurs de viscosité, de tension de surface de la phase liquide ou de conductivité thermique, sur terre [Wat22], ou en microgravité [Mat23, Moh23]. Actuellement, des méthodes inverses [Fra12] et des approches Bayésiennes [Pau19] permettent, sur la base de modèles éprouvés, de retrouver les propriétés physiques des matériaux. Encore plus récemment, de nouvelles approches, reprenant les méthodologies de l'intelligence artificielle et du machine learning, offrent la possibilité de déterminer ces propriétés de manière remarquablement précise [Chi20, Fan22], mais, également, de proposer des voies d'amélioration dans cette recherche [Liu17, Goo20]. En complément, et malgré des temps de simulations restant importants et des volumes d'étude réduits, les approches basées sur la modélisation numérique, telle la dynamique moléculaire (MD), rendent compte de l'évolution des alliages lors de processus de solidification [Mah19], en permettant d'accéder à leurs propriétés [Dor19, Lam22]. Ces méthodes MD offrent, ainsi, la possibilité de suivre le comportement de ces alliages dans les conditions de solidification rapide rencontrées en fabrication additive [Ant23] et d'accéder aux propriétés physiques propres aux interfaces. Elles ont l'avantage d'offrir une vision du comportement des matériaux métalliques à une échelle spatiale réduite ou sur des durées faibles. De même, des approches de résolution DFT (Density Functional Theory – théorie de la fonctionnelle de la densité), basées sur la connaissance de la structure électronique atomique et le principe de minimisation d'énergie, viennent compléter notre connaissance des propriétés thermodynamiques, en nécessitant des informations d'entrée limitées [Kat20]. Ces approches permettent d'accéder aux enthalpies de mélange des systèmes thermodynamiques, aux ordonnancements atomiques (système Al-Fe-(Co,Cr,NiPt) [Laf22]), de comprendre la stabilité des phases formées (système U-Ti [Baj11])

ou de rechercher des propriétés électriques et optiques (fonction diélectrique, indice de réfraction) (système B-Al-P [Set19]). Très récemment, des approches basées sur des méthodes de Machine Learning entraînées par des données DFT ont aussi vu le jour, pour suppléer aux durées de simulations importantes de ces dernières [He23] et accéder aux énergies de formation des phases. Ces approches permettent, enfin, d'investiguer les propriétés cristallographiques et thermodynamiques de nouveaux matériaux d'intérêt, notamment les alliages à haute entropie (HEA - High Entropy Alloy) (système AlCoCrFeNiTi [Bie22]). Elles s'appliquent également à des gammes de compositions sans cesse élargies, bien que les difficultés soient réelles à développer des modèles numériques fiables, pour des alliages contenant un trop grand nombre d'espèces, ou à des teneurs faibles de ces mêmes espèces. Cependant, la confrontation expérimentale des résultats apportés par les approches décrites ici demeure une nécessité, autant pour valider les modèles proposés, que les méthodes de simulation associées, ceci afin de justifier de la pertinence des informations qui en sont tirées.

i. Besoins de couplages thermodynamiques

Ainsi, comme on s'en aperçoit, la littérature reste extrêmement riche sur la connaissance et le suivi des transformations de phases dans les alliages métalliques et les moyens de la développer. Les différentes méthodes mentionnées permettent de déterminer les propriétés thermodynamiques des matériaux selon leur composition ou leur environnement, et apportent une connaissance précieuse de leur évolution, notamment lors des procédés de mise en forme. De même, la validité des modèles et approches théoriques sur lesquels se base cette description thermodynamique et trouvant son origine dans les travaux de Gibbs [Gib76, Gib78], a été depuis longtemps établie. Hertz rappelle, clairement, l'historique de ces travaux et leur diffusion dans le monde académique [Her92], Duhem ayant été, en France, l'un de ses plus importants promoteurs [Duh02]. La relation entre diagrammes de phase à l'équilibre et grandeurs thermodynamiques dans les systèmes binaires, est à porter au crédit de Van Laar [Laa08, Spe08]. Wagner établit, encore mieux, ce lien, et discute de l'évolution des diagrammes de phases au regard des grandeurs thermodynamiques d'enthalpie libre ou d'entropie [Wag52].

Il nous est possible d'exploiter ces riches données sur les propriétés thermodynamiques des matériaux de manière simplifiée, à travers des descriptions '*grossières*', basées sur des valeurs constantes ou approximées des propriétés, indépendantes des effets de température ou de composition, ou de les ramener à de simples évolutions linéaires. Ces approches se retrouvent dans la définition de *diagrammes de phases linéarisés*, présentant l'avantage – à titre d'exemple – de donner des expressions analytiques simples des chemins de solidification [Dan09]. Cependant, le besoin de développer des couplages thermodynamiques forts, bénéficiant de la connaissance complète des propriétés des alliages, apparaît de plus en plus prégnant, tant au niveau académique qu'industriel. En effet, sans que cela soit limitatif, il est possible de rappeler quelques exemples des applications et des attentes actuelles dans ce domaine.

En premier lieu, le développement de modélisations macroscopique des procédés de mise en forme, impliquant des étapes de chauffage \ refroidissement, de solidification ou de traitements thermiques, permet, déjà, de bénéficier d'une connaissance riche de l'évolution thermique des alliages. Il apparaît, en conséquence, particulièrement pertinent d'exploiter, en continu, ces informations pour bénéficier d'un suivi fin des transformations (Fig. 6.1 a-b). Le

développement de tels couplages permet de suivre la matière dans ses évolutions, en termes de température, de fractions de phases, de composition en étant au plus près des étapes critiques. Ces couplages permettent, ainsi, de déterminer, localement, les propriétés de l'alliage, en enthalpie, température, nature et compositions des phases et, couplés à des résolutions macroscopiques, d'accéder à une prédiction précise du comportement des matériaux. Il faut souligner que l'exploitation de tels couplages réduit massivement l'information nécessaire à ce suivi [Agr23], en la ramenant à un nombre faible de grandeurs et de paramètres, relatives aux expressions d'enthalpie libre et de mobilité, au regard de la masse imposante de données expérimentales ou numériques exploitées pour synthétiser cette information.

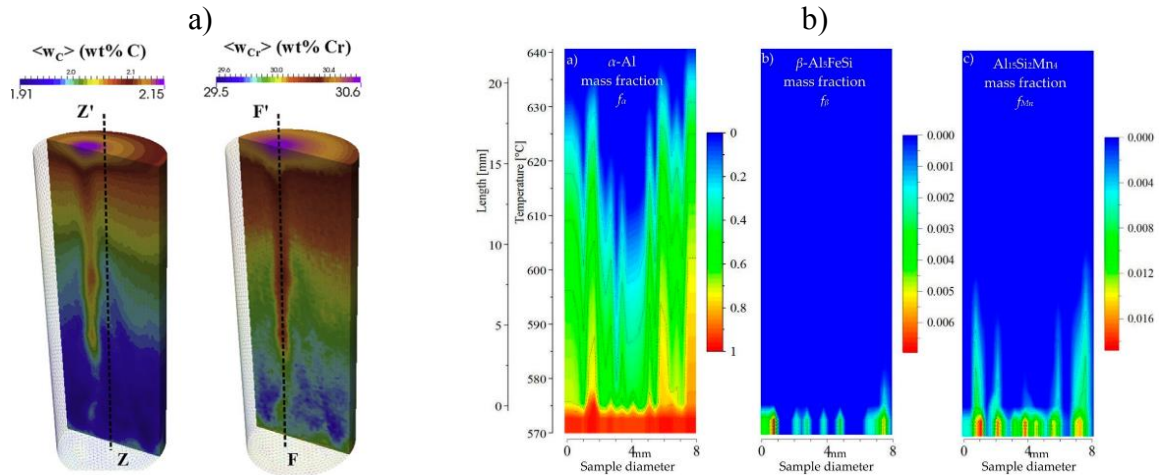


Fig. 6.1 : Simulations dédiées à la compréhension et la maîtrise de procédés de mise en forme. a) Solidification d'un alliage Fe-2%pds C – 30%pds Cr (lingot de diamètre 1 in × hauteur de 3 in) – Résolution thermique couplée à la détermination des équilibres thermodynamiques entre phases présentes. Carte de composition en C et Cr dans une coupe verticale montrant le processus de macroségrégation. [Saa15]. b) Carte 2D précisant les fractions massiques de phases α , β – Al₅FeSi, Al₁₅Si₂Mn₄ attendues le long d'un intervalle de solidification (zone pâteuse) pour un alliage Al-5%pds Si-0.2 %pds Fe-0.2 %pds Mn (calcul Thermo-Calc) [Mik17].

Cette méthodologie de travail doit aussi être rapprochée de celle, récente, de l'*Integrated Computational Mechanical Engineering* (ICME). Ce terme désigne la démarche visant à proposer, à destination de l'industrie, des méthodes de modélisation 'intégratives' regroupant, à la fois, la simulation numérique des procédés de fabrication, et le suivi des transformations matière, ceci en considérant, nécessairement, les différentes échelles de travail pertinentes pour réaliser ces modèles et les coupler [Hor18]. Ceci participe d'une 'virtualisation' de l'ensemble de la chaîne de production, allant de l'élaboration du matériau, à la prédiction des propriétés en service des pièces réalisées, à travers une connaissance fine de leur microstructure, en lien avec les conditions de mise en forme [Per15]. À terme, cette démarche vise à une optimisation complète des chaînes industrielles, tant du point de vue procédé que matière [Ibf21]. On retrouvera une explication précise de ce principe de travail, et des outils et moyens accessibles, en réponse à cet objectif, dans l'ouvrage de Schmitz *et al.* [Sch16], le chapitre 4 étant consacré au comportement thermodynamique des matériaux et aux logiciels associés à leur suivi.

De même, le développement de couplages thermodynamiques, basés, en particulier, sur la méthodologie CALPHAD [Kat97, Luk07, Kat16, Sun21] (*CAL*culat*ion* of *PH*ase *Di*agrams), détaillée par la suite, a pu apparaître, jusqu'à récemment, complexe ou limité par les durées de simulation. Cependant, l'accès à des moyens de calcul performants permet, actuellement, de bénéficier de temps de simulation considérablement réduits, aidés aussi par

des approches numériques efficaces, rendant d'autant plus intéressante et pertinente l'exploitation de ces couplages. En complément, les stratégies de tabulation [Saa15], les méthodes de corrélation\interpolation [Qiu15] ou les approches, plus récentes, en machine learning [Ban23] réduisent grandement, dans les systèmes d'intérêt, ces temps de calculs. L'utilisation de bibliothèques, et les outils informatiques associés, facilitent, également, l'accès à ces approches [The23g]. De plus, des initiatives de solutions ouvertes, partiellement ou totalement, soutiennent et dynamisent cette démarche de travail [Pym22, Ope23, Sin23]. Enfin, des outils complémentaires, à destination du monde académique ou industriel, couplés directement au calcul des équilibres, se sont développés, diffusant ces méthodologies de simulation telle la solution MICRESS® (Fig. 6.2 a). Dans cette même volonté de faciliter l'exploitation de ces couplages, des outils de création directe de bases de données sont accessibles, tels le module PARROT [The23f], alimentés par des observations expérimentales, et reconstruisant les expressions d'énergie de Gibbs appropriées pour les phases d'étude.

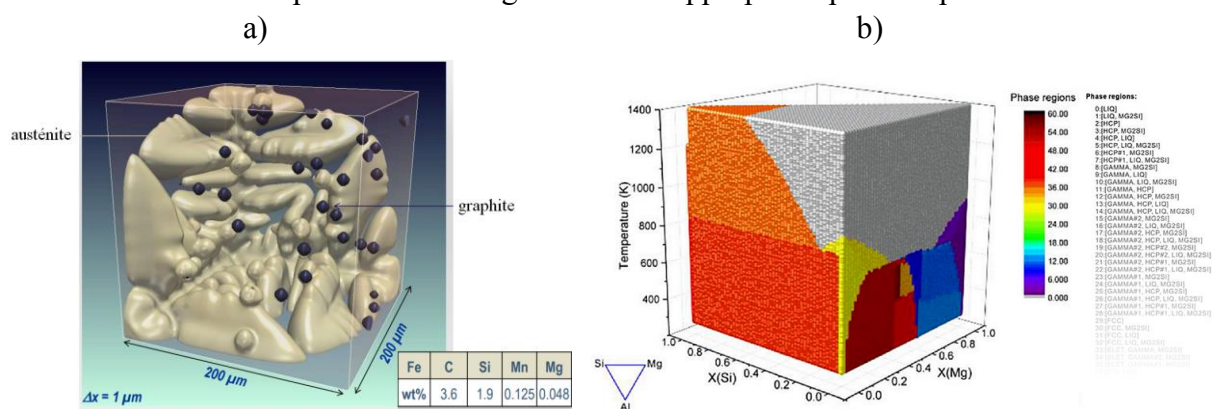


Fig. 6.2 : Approches numériques basées sur le couplage thermodynamique. a) Croissance de la phase austénitique et des nodules de graphite sphéroïdal (eutectique divorcé) dans une fonte GS, Simulation dans MICRESS® [Eik23, Mic23]. b) Diagramme de phase 3D du système ternaire Al-Si-Mg (vue de face) dans le domaine de température [300-1400] K. Les couleurs représentent les régions distinguées par la nature et le nombre de phases présentes (outil Malac-Distmas (*machine learning accelerated distributed task management system*) couplé avec Thermo-Calc [The23a]). Recherche réalisée dans le cadre de la conception d'alliage (*alloy design*) appuyée par le calcul des équilibres thermodynamiques et les méthodes de machine learning [Gao22b].

De plus, les bases de données accessibles dans les logiciels de calcul thermodynamiques apparaissent étoffées très régulièrement [The23b, The23c, The23d] par des espèces de travail supplémentaires, la description de nouvelles phases d'intérêt ou de systèmes complémentaires, ou, encore, l'élargissement des gammes de température \ pression exploitables, en réponse aux besoins et intérêts industriels. Cet enrichissement participe, ainsi, à la versatilité des outils de calculs, et des bases de données, qui recouvrent, dorénavant, un très grand nombre de systèmes. On pourra noter, d'ailleurs, que ces bases sont tout autant 'privées' [The23e] que 'publiques' [Nis23b]. Par là même, ces enrichissements offrent la possibilité de s'intéresser à de nouveaux alliages, d'analyser l'influence spécifique aux espèces, et ce même dans des gammes de compositions mineures, ou de suivre la formation d'intermétalliques de fraction faible, mais influents sur les propriétés d'usage. L'évolution de la chimie des matériaux d'étude, au cours des procédés de mise en forme, peut également être suivie, sur l'ensemble du procédé, en exploitant une base de données unique. Les stratégies de couplage thermodynamique et la disponibilité d'outils numériques efficaces, permettent ainsi, actuellement, de développer ces méthodologies de couplage dans une large gamme de travail, en réponse aux attentes exprimées.

Il est important de mentionner que, plus généralement, l'utilisation de ces approches participe, actuellement, à la recherche de nouveaux alliages, ou de nouvelles compositions d'alliages existants, aux propriétés optimisées. De nombreuses actions ont été entreprises, soutenues par les pouvoirs et institutions publiques, afin de faciliter la recherche et l'élaboration de ces *matériaux innovants*, et accélérer leur diffusion industrielle [Per15, Nom15]. Concernant les programmes américains, nous pouvons citer les initiatives de la DARPA [Dar15] et, de manière plus conséquente, le Materials Genome Initiative (2011) [Pab19], dont un nouveau plan de recherche a été diffusé en 2021 [MGI21] pour les 5 prochaines années. Ce projet, pourvu d'un budget de 250 millions de dollars, affiche l'ambition de définir, produire et diffuser deux fois plus rapidement, en milieu industriel, les '*advanced materials*', tout en réduisant leurs coûts de développements. Le rôle, dans ce projet, des outils et méthodes de calcul thermodynamiques issus des approches CALPHAD est apparu primordial pour plusieurs auteurs [Agr23], comme l'illustre l'exemple proposé à la figure 6.2 b). À l'échelle européenne, des initiatives similaires se sont fait jour récemment [Inn23], notamment autour des alliages métalliques [Met16, Vin23]. À l'échelle française, l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) soutient régulièrement les activités développées dans la recherche de matériaux nouveaux [Anr22], ou améliorés, en ouvrant des appels à projets internationaux [Anr23] (*e.g. Japon avec le JST - CREST*). D'autres initiatives existent, comme le rappelle le CNRS [Inf23]. En ce sens, les activités développées dans le GDR IAMAT (*Intelligence Artificielle en Sciences des Matériaux*) [Iam23] se doivent d'être citées. Il ne peut être oublié, de même, le domaine de recherche, extrêmement actif, que constituent les alliages HEA, où l'exploitation d'outils de calcul thermodynamique [The23i] participe, depuis ses origines, à la définition et la recherche de nouveaux alliages de cette nature [Ye16, Tan17b]. À cet effet, on pourra lire, avec intérêt, l'analyse éclairante proposée par Zhang et Yang [Zha22] sur l'exploitation de l'outil CALPHAD dans cette démarche de travail.

ii. Développement de l'outil PhysalurgY

Une dernière thématique de recherche personnelle apportée au CEMEF depuis mon intégration a, en conséquence, porté sur le développement d'outils numériques de couplages thermodynamiques, destinés au suivi des transformations de phases se déroulant dans les alliages métalliques, lors des procédés de mise en forme. Mes travaux ont commencé par la découverte et de maîtrise du logiciel Thermo-Calc [The23a] dont nous décrirons, en début de section suivante, le principe de fonctionnement et l'utilisation que nous en avons faite.

Ainsi, comme cela a été rappelé, les phases présentes dans les matériaux mis en forme évoluent à travers des étapes de germination \ croissance, ou disparaissent, avec des cinétiques liées autant aux conditions d'équilibre interfacial qu'à la diffusion chimique des espèces présentes. Ces transformations traduisent une évolution de la microstructure, amenant cette dernière dans un état final influençant directement les propriétés d'usage de la pièce. La prédiction de ces transformations revêt, en conséquence, une importance majeure. En réponse à ces besoins, relativement larges et diversifiés, j'ai porté le développement d'une librairie de calcul nommée PhysalurgY (PY) [Phy24], constituée de plusieurs modules, destinés, chacun, à réaliser le suivi des transformations de phases se déroulant dans les alliages métalliques. Cette librairie est basée sur l'exploitation de différents modèles et approches pour réaliser le suivi de la croissance de ces phases, adaptés selon les échelles spatiale et temporelle d'intérêt, et couplés

à des calculs d'équilibres thermodynamiques Thermo-Calc [The23a]. Son code source a été, régulièrement, déposé auprès de l'Agence pour la Protection des Programmes [App23].

Cette librairie PY comporte, en conséquence, plusieurs outils permettant, à titre d'exemple, de réaliser le suivi de la croissance des précipités métalliques par approche analytique (PY\MIAN), par méthode de suivi de front (PY\MIFT) [Gui15, Gan15] ou en déterminant leurs distributions de densité (PY\PREC) [Leg15a, Jac21]. De même, elle offre des outils destinés à la recherche des cinétiques de croissance dendritiques (PY\KIND) [Gui22] (Fig. 9 b) ou eutectique (PY\KINE) [Sen18]. Elle permet, également, la tabulation des propriétés thermodynamiques des alliages selon le chemin de solidification suivi, pour améliorer le suivi des évolutions thermiques (PY\PATH) [Saa15] lors de résolutions macroscopiques. D'autres outils - non mentionnés ici - sont également accessibles et peuvent être retrouvés, détaillés, sur le site dédié [Phy24].

Les premiers travaux réalisés sur ce sujet ont été relativement personnels, mais sont à mettre en relation, avec le besoin ressenti, à mon arrivée au CEMEF, de proposer, dans l'équipe SP2, une meilleure exploitation, et une stabilisation, dans un cadre plus formel, des précédents travaux exploitant l'outil Thermo-Calc. Un de ces travaux précurseurs était, entre autres, dédié à la modélisation des processus de microségrégation, se déroulant dans les alliages Al-Ni (*nickel de Raney*) lors du développement successif des structures dendritique, péritectique et eutectique [Tou09]. De même, un travail de recherche avait été, par la suite, réalisé pour proposer des modèles de microségrégation dans les alliages AM1 d'intérêt aéronautique [Ham12]. Il est apparu intéressant, à ce stade, avec Ch. A. Gandin, de pouvoir rassembler les outils numériques disponibles dans un cadre formalisé et structuré, à travers des entrées \ sorties organisées de manière unifiée, et des appels informatiques regroupés. De plus, il doit être indiqué que ces activités, autour du développement d'outils couplés aux calculs thermodynamiques, se sont complétées, parallèlement, de démarches théoriques, améliorant le suivi de ces transformations de phases. Les modèles proposés ont fait, ensuite, l'objet de développements numériques et informatiques dans la librairie PY. Certains des travaux les plus marquants associés à cette librairie seront présentés dans ce chapitre. Nous pouvons apporter, ici, en complément, des éléments détaillant les activités de ces dernières années développées dans PY.

Je me suis, dans un premier temps, intéressé à développer l'outil PY\PATH permettant une description tabulée des propriétés des alliages métalliques en cours de refroidissement, en décrivant, précisément, les fractions, compositions et enthalpies des phases formées au cours de la solidification. Il a pu être exploité par Saad [Saa15] lors de son travail de doctorat [Saa16]. Parallèlement, mes activités ont été soutenues par la Chaire Industrielle Daher [Dah12], portée par F. Bay (MINES ParisTech). Dans le cadre de cette Chaire, centrée sur la conception et l'optimisation des procédés, à destination de l'industrie aéronautique, j'ai bénéficié d'un projet de doctorat au CEMEF que nous avons choisi de consacrer à la modélisation des processus de précipitation dans les alliages d'aluminium. Plus précisément, ce doctorat s'est intéressé au procédé FSW (Friction Stir Welding \ Soudage par Friction Malaxage), cette méthode étant d'intérêt, dans l'industrie aéronautique, pour remplacer l'assemblage, réalisé par rivetage, de la peau (Alliage AA2024) sur les lisses (AA7075) lors de la réalisation du fuselage des avions. Le procédé FSW, n'apportant pas de matière supplémentaire, il est reconnu comme particulièrement intéressant, dans ce secteur industriel, dans le cadre de l'allègement des structures, en substitut

au rivetage. Cet intérêt a amené, à l'échelle française, à de premières applications, soutenues par les Instituts de Recherche Technologique (IRT) [Ins23, Mac20]. Dans le cadre du doctorat de V. Legrand [Leg15a], encadré avec Ch. A. Gandin, directeur de cette thèse, nous avons cherché, lors de l'application de ce procédé à des pièces d'aluminium, à suivre l'évolution rapide des populations de précipités, induite par les évolutions thermiques. L'objectif poursuivi était, à travers le suivi des processus de germination \ croissance \ dissolution des précipités, de prédire comment les densités et natures de ces précipités évoluent, et l'impact de ces évolutions sur la tenue mécanique finale des assemblages [Leg15b, Leg16, Jac21]. Une approche PSD (Precipitate Size Distribution) a été proposée pour réaliser ce suivi, cette méthodologie ayant été originellement proposée par Wagner et Kampmann [Wag91], pour être ensuite améliorée et implémentée numériquement par Myhr et Grong [Myr00]. Ces travaux ont amené, dans la librairie PhysalurgY, au développement de l'outil PY\PREC (Fig. 6.3 a) destiné à suivre l'évolution temporelle des populations de précipités, lors d'histoires thermiques complexes, et à estimer les propriétés finales des zones d'assemblages.

Ces travaux ont été réalisés à l'échelle 'large' d'un ensemble de précipités interagissant, et basés sur un modèle de croissance en 'champ moyen'. Mais, ils nous ont, aussi, montré l'intérêt de proposer, dans cette même librairie PY, des modèles plus fins permettant de suivre la cinétique de croissance de précipités, ou de grains, uniques, à travers des approches en 'champ complet'. Cette idée s'est concrétisée par le développement d'un modèle en suivi de front simulant la croissance de ces précipités ou grains isolés, et basé sur une représentation exacte des profils de composition situés de part et d'autre des interfaces. À cet effet, une transformation de Landau a été exploitée [Gan00]. Ces profils, liés aux diffusions des espèces chimiques dans les milieux d'études, guident, ainsi, les cinétiques de croissance interfaciale. Dès l'origine, l'idée poursuivie a été, de plus, de proposer cette approche dans le cadre d'alliages multicomposés, en intégrant les effets de diffusion croisée. Ces méthodes ont été élargies à des structures de dimensions spatiales variées, notamment pour l'étude de la croissance d'interfaces planes. Ce modèle a donné naissance à l'outil PY\MIFT (Fig. 6 3b), régulièrement exploité dans la suite de nos travaux [Gui15, Gan15, Gui17]. En particulier, il a pu être, rapidement, utilisé, et confronté à des données expérimentales, lors d'une activité de recherche conjointe menée avec V. Esin (CMAT d'Evry), sous la forme du stage (*Enseirb-Matmeca*) de R. Lecardonnel [Lec15]. Ce dernier portait sur le suivi de la dégradation des barrières thermiques d'aluminure de nickel ($\beta - (\text{Ni, Pt})\text{Al}$), modifiées par l'ajout de platine, et déposées sur des aubes de turbine monocristallines en alliage AM1 [Esi16], ces revêtements étant destinés à protéger ces aubes de l'oxydation aux hautes températures de travail. Les résultats ont montré la très bonne capacité du code PY\MIFT à représenter les évolutions physiques de ces revêtements et leur progressive détérioration. Par la suite, cet outil a été enrichi pour tenir compte des écarts et variations de densités entre les phases en présence, et notamment les effets de 'shrinkage' (contraction) grâce au stage (*Enseirb-Matmeca*) de V. Le Maout [LeM16]. Cette dernière activité, essentiellement de modélisation, a permis d'analyser l'effet de ces contributions sur les cinétiques de croissance. Les deux stages cités ont été financés sur les budgets propres du CEMEF, dont j'ai bénéficié pour débiter et réaliser ces travaux.

Le modèle en suivi de front introduit dans PY\MIFT est, ainsi, pertinent pour déterminer les cinétiques de développement des phases et domaines d'intérêt, couplés à la connaissance des équilibres interfaciaux. Cependant, il est rapidement apparu que les durées de simulation associées à ces modèles restaient importantes, sinon prohibitives, pour une application dans un contexte industriel. Ces durées étaient, notamment, liées aux faibles pas de temps et à la recherche, nécessaire, des équilibres interfaciaux, basée sur la méthode du simplexe de Nelder et Mead [Pre07]. Nous avons, ainsi, rapidement, proposé de nouvelles méthodes de détermination de ces cinétiques de croissance interfaciales, plus efficaces, basées sur des approches semi-analytiques, exploitant les expressions mathématiques des profils de composition. Ces modèles, introduits dans PY\MIAN, ont pu être confrontés, pour validation, aux résultats de PY\MIFT, et appliqués autant à l'étude de la croissance de grains globulitiques dans un alliage Al-Mg-Si [Gui15, Gan15] qu'au suivi des cinétiques de développement de précipités γ' dans un alliage Ni-Al-Cr [Gui17]. Cette activité sera détaillée par la suite, dans la présentation faite de mes travaux.

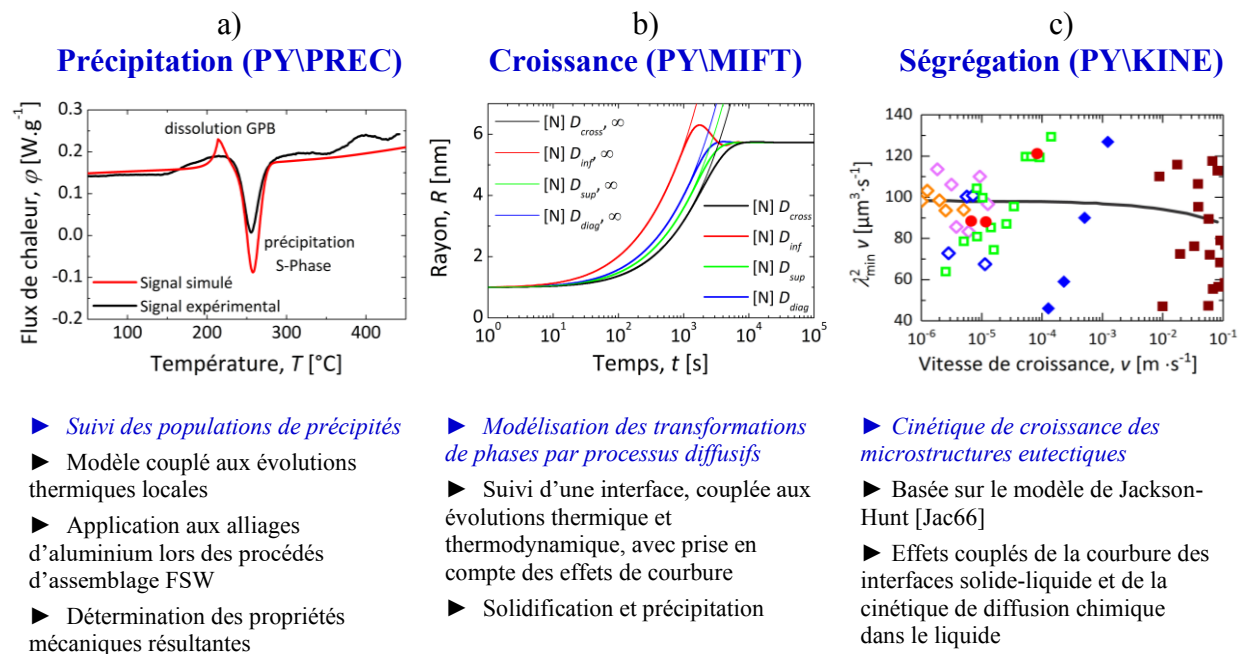


Fig. 6.3 : Présentation schématique des outils PhysalurgY a) PY\PREC, b) PY\MIFT et c) PY\KINE et de leurs caractéristiques et propriétés principales [Bel18].

Les modèles de croissance mentionnés ont, cependant, la limite de s'appliquer uniquement à des interfaces simples et stables. Dans le contexte de la croissance de structures de solidification, ces régimes sont rarement observés sur des temps longs, à tout le moins dans le cadre de croissances non contraintes. En effet, une évolution vers des morphologies, stables, de type dendritique ou eutectique [Dan09] est habituellement observée. Il a semblé intéressant de poursuivre le travail de PY vers la détermination de cinétiques de croissance dendritique couplées aux calculs Thermo-Calc. Ce travail s'est, en particulier, appuyé sur le modèle de croissance dendritique multicomposés, en diffusion croisée, proposé par Hunziker [Hun00], mais dont l'application s'est limitée aux seuls diagrammes de phase linéarisés. Une communication sur notre propre travail, correspondant à l'outil PY\KIND, a été proposée récemment [Gui22], dans le cadre d'échanges débutés avec l'équipe du Pr. P. Voorhees (Northwestern University, Evanston, USA). Cependant, le développement de cet outil est plus ancien. Nous avons, en

particulier, pu l'utiliser pour comparer nos cinétiques calculées à des solutions provenant de l'analyse de Hunziker [Hun00] pour des diagrammes linéarisés. Ce modèle de Hunziker a, en effet, permis de développer précédemment l'outil PY\KILI, plus rapide, mais restreint, ainsi, à l'utilisation de diagrammes simplifiés. Le travail autour de PY\KIND sera présenté par la suite.

Il est aussi à rappeler que, à la suite de l'arrivée de O. Senninger dans notre équipe de recherche, de nouvelles activités ont pu débuter, et se poursuivent actuellement, autour de la modélisation des structures eutectiques. Ces travaux se sont concrétisés avec le développement, d'un outil dédié au calcul des cinétiques de croissance eutectiques, nommé PY\KINE (Fig. 6.3 c), reprenant le modèle théorique de Jackson et Hunt [Jac66], et enrichi par le couplage réalisé avec les calculs d'équilibres thermodynamiques de Thermo-Calc [Sen18].

Enfin, cette introduction, résumant les travaux réalisés autour du développement de l'outil PY doit rappeler les activités récentes développées, en lien avec les thématiques de la fabrication additive et de la solidification rapide. Comme cela a été mentionné dans le chapitre précédent, le doctorat de P. Martin (2021-2024) a débuté dans le cadre d'un projet collaboratif avec Safran Additive Manufacturing (SAM-C) autour de la maîtrise des procédés L-PBF appliqués aux superalliages base-nickel (projet NILS). L'objectif est, ainsi, de proposer des modèles de solidification de ces alliages, adaptés aux conditions rencontrées dans ces procédés (forte vitesse \ fort gradient) et de les exploiter dans le but de prédire le risque de défauts, notamment liés au mécanisme de *fissuration à chaud*. Dans le cadre de cette étude, nous avons poursuivi nos échanges avec le Pr. P. Voorhees, et participé à proposer et valider un modèle de solidification hors équilibre, présenté récemment [Har22], améliorant et corrigeant les approches de la littérature. Ces développements seront également détaillés, et nous montrerons comment ce travail a été introduit dans la librairie PY pour bénéficier, dans le cadre des procédés FA, à l'enrichissement des méthodes de suivi des processus de solidification.

6.2 Activité de recherche

i. Description thermodynamique – Méthodologie

L'approche CALPHAD, précédemment mentionnée, correspond à la méthodologie de détermination des diagrammes de phases originellement conçue par Kaufman [Kau70] (ManLabs Company, USA) dans les années 1970 afin de proposer une description consistante des propriétés thermodynamiques des alliages. Par là même, s'est constitué, sur ces années, un groupe de scientifiques souhaitant soutenir cette activité, de manière pérenne et organisée. Ces premiers promoteurs de la méthodologie CALPHAD, ont amené, également, à la création de conférences dédiées (*première conférence à Cambridge, USA en 1973*) et du journal du même nom (*première publication en 1977*), participant grandement à la vie de la communauté. On trouvera un historique du développement de CALPHAD dans la présentation de Spencer [Spe08]. Bien évidemment, le développement de ces activités a été soutenu, largement, sur ces années, par les progrès des outils dédiés au calcul scientifique, amenant une grande facilité de mise en œuvre de cette méthodologie [Spe08]. Ce point était, dès l'origine, visible pour le Pr. Hillert du KTH (Stockholm, Suède) qui décrivait [Hil68] les avancées qui pourraient être observées dans l'étude des équilibres entre phases, si une combinaison efficace se faisait entre

les données expérimentales obtenues de la mesure des propriétés thermodynamiques et les lois physiques associées à la description des diagrammes de phases, aidé par des outils appropriés.

Un développement large d'outils de calculs des équilibres thermodynamiques à destination, autant du monde académique qu'industriel, s'est, ainsi, fait jour ces dernières années, participant à la diffusion de ces méthodologies. Ainsi, différents logiciels concurrents sont accessibles pour le calcul des équilibres entre phases [The23a, Pan23a, JMa23, Ope23, Fac23, MaC23, MTD03], souvent accompagnés d'outils liés, permettant la détermination des cinétiques de croissance de ces mêmes phases d'étude (PanPrecipitation® [Pan23b], TC-PRISMA® [Pri23]), parfois en lien avec le calcul direct des diffusions d'espèces dans les milieux (MICRESS® [Mic23], DICTRA® [Dic23]). La liste de l'ensemble de ces logiciels est trop longue pour être établie de manière exhaustive [Kat16] mais ils restent, essentiellement, basés sur l'approche CALPHAD [Kat97, Luk07, Sun21]. Si leurs développements étaient, à l'origine, portés par des structures publiques, de premières solutions commerciales sont rapidement apparues [Kat16], apportant une plus grande stabilisation et un support pérenne. Plus précisément, cette approche CALPHAD vise à la description, précise, de l'enthalpie libre, G^φ , des phases d'intérêt, φ , et de leur dépendance à la température, T , et compositions, x_i , sous la forme générale suivante, habituelle dans les bases thermodynamiques :

$$G_m^\varphi(T, \{x_i\}) = \sum_{i=1}^N x_i G_i^{0,\varphi} + R T \sum_{i=1}^N x_i \ln(x_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N x_i x_j L_{ij}^\varphi + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j}^N x_i x_j x_k L_{ijk}^\varphi \quad (6.1)$$

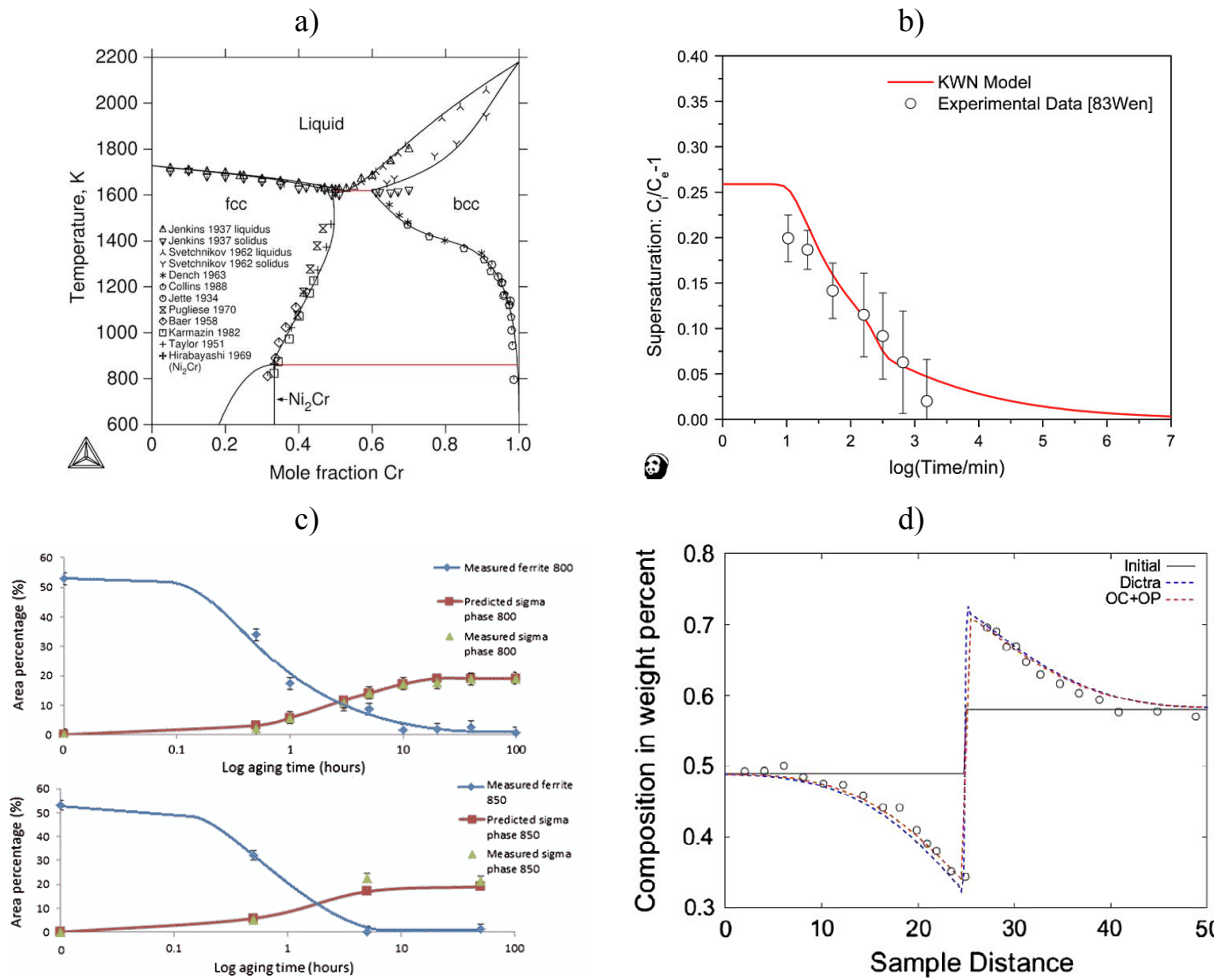
Les termes L_{ijk}^φ et L_{ij}^φ sont exprimables, sous la forme de sommes polynomiales, non détaillées ici, dépendant des températures et composition. Cette approche se base, ainsi, sur le principe d'une description thermodynamique des phases d'intérêt, φ , en s'appuyant sur des systèmes de complexités croissantes, dont on pourra trouver une présentation dans [Per15, Spe08]. La figure 6.4 présente schématiquement la méthodologie mise en œuvre pour la détermination des expressions des paramètres mentionnés.



Fig. 6.4 : Méthodologie CALPHAD consistant en quatre étapes principales pour le développement des bases de données matériaux (Thermodynamique, Cinétique et Propriétés) [The23a].

La première étape correspond à la détermination des propriétés effectives des systèmes, avant, à terme, d'aboutir à l'enregistrement de l'information condensée. Les méthodologies d'optimisation ou l'exploitation pratique de ces fonctions pour la recherche des équilibres ne seront pas détaillées ici. Le principe reste, nécessairement, de disposer de données expérimentales (enthalpie des systèmes, composition des équilibres ...) dans des conditions connues pour réaliser pas-à-pas une optimisation des paramètres. Si la comparaison peut se limiter à des systèmes à peu d'espèces (binaires, ternaires ...), l'exploitation de ces mêmes jeux de données à des ordres supérieurs permet, à terme, de valider la qualité de la représentation

faite [Per15]. Les sociétés et organismes mentionnés précédemment commercialisent les outils aidant à cette recherche (module PARROT [The23f], PanOptimizer [Pan23c]). D'autres solutions de travail, et méthodologies, sont rapportées dans la littérature, notamment pour les corrélations thermodynamiques de données issues de simulation numérique *ab initio* [Wal17]. Les valeurs des grandeurs peuvent cependant différer selon les approches et les outils, ceci sans considérer l'évolution des résultats amenés par l'enrichissement des observations [Kat97].



De nombreux outils destinés, au suivi des cinétiques de transformation des phases, basés sur la détermination des équilibres thermodynamiques ont été développés à partir des travaux et activités précurseurs mentionnés. La figure 6.5 illustre, quelques-uns des outils actuels, basés sur ces approches (**Thermo-Calc** [The23a], **Dictra** [Dic23], **PanPrecipitation** - **Pandat** [Pan23a], **JMatPro** [JMa23], **OpenCalphad** [Ope23]), ces derniers pouvant être complétés de la prédiction des propriétés finales des matériaux d'étude, au regard de leur microstructure, en réponse aux besoins exprimés. La concordance des résultats numériques fournis par ces différents outils, au

regard des résultats expérimentaux présentés, montre le degré de confiance élevé accordable à ces logiciels, aux modèles prédictifs proposés et aux couplages thermodynamiques introduits.

Le logiciel Thermo-Calc, exploité de mon côté, trouve son origine dans les travaux de Hillert au KTH, et de ses doctorants, Sundman, Jansson et Ågren (début 80'), intéressés par disposer de données thermodynamiques sur les propriétés de leurs alliages d'étude, dans un cadre unifié [The23h]. Les bases du logiciel Thermo-Calc ont été posées sous la forme d'une première version (1981). Ces travaux ont été poursuivis, portés par l'intérêt suscité par cet outil répondant aux besoins des laboratoires et industriels. Les développements académiques initiaux se sont progressivement orientés vers la réalisation d'un logiciel commercial, Thermo-Calc, en réponse au nombre grandissant d'utilisateurs, et au besoin de *maturer* l'outil logiciel, ceci s'étant concrétisé par la création de la société Thermo-Calc Software AB (1997).

ii. Suivi du développement des précipités

L'activité réalisée autour du développement de l'outil PhysalurgY s'appuie, ainsi, sur ce logiciel Thermo-Calc [The23a] et l'interface qu'il procure [The23g] (outils SDK - *Software Development Kits*), dans le but de déterminer les équilibres thermodynamiques interfaciaux. On peut noter que les développements présentés sont réalisés en langage C++, mais Thermo-Calc procure des interfaces d'appel s'adaptant aux évolutions des usages, en permettant l'exploitation de Toolbox Matlab ou l'appel au langage Python. Si différents outils ont été développés, nous nous intéresserons à détailler, uniquement, les travaux les plus marquants.

Nous nous sommes ainsi intéressés à suivre, à une échelle locale, la croissance de structures de solidification [Gui15] ou de précipitation [Gui17], ces travaux poursuivant les activités menées pour la détermination, dans une approche en *champ moyen*, de l'évolution temporelle de populations de précipités [Leg15a]. Une motivation était d'amener, également, une meilleure compréhension des cinétiques de croissance des microstructures métalliques en proposant des solutions analytiques permettant le suivi de leur développement. Ainsi, dans les procédés de mise en forme, la formation de nouvelles phases, après une nécessaire étape de *germination*, est liée à un processus de *croissance*, dépendant des températures rencontrées, mais également de l'importance et de la différence des processus de diffusion chimique de part et d'autre de l'interface. L'interaction des processus de diffusion chimique entre espèces en présence est aussi habituellement ignorée dans les modèles usuels, malgré son importance, mis en évidence tant expérimentalement que numériquement [Mao12, Rou13]. De même, l'effet de Gibbs-Thomson expliquant l'influence de la courbure interfaciale sur la position de la conode d'équilibre est fréquemment négligé dans les approches de la littérature. Ces hypothèses conduisent souvent à l'emploi de modèle de croissance simplifié, parfois en proposant d'exploiter la définition de *longueurs de diffusion* d'espèces [Che08], en particulier lorsqu'il s'agit de réaliser un couplage des modèles de croissance microscopiques avec une résolution macroscopique [Bed14, Sac22]. De même, les couplages thermodynamiques sont souvent ignorés, par l'usage de diagrammes linéarisés. Afin de pallier ces limitations, il est apparu intéressant de revisiter les modèles actuels, et de proposer une nouvelle approche analytique de croissance, couplée avec les calculs d'équilibre thermodynamiques et les bases de mobilité associées. L'objectif reste de pouvoir, par la suite, l'appliquer à une plus grande échelle spatiale. Ce modèle a été introduit dans l'outil PYMIAN, et mis en application dans différents contextes.

La fig. (6.6 a) illustre le cadre d'étude proposé pour un alliage à N espèces d'addition (section 2 de [Gui17]). Nous avons, ainsi, considéré le cas d'un précipité de composition P homogène en croissance dans une matrice M , le système étant fermé, défini par un flux solutal nul en frontière ($\phi_{|r=R_f}^M = 0$). Le modèle est limité à une croissance 1D, dans la direction $\hat{r}$, mais permet d'épouser une géométrie plane, circulaire ou sphérique selon les différents cas d'intérêt (précipités aplatis, en forme de tige ('rod-shaped') ou sphérique). Le précipité est de température homogène et évolutive, selon les conditions de refroidissement vécues, déduites de la conservation de l'énergie. La figure (6.6 a) présente les profils de composition de deux espèces (1, 2), $X_i(r)$, dont le caractère non monotone, visible pour $i = 2$, est lié à la diffusion croisée. La figure (6.6 b) illustre l'évolution des compositions d'équilibre des phases matrice ($M-\gamma$) et précipité ($P-\gamma'$) pour l'alliage d'étude Ni – 7.56 at.% Al – 8.56 at.% Cr selon la courbure du précipité. On voit ainsi combien ces effets sont marqués pour le précipité.

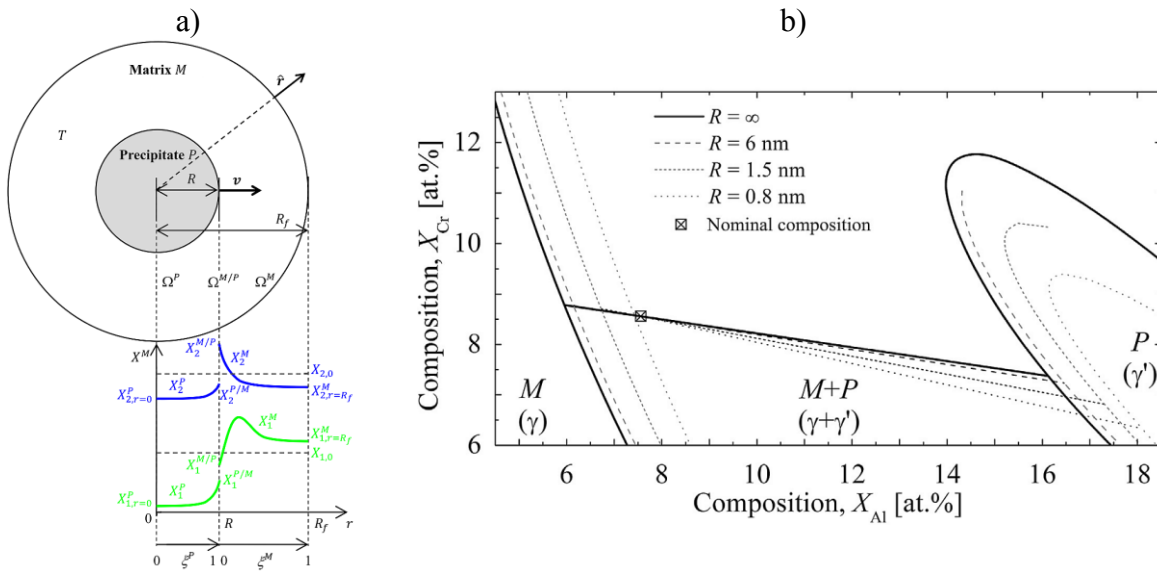


Fig. 6.6 : a) Modèle de croissance d'un précipité (P) dans une matrice (M) à une température, T , homogène. Le système est composé de N espèces d'additions. Les profils de composition pour deux espèces (1 et 2), liées à la diffusion croisée, sont représentés dans les domaines Ω^P et Ω^M , de part et d'autre de l'interface $\Omega^{M/P}$. b) Diagramme de phase Ni-Al-Cr ($T = 600$ °C), dans le domaine riche en nickel (espèce majoritaire), et les domaines d'existence des phases γ (M) et γ' (P). Les équilibres entre phases sont donnés à travers les conodes tracées pour la composition nominale X_0 (7.56 at.% Al, 8.56 at.% Cr) et différents rayons de courbure, R , du précipité P , modifiant ces équilibres (données issues de l'outil PY\PHDI de Thermo-Calc) [Gui17]

La détermination de la cinétique de croissance est définie par deux principes. D'une part, la conservation des espèces d'addition dans la matrice, liée au processus de diffusion chimique. D'autre part, le principe de conservation de ces mêmes espèces lors de l'avancée interfaciale. Ceci amène aux $2N$ équations de conservations suivantes (Eq. 6.2), reliant vitesse de croissance et champs de compositions dans les milieux P et M .

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_i^\alpha}{\partial t} = -\text{div} \sum_{j=1}^N (-D_{ij}^\alpha \mathbf{grad} X_j^\alpha) \quad \forall i \in [1, N] \\ v(X_i^{M/P} - X_i^{P/M}) = \sum_{j=1}^N (-D_{ij}^M \nabla^{M/P} X_j^M) - \sum_{j=1}^N (-D_{ij}^P \nabla^{P/M} X_j^P) \quad \forall i \in [1, N] \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Dans cette dernière expression, X_i^α représente la composition molaire de l'élément i dans la phase $\alpha \in \{M, P\}$. Les matrices de diffusion, $\mathbf{D}^P$ et $\mathbf{D}^M$, dans les milieux d'étude P et M intègrent les termes hors diagonales et peuvent être déduites des matrices de mobilité Thermo-Calc [The23c]. La faible taille des précipités permet, ensuite, de faire l'hypothèse d'une composition homogène dans le domaine P , qui n'est cependant pas associée à celle d'un flux nul des espèces dans ces mêmes milieux comme montré dans [Gui17]. Dans l'hypothèse supplémentaire d'un milieu M semi-infini, de composition $\mathbf{X}_\infty^m$ à grande distance ($R_f \rightarrow +\infty$ en Fig. 6.6 a)), ces équations peuvent être résolues mathématiquement, sous l'hypothèse d'une matrice de diffusion $\mathbf{D}^M$ homogène et constante. Cette résolution étend les solutions originellement proposées par Zener [Zen49], Aaron *et al.* [Aar70] ou Kirkaldy et Brown [Kir63], à des alliages multicomposés et des géométries non-planes. Il faut noter que la forme générale des expressions mathématiques proposées et détaillées en section 4.1 de [Gui17] reste associée à une croissance instationnaire, dépendant du temps, t , et de la position, r . Elle ne se base pas sur les hypothèses de régime stationnaire, tel le régime de Laplace, [Aar70] où les dérivées temporelles se retrouvent ignorées, pour se ramener à des expressions simples à exprimer et calculer. La solution analytique du profil de composition est, ainsi, définie comme somme des solutions élémentaires du problème initial, associé au cas binaire (Eq. 5 [Gui17]) :

$$X_i^M(r) = X_{i,\infty}^m + \sum_{j=1}^N K_j U_{ij} F\left(\frac{r^2}{B_j t}\right) \quad \forall i \in \{1, N\} \quad (6.3)$$

r représente la coordonnée radiale considérée. La variable $B_{j,1 \leq j \leq N}$ est la $j^{\text{ème}}$ valeur propre de la matrice de diffusion $\mathbf{D}^M$, associée au vecteur propre $\mathbf{U}_i$ de composantes $U_{ij,1 \leq i, j \leq N}$. La fonction F est définie dans [Gui17] et les valeurs de $K_{j,1 \leq j \leq N}$ sont à déterminer selon les conditions aux limites du problème posé. La recherche des solutions du problème amène, ensuite, à définir les compositions interfaciales permettant de 'fermer' le problème, en accompagnant les équations de conservation (6.3) des équations (6.4) correspondant aux équilibres thermodynamiques interfaciaux, notamment déduits des appels à Thermo-Calc, également influencés par l'effet de Gibbs-Thomson, lié au rayon de courbure de l'interface, R .

$$\begin{aligned} T &= F^{M/P}(\mathbf{X}^{M/P}, R) \\ X_i^{P/M} &= \phi_i^{M/P}(\mathbf{X}^{M/P}, R) \quad \forall i \in \{1, N\} \end{aligned} \quad (6.4)$$

Les fonctions $F^{M/P}(\cdot)$ et $\phi_i^{M/P}(\cdot)$ proviennent, incidemment, du couplage Thermo-Calc [Gui17]. Ces $N + 1$ équations (6.4) s'accompagnent des N équations (6.5) reliant les écarts de composition interfaciaux, définis par $\Delta \mathbf{X}^{M/P}$, aux écarts de composition entre l'interface, $r = R_f$, et la position $r \rightarrow \infty$, définis par $\Delta \mathbf{X}^M$:

$$\Delta \mathbf{X}^{M/P} = \Lambda(\lambda') \Delta \mathbf{X}^M \quad (6.5)$$

La fonction $\Lambda(\cdot)$ est détaillée dans la référence [Gui17]. La résolution couplée des équations (6.4-5) conduit à fixer la valeur du paramètre cinétique λ' défini en Eq. 9 de [Gui17] (ou λ défini en Eq. 21 de [Gui15]), en complément de la conode de travail, entre compositions interfaciales. Bien que les solutions puissent, à travers les expressions mathématiques de $F(\cdot)$ ou $G(\cdot)$ (respectivement Eq. (6) et Eq. (13) dans [Gui17]), paraître complexes à résoudre, la

démarche de recherche est bien établie et les méthodes de type *descente du simplexe* [Pre07] permettent de trouver aisément la solution souhaitée, après diagonalisation de la matrice de diffusion. Cette résolution est couplée aux appels d'équilibre pour Thermo-Calc, dans le cadre de système 'réel', afin de déterminer les positions des conodes. Il faut noter que l'utilisation de méthodes de type Newton-Raphson permettrait certainement de converger plus efficacement vers ce point de fonctionnement, notamment dans le cas de systèmes multicomposés, au-delà de trois à quatre espèces dissoutes, comme nous l'avons constaté dans des activités récentes. Le paramètre λ' fixe, ensuite, les grandeurs R et v (Fig. 6.6 a) par la relation simple $\lambda' = 2 R v$, d'où peuvent être déduites les solutions exactes des profils de composition en régime de croissance semi-infini, ainsi que les lois d'évolutions en $R \simeq \sqrt{\lambda'} \sqrt{t}$ et $v \simeq \sqrt{\lambda'} / (2 \sqrt{t})$ auxquels ces deux grandeurs obéissent en l'absence d'interactions solutales en croissance.

La figure 6.7 a) illustre les résultats obtenus dans le cadre de la croissance d'un précipité dans un système Ni – 7.56 at.% Al – 8.56 at.% Cr pour les différentes matrices d'études $\mathbf{D}^M$ (croisée, inférieure, supérieure, diagonale) (Tab. 6.1), couvrant l'intégralité des situations d'intérêt, issues de précédentes analyses [Rou13]. La diagonalisation de ces matrices produit les vecteurs et valeurs propres sur lesquels s'appuient les expressions analytiques proposées. On retrouve ainsi, exactement, les évolutions analytiques attendues (Fig. 6.6 a), en termes de compositions interfaciales et profils de composition, pour l'ensemble des cas d'études. En complément, le modèle PYMIFT, utilisé pour prédire la croissance d'un précipité isolé dans le cas d'une matrice de diffusion $\mathbf{D}_{inf}^M$ (Tab. 6.1) a été comparé à la solution analytique (Fig. 6.7 b), validant les deux approches, analytiques et numériques, comme on le voit à travers la superposition des évolutions de composition en aluminium aux différents temps de croissance.

	$\mathbf{D}_{cro}^M$	$\mathbf{D}_{inf}^M$	$\mathbf{D}_{sup}^M$	$\mathbf{D}_{dia}^M$
\	Al Cr	Al Cr	Al Cr	Al Cr
Al	(20.8 8.59)	(20.8 0)	(20.8 8.59)	(20.8 0)
Cr	(8.13 3.82)	(8.13 3.82)	(0 3.82)	(0 3.82)

Tab. 6.1: Matrices de diffusion $\mathbf{D}^M$ dans la phase γ , exploitées dans l'étude des cinétiques de croissance (respect. croisée, inférieure, supérieure, diagonale). Les termes $D_{..}$ sont exprimés en $10^{-21} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ [Rou13, Gui17].

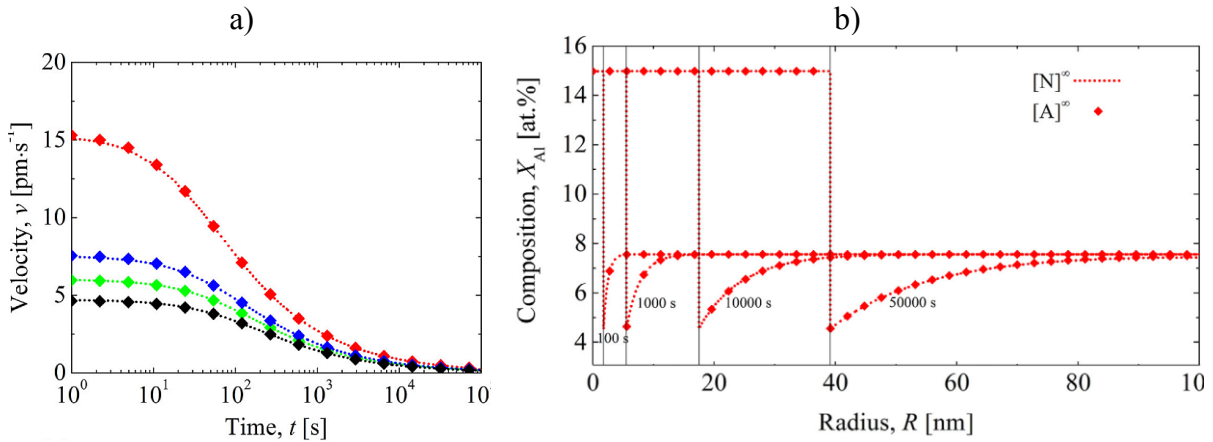


Fig. 6.7 : Croissance d'un précipité sphérique γ' isolé dans un milieu semi-infini – Comparaison des solutions numériques en suivi de front, $[N]^\infty$, et analytique, $[A]^\infty$: a) Evolution temporelle de la vitesse selon le choix de la matrice de diffusion : croisée, inférieure, supérieure ou diagonale (Tab. 6.1). b) Profils de composition dans les domaines P et M pour différentes durées de croissance pour le choix de matrice $\mathbf{D}_{inf}^M$ [Gui17].

Comme cela est détaillé dans [Gui17], cette approche, exacte, de détermination de la cinétique d'une phase (grains globulitiques [Gui15], précipités [Gui17]) en croissance dans un milieu semi-infini est, cependant, d'un intérêt limité dans les applications réelles. Elle suppose l'absence d'interaction solutale entre les phases et l'existence d'un champ de composition fixe à grande distance, définissant la force motrice de croissance. En pratique, les phases d'études se développent par suite de processus de germination évolutifs en temps. De plus, les profils de composition, devant les fronts en croissance, interagissant à travers la matrice M , par un mécanisme d'*interaction solutale* modifiant, dans le temps, la force motrice de croissance. En conséquence, les domaines dans lesquels les solutés diffusent devant l'interface sont également limités par l'interaction solutale. Enfin, les chargements thermiques, complexes, dans les procédés de mise en forme, modifient les positions des conodes, de même, que, dans les premiers stades de croissance, l'effet de courbure. Cet effet, proportionnel à l'énergie interfaciale γ , est rendu particulièrement visible sur la figure (6.6 b), où la composition $X^{P/M}$ évolue fortement selon le rayon du précipité considéré. Ces différents points montrent la nécessité de proposer des modèles de croissance plus fins pour déterminer la cinétique des phases, dans les régimes réels rencontrés dans les procédés de mise en forme industriels. Il s'agit, notamment, d'exploiter les modèles rapportés dans la littérature, tel celui proposé ici (Section 4.1 de [Gui17]) en définissant la composition 'vue' par l'interface. Ainsi, on cherche à définir, durant l'ensemble du cycle, évolutif en température et taille de structure, un ensemble de valeurs pertinentes, $\tilde{X}_{\infty}^M = \tilde{X}_{i,\infty}^M$ ($1 \leq i \leq N$), équivalent de la composition à l'infini, $X_{\infty}^M = X_{i,\infty}^M$ ($1 \leq i \leq N$) (Eq. 6.3) permettant une estimation de la force motrice. De plus, cette recherche limite le développement des précipités à la distance d'interaction mutuelle, $R_f \sim 1/N_g^{1/3}$, où N_g est la densité volumique de grains.

Dans ce cadre, différentes approches ont été investiguées (Fig. 6.8), la plus immédiate consistant simplement à égaliser les compositions à l'infini recherchées, $\tilde{X}_{\infty}^M = \tilde{X}_{i,\infty}^M$ ($1 \leq i \leq N$), par les compositions moyennes des espèces $\bar{X}^M = \bar{X}_i^M$ ($1 \leq i \leq N$) (Fig. 6.8 – Choix #1). Une approche apparue, rapidement, plus pertinente consiste à bénéficier du profil analytique de la composition (Eq. 6.3) pour définir, à tout instant, la composition moyenne dans la matrice $\bar{X}^M = f(\tilde{X}_{\infty}^M)$ (Fig. 6.8 – Choix #3). La cinétique de croissance de l'interface est déduite, ensuite, du lien établi précédemment, entre le champ de composition $\tilde{X}_{\infty}^M$ et le paramètre λ' [Gui17] (ou λ [Gui15]) dans le cadre d'une croissance en régime semi-infini. En un sens, $\tilde{X}_{\infty}^M$ permet de retrouver la force motrice de croissance d'un précipité, dans un milieu fini, avec interaction solutale, en s'appuyant sur un profil de composition proche de celui attendu. Cette démarche de résolution est détaillée en section 3.1 de [Gui15] et appliquée, alors, à la croissance de grains globulitiques dans un volume sphérique. Nous avons montré, en particulier, que le choix #3 permet de retrouver, dans un système fermé, l'ensemble des résultats attendus, tant au niveau des évolutions thermiques, des compositions interfaciales ou des cinétiques de croissance, au regard d'une solution de référence calculée en suivi de front (outil PY\MIFT). Cette comparaison a validé la démarche de modélisation proposée, en montrant également comment des approches trop simplifiées s'écartent fortement des résultats attendus.

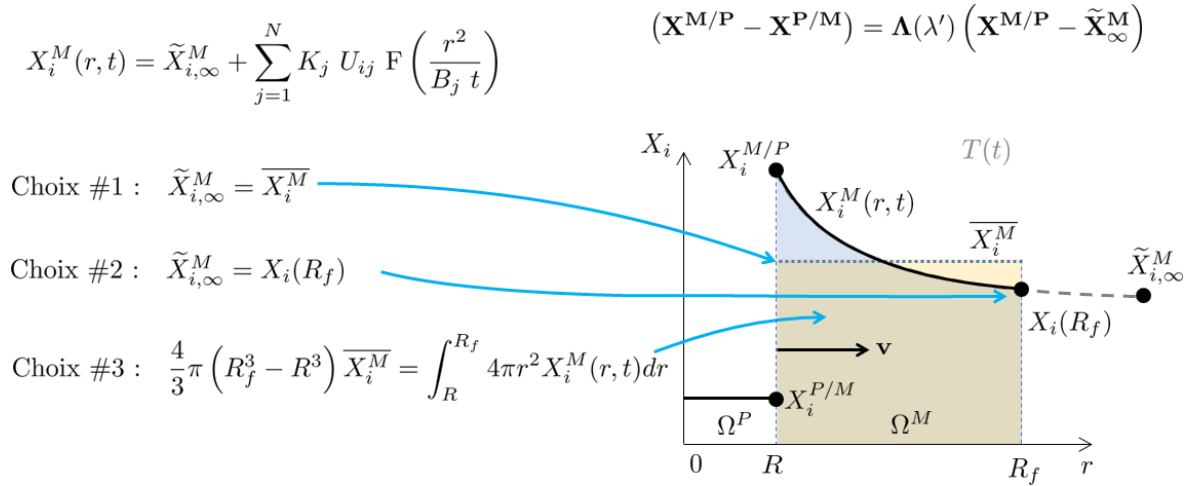


Fig. 6.8 : Croissance d'un précipité, P (domaine Ω^P), dans une matrice M (domaine Ω^M), limitée à la taille R_f (Fig. 6.6 a): Illustration des différents choix investigués pour la recherche du vecteur de composition à l'infini, $\tilde{\mathbf{X}}_{i,\infty}^M$: #1) exploitation de la composition moyenne dans la matrice, #2) exploitation du profil analytique en R_f , #3) Approche intégrale sur le profil de composition ($r \in [R, R_f]$) [Gui15,Gui17].

L'application de ce modèle dans le cadre de l'étude de la croissance de précipités [Gui17] a, initialement, connu une limitation. En effet, nous avons cherché à appliquer notre approche à la croissance d'un précipité de phase γ' (P) dans une phase γ (M) de rayon 10.61 nm, pour un alliage Ni-7.56 at.% Al-8.56 at.% Cr, lors d'un traitement isotherme à $T = 600$ °C. Une base de données Thermo-Calc dédiée aux alliages nickel a été exploitée [The23a]. Dans ce cadre, la solution de référence PY\MIFT montre une croissance des précipités, suivi d'une dissolution, à travers un régime oscillant. Le modèle 'naïf' décrit précédemment ne permettant de n'étudier que les régimes de croissance, nous avons cherché à l'enrichir afin de l'appliquer également aux régimes de dissolution ($\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} = v < 0$ ou $\lambda' < 0$). Il n'apparaît pas, cependant, possible de définir un profil analytique de composition, celle-ci n'existant, dans l'hypothèse d'évolution instationnaire investiguée, que dans un régime de croissance (i.e. $\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}} = v > 0$ ou $\lambda' > 0$) avec $\mathbf{X}^M$ dépendant du couple (r, t) [Aar70]. Cependant, si on 'relâche' les hypothèses du modèle, et notamment l'hypothèse d'instationnarité, nous pouvons chercher une solution dans le régime de Laplace [Aar70] en considérant des profils analytiques stationnaires. Cette hypothèse semble validée dans les régimes de dissolution lente étudiés [Gui17], au regard des valeurs de $\mathbf{D}^M$ (Tab. 6.1) et des paramètres R et v . En complément des expressions de profils (Eq. (25) dans [Gui17]), il convient d'enrichir le modèle avec l'hypothèse de l'existence d'un flux de soluté non nul, $\phi^{P/M}$, à l'interface M/P . Nous avons démontré que ce flux prend la forme de l'équation (6.6 a) amenant à corriger l'équation (6.5) précédemment résolue pour la détermination du facteur λ' :

$$\phi^{P/M} = v(\mathbf{X}^{M/P} - \mathbf{X}^{P/M}) - \frac{R}{3} \frac{\partial \mathbf{X}^{P/M}}{\partial t} \quad (6.6 \text{ a})$$

$$\Delta \mathbf{X}^{M/P} = \Lambda(\lambda') \Delta \tilde{\mathbf{X}}^M + \frac{2 R^2}{3 \lambda'} \frac{\partial \mathbf{X}^{P/M}}{\partial t} \quad (6.6 \text{ b})$$

où la nouvelle matrice $\Lambda(\lambda')$, définie par l'approche intégrative sur les nouveaux profils de composition, est détaillée en Eq. (27) dans [Gui17]. La résolution de l'équation (6.6 a) jointe aux équations (6.4), dans le cadre du couplage Thermo-Calc, permet, également, de redéfinir le terme cinétique λ' et l'évolution temporelle du rayon R (Eq. 26 de [Gui17]). Cet enrichissement

du modèle a été introduit dans les régimes de croissance et de dissolution, permettant, en conséquence, d'aborder l'ensemble des étapes d'évolution des précipités, jusqu'à l'équilibre thermodynamique. En ce sens, elle se différencie de certaines approches de la littérature (Chen *et al.* [Che08]) incapables de s'appliquer aux régimes de dissolution, par le fait que seuls les cas de sursaturation, ou de longueur de diffusion, positives sont considérés. Ces dernières approches ne sont ainsi applicables que dans les régimes de croissance des précipités, et s'arrêtent dès lors que $v = 0$ (régime [CJA]⁻ dans la Fig. 7(b) de [Gui17]).

La figure 6.9 présente l'évolution des rayons et vitesse de précipités, dans le cas d'étude détaillé en [Gui17], correspondant à un domaine de croissance limité à $R_f = 10.61$ nm, pour les modèles PYMIAN (Fig. 6.9 a) et PYMIFT (Fig. 6.9 b), et un précipité de taille initiale 0.8 nm. Il est montré que l'effet de courbure ralentit la croissance en raison d'une plus grande proximité de la composition nominale, X_0 , avec la composition interfaciale, $X^{M/P}$ (Fig. 6.6 b). De plus, nous démontrons (section 6.2 de [Gui17]) que cet effet de courbure est particulièrement significatif sur la cinétique dans les premiers instants du développement, la vitesse croissant progressivement, et le régime en $v \sim 1/\sqrt{t}$ n'étant retrouvé que pour des durées de croissance, t , de 10 s à 100 s, à la différence de l'évolution déterminée initialement, sans effet de courbure. Également, les rayons finaux des précipités apparaissent plus réduits (Fig. 8 et 9 de [Gui17]).

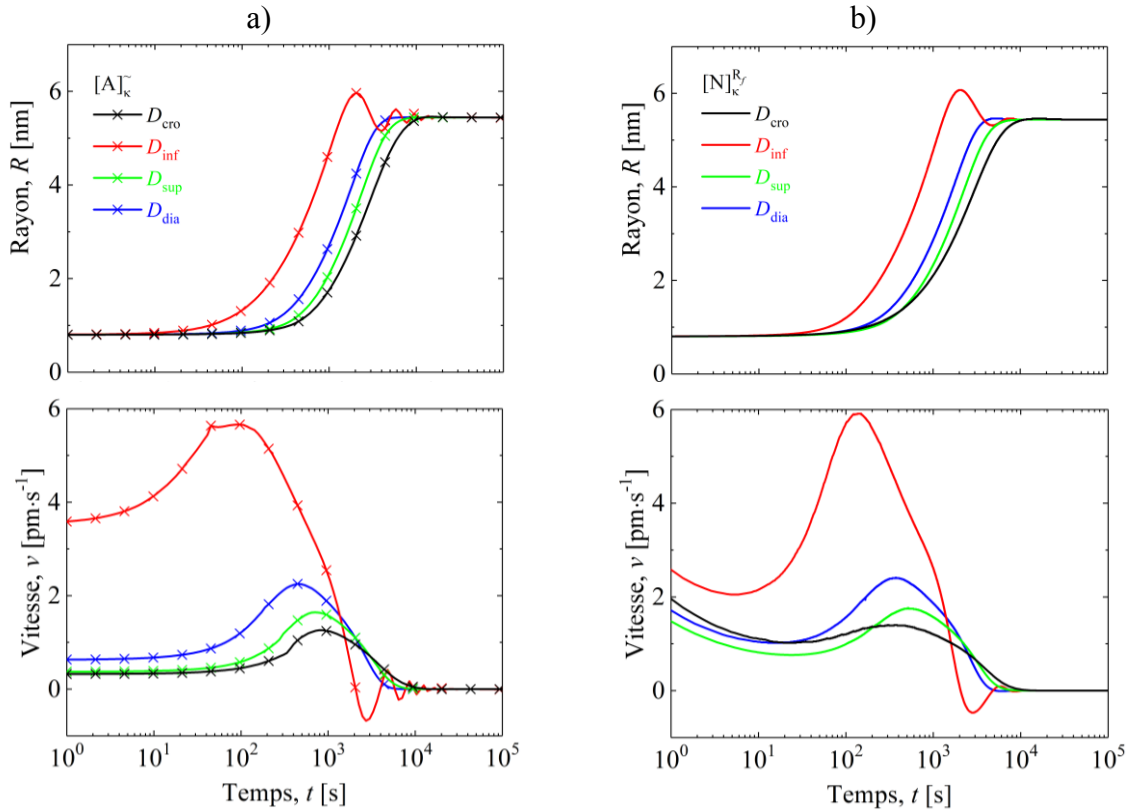
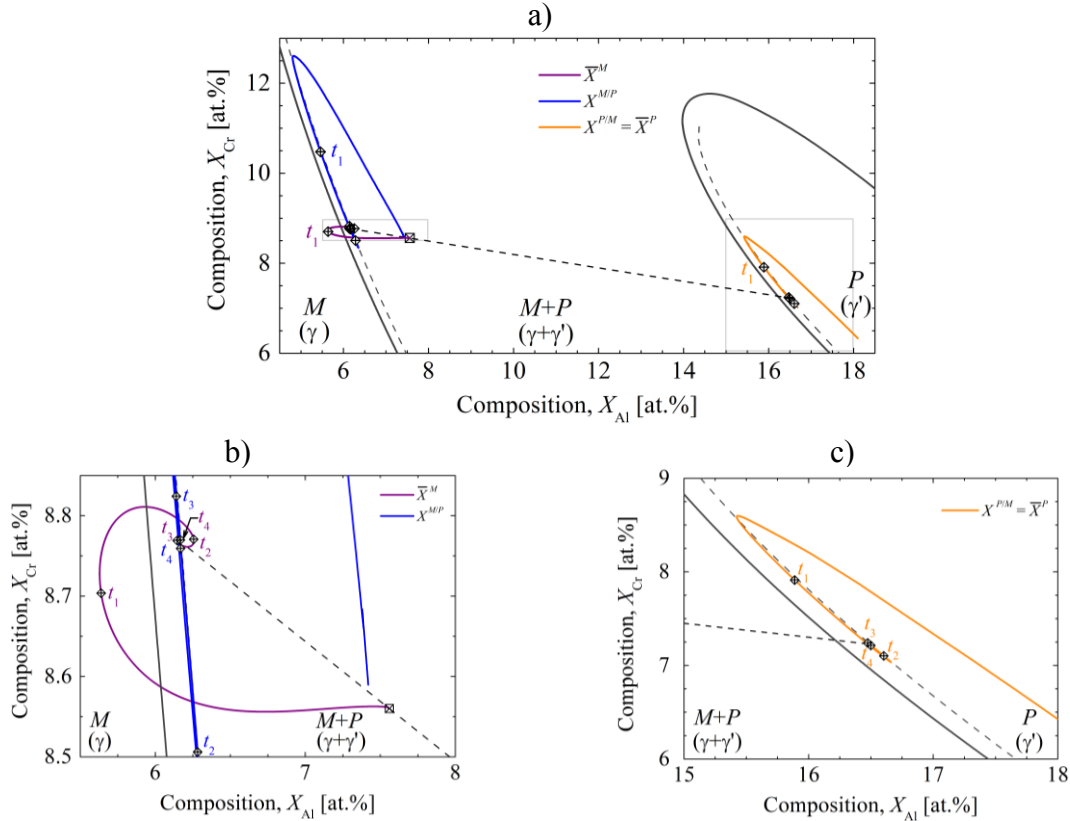


Fig. 6.9 : Evolution temporelle des (haut) rayons et (bas) vitesses de croissance des précipités γ' développés dans la phase γ , pour les quatre matrices de diffusion considérées (Tab. 6.1) (Alliage Ni-7.56 at.% Al-8.56 at.% Cr, traitement isotherme à 600 °C et $R_f = 10.61$ nm) avec considération de la courbure. Les approches a) analytiques (solution intégrative - PYMIAN) et b) numérique (méthode en suivi de front - PYMIFT), sont appliquées [Gui17].

Ces observations illustrent l'influence de l'effet de Gibbs-Thomson et, encore plus particulièrement, la nécessité de l'intégrer dans les modèles de croissance, appuyé par un couplage thermodynamique. Pour la matrice de diffusion $\mathbf{D}_{inf}^M$ (Tab. 6.1), on retrouve également, clairement, le caractère oscillant discuté, alternant régimes de croissance et de dissolution. Ainsi, la cinétique de croissance rapide initiale amène le précipité à dépasser son rayon d'équilibre ($R_{|t \rightarrow +\infty} = 5.44 \text{ nm}$) avec une composition, à $r = R_f$, supérieure à la composition interfaciale. Cette situation amène à avoir une force motrice négative, inversant le signe de λ' , et conduisant à la dissolution partielle du précipité ($v < 0$) avec un rayon légèrement inférieur au rayon d'équilibre. Par la suite, le régime s'inverse, et le précipité croît à nouveau, montrant ensuite une alternance des régimes de développement. Ces résultats sont rendus visibles sur la vidéo en *Supplementary Material* [Gui17]. Au bilan, les deux simulations (Fig. 6.9 a-b) se révèlent extrêmement similaires, validant les modèles de croissance et démarches numériques de résolution. Seul le régime de diffusion $\mathbf{D}_{inf}^M$, de cinétique élevée, se révèle légèrement différent entre les approches déterminées des outils PY\MIAN et PY\MIFT.

Une analyse plus approfondie a été proposée pour discuter des évolutions temporelles des compositions interfaciales pour la solution PY\MIFT ($[N]_{\kappa}^{R_f}$), avec prise en considération de l'effet de Gibbs-Thomson (figure 6.9 b) et en lien avec les processus de croissance \ dissolution mis en évidence dans les cinétiques rapides observées pour $\mathbf{D}_{inf}^M$. Les flux de diffusion d'espèces ont, ainsi, été suivis (Fig. 11 [Gui17]), ceux-ci s'égalisant de part et d'autre de l'interface (*i.e.* $\varphi_i^{P/M} = \varphi_i^{M/P}$ avec $i \in \{\text{Al}, \text{Cr}\}$), pour les deux espèces d'addition, Al et Cr, lors des changements de régimes ($v = 0$ ou R extrémal) dans un processus oscillatoire amorti clairement mis en évidence. Comme montré en figure 6.10, les compositions de départ sont particulièrement éloignées, en raison de l'effet de courbure, des valeurs d'équilibre. De même, les compositions finales se détachent des lignes d'équilibres tracées à $\kappa = 0$, pour s'appuyer sur les lignes décalées par l'effet de courbure. On note, enfin, que les conodes interfaciales, apparaissent particulièrement éloignées de la composition nominale dans le cycle de croissance, amenant à avoir, à $t \simeq 775 \text{ s}$, $\mathbf{X}^{M/P} = (4.8, 12.6) \text{ at. \%}$ et $\mathbf{X}^{P/M} = (15.5, 8.6) \text{ at. \%}$. Cependant, ce point ne correspond pas à la vitesse de croissance maximale observée, qui est rencontrée à $t \simeq 144 \text{ s}$. De même, on met en évidence, ici, les faibles évolutions en chrome dans la matrice ($\bar{X}_{Cr}^M$), durant l'ensemble du cycle d'évolution, alors que les compositions en aluminium varient de manière plus notable ($\bar{X}_{Al}^M$) (figure 6.10 b). Enfin, des inversions des flux de composition à l'interface sont mis en évidence (Fig. 11 [Gui17]) dont l'origine est visible en figure 6.10, à travers la position des compositions interfaciales en aluminium et chrome par rapport aux compositions moyennes de la matrice. Le mécanisme de diffusion croisée, lié aux termes non-diagonaux de $\mathbf{D}_{inf}^M$ peut, cependant, rendre cette analyse plus complexe. On notera, également, le mouvement d'ensemble des compositions et le caractère 'spiralé' de la composition moyenne de la matrice, avant qu'elle ne se stabilise à $\mathbf{X}_{eq}^M$ donnée par le diagramme de phases. Ces évolutions d'ensemble, particulièrement complexes, sont ici, clairement rendues visibles par les outils PY, dans le cadre de la croissance d'une phase précipitante en régime instationnaire, et en intégrant autant les effets de courbure que de diffusion croisée.



iii. Cinétique de croissance dendritique

► Contexte d'étude

Nous avons montré comment de premiers outils développés dans PhysalurgY, couplés aux calculs d'équilibres thermodynamiques, nous ont permis de suivre la croissance de phases dans un alliage, ce modèle ayant été appliqué au suivi de la formation de précipités [Gui17] et, précédemment, de grains globulitiques [Gui15]. Cependant, ces structures, de morphologie régulière, sont rencontrées dans des régimes où l'interface se développe de manière stable, sans perturbation, ou si celles-ci sont progressivement atténuées, ramenant l'interface à sa morphologie initiale. On pourra, dans cet esprit, notamment prendre connaissance de l'analyse en stabilité que nous avons proposée [Gui21], qui étend, en régime instationnaire à diffusion croisée, l'analyse précédemment réalisée par Mullins et Sekerka [Mul63] sur les conditions de croissance stable d'une sphère. En ce sens, les structures de solidification se développent plus habituellement sous la forme d'une morphologie dendritique, comme illustré en figure 6.11, du fait des gradients thermiques, G , et vitesse de croissance, v . Nous avons ainsi cherché à développer, dans PhysalurgY, un outil dédié au calcul des cinétiques de croissance de ces structures, dans les alliages industriels, toujours en restant couplé à l'outil Thermo-Calc. Plus généralement, ces développements s'inscrivent dans notre souhait d'étendre les applications de l'outil PhysalurgY à d'autres morphologies de croissance couvrant, au mieux, celles

rencontrées en métallurgie, en lien avec les besoins des projets développés dans l'équipe 2MS. En ce sens, ces travaux sont complémentaires de ceux réalisés dans l'outil PY\KINE [Sen18]. Notre objectif reste, à terme, de mieux prédire et contrôler les propriétés liées aux développements microstructuraux dans les pièces élaborées par solidification.

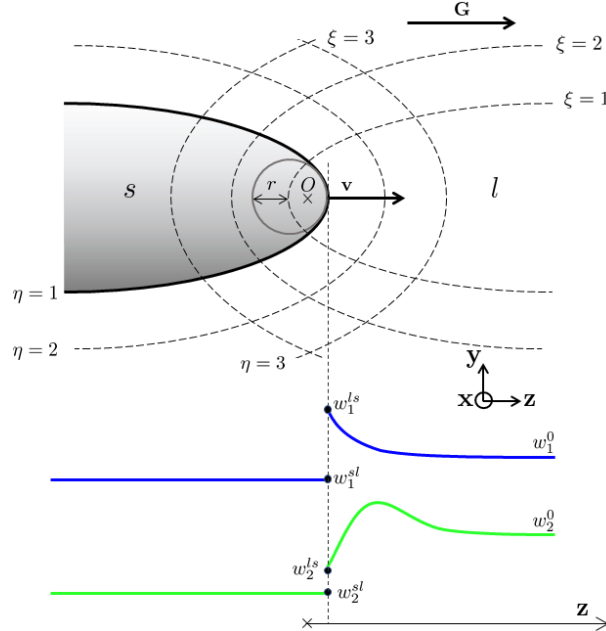


Fig. 6.11 : Dendrite solide paraboloidale, de rayon de courbure r à la pointe, en croissance dans un milieu liquide, à la vitesse v . Les repères paraboloidaux (η, ξ) et cartésiens (x, y, z) sont indiqués. L'origine de ce dernier est définie dans le solide, à la distance $r/2$ de l'interface ($\eta = 1, \xi = 0$). Un gradient de température G , constant et homogène, est imposé dans le système. Les profils de composition schématisés de deux espèces présentes montrent, par leur caractère non-monotone, l'existence d'un mécanisme de diffusion croisée [Gui22].

Les microstructures dendritiques sont, ainsi, couramment observées, industriellement, dans les procédés de coulée, de soudage ou de fabrication additive. Dans ces derniers, ces morphologies sont visibles en figure 5.12 du chapitre précédent. Leur croissance a été, également, modélisée par Camus [Cam23a, Cam23b, Cam23c] dans ses travaux de doctorat. Cette morphologie de croissance, liée à l'impossibilité de maintenir une interface plane en développement, est ainsi rencontrée dans un régime défini par l'encadrement de vitesses suivant, pour un alliage binaire :

$$v_c < v < v_a \quad \begin{cases} v_c = \frac{D G}{\Delta T_0} \\ v_a = \frac{D \Delta T_0}{\kappa \Gamma} \end{cases} \quad (6.7)$$

La vitesse v_c correspond à la déstabilisation du front plan, et est associée au critère de surfusion constitutionnelle [Til53] où D représente le coefficient de diffusion chimique, G le gradient thermique et ΔT_0 l'intervalle de solidification défini comme l'écart entre température de liquidus, T_L , et solidus, T_S . Cette vitesse seuil correspond à l'impossibilité de garder stable une interface de croissance plane, la longueur de diffusion thermique, $\Delta T_0/G$, dépassant celle de diffusion solutale, D/v . À l'opposé, la vitesse v_a est celle de stabilité absolue (i.e. *restabilisation*). Elle provient de l'analyse approfondie menée par Mullins et Sekerka [Mul64], à grande vitesse, et est liée à la longueur de capillarité, $\Gamma\kappa/\Delta T_0$, définie par l'effet de Gibbs-Thomson, qui vient dépasser la longueur de diffusion solutale. Ces analyses ont par la suite

conduit à différents développements, améliorant et étendant ces critères [Tri86, Coa68, Bob88]. Ces deux vitesses, particulièrement importantes dans leur définition, seront rediscutées dans la suite de la section, au regard des améliorations apportées à leur estimation. L'étude de la croissance des structures dendritiques, et des conditions adoptées dans leur développement, ont, précédemment, fait l'objet de nombreux travaux, théoriques, numériques ou expérimentaux, rappelés dans [Gui22]. On les trouvera détaillés dans les ouvrages spécialisés [Dan09] ou dans les articles dédiés, et notamment le travail de revue historique de Kurz *et al.* [Kur19, Kur21].

À l'origine, on peut rappeler l'observation expérimentale de Papapetrou [Pap35] établissant le caractère parabolique adopté par la pointe dendritique dans son développement. Dans cette hypothèse, il est permis de trouver une expression analytique pour définir le profil de composition solutale dans le milieu liquide supposé semi-infini, devant la pointe, en s'appuyant sur les coordonnées paraboloidales (Fig. 6.11). Cette pointe en croissance est également considérée isotherme et en régime de croissance stationnaire. Dans ces conditions, la sursaturation dendritique, $\Omega = (w^{ls} - w_0)/(w^{ls} - w^{sl})$ est dépendante du nombre de Péclet solutal, $Pe = r v / (2 D)$, par l'intermédiaire de la relation d'Ivantsov [Iva47]. D définit ainsi le coefficient de diffusion solutale des espèces chimiques. w^{ls} (resp. w^{sl}) représente la composition liquide (resp. solide) à la pointe dendritique, devant le front, croissant dans un liquide de composition w_0 . La pointe se caractérise par son rayon de courbure, r , et sa vitesse de croissance, v (Fig. 6.11). L'extension et la généralisation du modèle de diffusion solutale dans un milieu semi-infini en régime de diffusion croisée a été proposé par Hunziker [Hun00].

Cependant, ces différentes résolutions se révèlent, comme on le voit, insuffisante pour déterminer de manière unique les conditions de développement, seul le produit $r v$ étant connu, pour une température de croissance, T , et un ensemble de composition, $\mathbf{w}_0$, imposés. Par la suite, différentes solutions ont été proposées pour définir, de manière unique, cette solution. La proposition de Langer et Müller-Krumbhaar [Lan78] s'est imposée, confortée par sa comparaison aux résultats expérimentaux, à travers le principe d'un '*critère de stabilité marginale*'. Dans ce dernier, la pointe est considérée croître avec un rayon, r , proche de la longueur d'onde minimale, λ_{min} , déstabilisant un front plan se développant dans les mêmes conditions, cette dernière valeur ayant été précédemment estimée par Mullins et Sekerka [Mul64]. Par la suite, ce critère a été rapporté sous la forme d'une constante de stabilité, $\sigma^* = (2 \pi)^{-2}$. La théorie de la micro-solvabilité [Azi82] a ensuite permis de corriger et enrichir cette analyse, et à amener à la définition d'une constante de sélection σ . Cette dernière évolue ainsi en $\varepsilon^{7/4}$ où ε représente le degré d'anisotropie d'énergie interfaciale à la pointe dendritique [Dan09] nécessaire à sa déstabilisation. Elle conduit à relier les paramètres, précédemment mentionnés, sous la forme de la relation $(r/\lambda_{min})^2 = \sigma^*/\sigma$. Une approche de résolution formalisée, couplant la solution d'Ivantsov et le critère de stabilité marginale a ensuite été proposée par Kurz [Kur86a], formant l'approche KGT, avec une extension à la solidification rapide. D'autres approches ont été proposées parallèlement, enrichissant les modèles de croissance dendritique, et les conditions d'étude de leur cinétique, telles les approches LGK [Lip84] ou LKT [Lip87]. Le modèle proposé par Hunziker [Hun00] est venu considérablement enrichir les conditions d'étude et d'analyse, en déterminant les cinétiques de développement des pointes dendritiques dans les alliages multicomposés, contenant $N - 1$ espèces d'addition, et en intégrant, parallèlement, les effets de diffusion croisée de ces espèces.

► *Modèle proposé*

Les modèles et approches mentionnées précédemment ont été appliquées, fréquemment, à l'étude de la solidification d'alliages simples, décrits sous la forme de diagrammes linéarisés reconstruits [Ker00], multilinéarisés [Bob88], ou approchés par de simples relations polynomiales, décrivant les propriétés des diagrammes de phases exploités [Kur86a] (i.e. coefficient de ségrégation, k , et pente du liquidus, m). De même, ces propriétés ont pu être associées à des diagrammes de phases binaires, à la seule fin de reconstruire un diagramme multicomposé [Gan93]. On doit noter que des approches couplées aux calculs d'équilibre CALPHAD ont pu être proposées précédemment [Gil96, Zha04] mais sont restées confinées aux alliages ternaires. Dans le cadre de notre développement, dans la librairie PhysalurgY, de l'outil PY\KIND, nous nous sommes intéressés à proposer un modèle de cinétique de croissance dendritique, couplé aux calculs des équilibres thermodynamiques interfaciaux, et adapté aux alliages multicomposés d'intérêts industriels, en revenant sur le cadre de résolution formel proposé par Hunziker [Hun00]. Le modèle développé dans PY\KIND se base, ainsi, sur une relecture attentive et critique de l'approche de Hunziker, et une réécriture de l'ensemble des étapes pouvant être déduites d'une résolution thermodynamique. La méthode de résolution que nous proposons se trouve détaillée dans la section 2.1 de [Gui22], ainsi que les hypothèses faites, amenant à exprimer, analytiquement, l'ensemble des équations à résoudre. La pointe dendritique d'étude se développe de manière stationnaire, à une température T , dans un gradient thermique G (Fig. 6.11). Les équations associées au mécanisme de diffusion solutale et au critère de stabilité marginal définissent, ainsi, le système à résoudre, tel que précisé ci-après.

○ Diffusion solutale

La solution proposée par Hunziker est obtenue, en couplant la résolution de l'équation de diffusion solutale dans le liquide, en régime de diffusion croisée, et le bilan de conservation interfaciale des $N - 1$ espèces d'addition. Elle relie, ainsi, les compositions interfaciale et nominale (Fig. 6.11) sous la forme de l'équation (6.8). *Mutatis mutandis*, il s'agit d'une démarche de résolution similaire à celle qui a pu être entreprise dans la section précédente pour la croissance d'une structure 1D, à travers la résolution du système posé en Eq. (6.2).

$$w_i^{ls} = w_i^0 + \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-1} (w_k^{ls} - w_k^{sl}) U_{ij} U_{ij}^{-1} \text{Iv}(Pe_j) \quad (6.8)$$

où Pe_j est le nombre de Péclet associé à l'indice j , défini par $Pe_j = r v / (2 B_j)$ où B_j est la $j^{\text{ème}}$ valeur propre de la matrice de diffusion en phase liquide, $\mathbf{D}$, associée au vecteur propre $\mathbf{U}_j$ de composante U_{ij} . On peut noter que, dans un régime de diffusion diagonale, cette expression (6.8) retrouve les solutions habituelles d'Ivantsov [Dan09]. Cette expression illustre une première idée du couplage réalisé avec Thermo-Calc à travers PY\KIND, tel qu'il est détaillé dans la figure 2 de [Gui22]. Ainsi, les valeurs de composition interfaciale w_k^{ls} et w_k^{sl} sont en équilibre thermodynamique et associées à une même conode, à la température de travail T , de la même manière que cela avait pu être discuté en équation (6.4). En complément, la matrice de diffusion $\mathbf{D} = D_{ij}$ ($1 \leq i, j \leq N - 1$) est déterminée préalablement par appel à l'outil Thermo-Calc, en exploitant les bases de données en mobilité de l'alliage d'étude.

○ Critère de stabilité

L'analyse en stabilité [Mul64], étendue par Hunziker en régime de diffusion croisée, dans le domaine de possible existence d'une solution ($v_c < v < v_a$), amène à une expression enrichie de la longueur d'onde déstabilisante minimale, λ_{min} . Le critère de stabilité marginal, appliqué au régime de développement étudié, approxime r par λ_{min} . La solution est obtenue par une analyse de la cinétique de développement d'une instabilité sur un front plan en croissance :

$$\frac{\dot{\delta}}{\delta} = v \omega \frac{\kappa^s + \kappa^l}{\kappa^s G^s - \kappa^l G^l} \left(\sum_{i=1}^{N-1} m_i \sum_{j=1}^{N-1} U_{ij} F_j - \Gamma \omega^2 - \bar{G} \right) \quad (6.9)$$

δ et $\dot{\delta}$ représentent l'amplitude de la perturbation du front plan et sa dérivée temporelle. ω est la pulsation de l'onde perturbatrice ($\omega = 2\pi/\lambda$). κ^s et κ^l sont les conductivités thermiques des phases solide et liquide respectivement, dont les gradients thermiques sont donnés par G^s et G^l . $\bar{G}$ est le gradient thermique moyen entre les deux milieux. Les hypothèses simplificatrices habituelles amènent souvent à considérer $G^s = G^l = \bar{G}$. Ainsi, le critère de stabilité marginale amenant à considérer que la croissance se réalise dans les conditions où $\dot{\delta}/\delta \simeq 0$, l'équation (6.9) conduit à rechercher la solution, $\lambda_{min} = 2\pi/\omega$ de l'équation (Eq. (5) de [Gui22]) :

$$\sum_{i=1}^{N-1} m_i \sum_{j=1}^{N-1} U_{ij} F_j - \Gamma \omega^2 - \bar{G} = 0 \quad (6.10)$$

Les termes m_i ($1 \leq i \leq N-1$) représentent les pentes du liquidus, pour les $N-1$ espèces d'addition, relatives aux compositions w_i^{ls} de la pointe (Eq. 6.11 a). Γ est le coefficient de Gibbs-Thomson. Le détail de l'estimation des grandeurs F_j ($1 \leq j \leq N-1$) se retrouvera dans les équations (7-11) de la section 2.1 de [Gui22], et, en particulier, leur dépendance aux coefficients K_{ij} ($1 \leq i, j \leq N-1$) (Eq. 6.11 b). Ces derniers constituent la matrice de partition à estimer par calcul thermodynamique, dans les conditions de croissance de la pointe :

$$m_i = \left. \frac{\partial T}{\partial w_i^{ls}} \right|_{w_j^{ls}, j \neq i} \quad \forall i \in \{1, N-1\} \quad (6.11 \text{ a})$$

$$K_{ij} = \left. \frac{\partial w_i^{sl}}{\partial w_j^{ls}} \right|_{w_k^{ls}, k \neq j} \quad \forall (i, j) \in \{1, N-1\} \quad (6.11 \text{ b})$$

Les termes K_{ij} représentent l'effet, à l'interface s/l , d'une variation de composition liquide, w^{ls} , sur la composition solide, w^{sl} , le long de la surface du liquidus. Ces termes, initialement constants dans [Hun00], sont exprimés, pour la première fois, dans ce travail [Gui22], sous une forme généralisée, rigoureuse et dédiée à la détermination des cinétiques de croissance dendritique. Pour un diagramme de phase multilinéarisé, tels ceux investigués par Hunziker [Hun00], ces termes se confondent avec les coefficients de ségrégation usuels amenant aussi à $K_{ij} = 0$ si $i \neq j$. Dans nos cas d'étude, nous nous plaçons volontairement dans la situation la plus générale afin de tenir compte de l'ensemble des facteurs influençant la cinétique dendritique. Nous avons cependant pu valider, régulièrement, notre modèle au regard d'expressions plus immédiates associées à des diagrammes simplifiés, notamment linéarisés.

○ Equilibre thermodynamique

En complément des relations précédentes fixant, à température donnée, T , les conditions de croissance de la pointe, il est aussi nécessaire que cette température soit en accord avec les valeurs de composition interfaciale, c.a.d. à l'équilibre thermodynamique. De manière similaire aux équations (6.4), nous devons respecter les équations (6.12), en considérant aussi l'excès d'énergie de Gibbs, ΔG_κ^s , lié à la courbure interfaciale, $\kappa = 2 \Gamma/r$ (Eq. 15-17 dans [Gui22]):

$$T = F_L(\mathbf{w}^{ls}, \Delta G_\kappa^s) \quad (6.12 \text{ a})$$

$$\mathbf{w}^{sl} = F_{ws}(\mathbf{w}^{ls}, \Delta G_\kappa^s) \quad (6.12 \text{ b})$$

Enfin, la température T définit la surfusion de croissance de la pointe dendritique, assimilée à sa force motrice de croissance, se décomposant en les contributions de surfusion de courbure, ΔT_κ , et de surfusion chimique, ΔT_χ données en Eq. (14a-c) et résumées ici :

$$\Delta T = T - T_L = F_L(\mathbf{w}^{ls}, \Delta G_\kappa^s) - F_L(\mathbf{w}^0, \Delta G_\kappa^s = 0) = \Delta T_\kappa + \Delta T_\chi \quad (6.13)$$

Le modèle développé dans PY\KIND, que nous avons pris le temps de décrire ici, propose, en conséquence, une réécriture de l'approche de résolution, à travers l'introduction, sur les étapes pertinentes, des calculs thermodynamiques supplémentaires, nécessaires pour travailler au plus près des propriétés réelles des alliages d'étude. Ce couplage thermodynamique est illustré sur l'algorithme donné à la figure 2 [Gui22]. Il porte ainsi sur le calcul préalable de la matrice de diffusion en phase liquide, $\mathbf{D}$, et, à chacune des itérations de résolution, de la détermination successivement des grandeurs suivantes :

- Le volume molaire de la phase solide, V_M
- Les compositions solides, $\mathbf{w}^{sl}$, au regard des compositions liquide $\mathbf{w}^{ls}$ (Eq. 6.12 b)
- La température de pointe, T , au regard des compositions liquide, $\mathbf{w}^{ls}$ (Eq. 6.12 a)
- Les différentes composantes de la surfusion de croissance ΔT (Eq. 6.13)
- Les pentes de la nappe de liquidus (Eq. 6.11 a), $\mathbf{m}$, et les coefficients de la matrice de partition, $\mathbf{K}$ (Eq. 6.11 b).

Ces différents calculs sont ainsi réalisés par appel à l'outil Thermo-Calc, pour une vitesse de croissance v donnée, jusqu'à convergence sur la valeur estimée du rayon de la pointe dendritique, r . Dans cette dernière situation, les températures et compositions de travail de la pointe dendritique sont déterminés parallèlement. En complément de ces termes, il est important de noter que nous avons également étendu les expressions des vitesses critiques de déstabilisation, v_c , et de stabilité absolue, v_a au régime de diffusion croisée investigué. Les démarches de résolution sont également données en section 2.1 de [Gui22] avec les expressions mathématiques obtenues et les conditions de leur calcul. Si l'expression analytique de v_c (Eq. (19) [Gui22]) en régime de diffusion croisée avait déjà été proposée par Hunziker [Hun00], il est important de noter que la vitesse de stabilité absolue, v_a , a été estimée analytiquement (Eq. (23) [Gui22]), pour la première fois, dans ce même régime d'étude, à travers le calcul de $\mathbf{K}^{-1}$.

► *Applications sur un alliage industriel*

Ce modèle a été appliqué, par la suite, dans le cadre d'intérêt visé, correspondant à la solidification d'alliages industriels (section 3 [Gui22]). En particulier, notre choix s'est arrêté sur le superalliage base nickel Inconel IN718 (cf. Table 1 [Gui22]). Ce choix est expliqué par l'utilisation large de cet alliage dans différents procédés industriels, notamment en FA [Li17, Kay20], et notamment ceux destinés à la réalisation de pièces aéronautiques [Dha22]. D'autres travaux menés parallèlement, sur cette même nuance, également pour des applications FA [Que20, Que21, Cam23b] (cf. chapitre précédent) ont encouragé ce choix. Parallèlement, nous avons comparé, dans ce même travail [Gui22], les résultats obtenus de cas de référence, aux approches simplifiées de la littérature mentionnées précédemment (section 4 [Gui22]).

Les appels à la librairie Thermo-Calc [The23a] dans l'outil PY\KIND se sont réalisés à travers l'exploitation des bases de données thermodynamiques TCNI10 et de mobilité MOBNI5, dont on trouvera une présentation des dernières versions sur [The23c]. Cependant, ces applications montrent une première difficulté, connue, à définir certaines propriétés non renseignées, notamment l'énergie interfaciale solide/liquide, γ , influente sur nos résultats à travers les termes de ΔG_k^s (Eq. 6.12), et dont l'estimation reste toujours délicate. Comme nous en discutons, les valeurs rapportées dans la littérature sont dispersées entre $0.18 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ et $0.382 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$, nous amenant à faire le choix de $\gamma \simeq 0.37 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$, valeur proposée et défendue par Wheeler *et al.* [Whe92].

La figure 6.12 a) présente l'évolution du rayon de courbure à la pointe dendritique calculée selon la vitesse de croissance, pour un régime étendu de vitesse, allant d'une solidification lente de $\sim 1 \mu\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ à des régimes associés au domaine de la fabrication additive à $\sim 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Le régime en $r \sim 1/\sqrt{v}$ est retrouvé sur une large partie du domaine, en lien avec le critère de stabilité marginale (Eq. 6.10). On retrouve à faible vitesse ($v \rightarrow v_c = 0.3441 \mu\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$), une remontée rapide du rayon, traduisant le changement progressif d'un régime de croissance en front plan, au solidus ($T = T_s$), vers un régime dendritique. À l'opposée, à forte vitesse ($v \rightarrow v_a = 4.379 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), les effets de capillarité amènent à restabiliser la pointe qui adopte un grand rayon, avant que le régime de croissance planaire, à $T = T_s$, ne soit retrouvé. La figure 6.12 b) traduit l'évolution de la surfusion de croissance, ΔT , sur l'ensemble des vitesses d'études, et indique la part associée à la surfusion de courbure. On retrouve une évolution continue et progressive de la cinétique de croissance avec cette surfusion. Une corrélation en loi puissance est également proposée, évoluant de manière régulière et permettant de retrouver le comportement attendu. Ces expressions présentent, bien évidemment, l'intérêt fort de pouvoir être exploitées dans des modèles automates cellulaires pour réaliser le suivi de la croissance des structures de grain et déterminer une microstructure finale [Cam23a].

On pourra noter le fort coefficient de la loi puissance trouvé ici, habituellement plus réduit dans les expressions de corrélation rapportées dans la littérature pour ce même alliage IN718 ($v = 2.2 \cdot 10^{-3} \Delta T + 1 \cdot 10^{-4} \Delta T^2 + 1 \cdot 10^{-4} \Delta T^3$ [Koe18], $v = 1 \cdot 10^{-4} \Delta T^2$ [Koe19], $v = 1.691 \cdot 10^{-7} \Delta T^2 + 4.148 \cdot 10^{-7} \Delta T^3$ [Gan94b]). Ces dernières expressions montrent, de même, les écarts évidents que des lois de croissance, pourtant exploitées dans l'étude des procédés FA [Koe18, Koe19], présentent avec la corrélation déterminée ici, basée sur un modèle couplé thermodynamiquement. En ce sens, ces expressions révèlent également les

imprécisions qui peuvent être commises par l'exploitation de lois mal définies pour modéliser et simuler les évolutions microstructurales en FA, ce qui amène, certainement à, des conséquences néfastes sur la prédiction de la texture finale des microstructures. Il est à noter que des corrélations sommatoires pourraient être proposées à l'image de [Koe18], améliorant les estimations de cinétiques de croissance. L'exploitation des résultats présentés à la figure 6.12 b) permet, également, de déterminer le coefficient de Gibbs-Thomson de l'alliage IN718, à travers la corrélation des évolutions de la surfusion de courbure (courbe grise) en $\Delta T_\kappa \simeq \Gamma \kappa$, où la courbure, κ , est donnée par $2/r$, (Fig. 4b [Gui22]) conduisant à $\Gamma = 3.355 \cdot 10^{-7} \text{ K} \cdot \text{m}$. Cette valeur, particulièrement stable au regard du large domaine de cinétique de croissance étudié, constitue ainsi une estimation précise de ce coefficient, habituellement complexe à estimer, à tout le moins pour une valeur de l'énergie interfaciale γ constante, dont l'estimation elle-même peut sembler délicate, comme discuté précédemment, et également dans [Gui22].

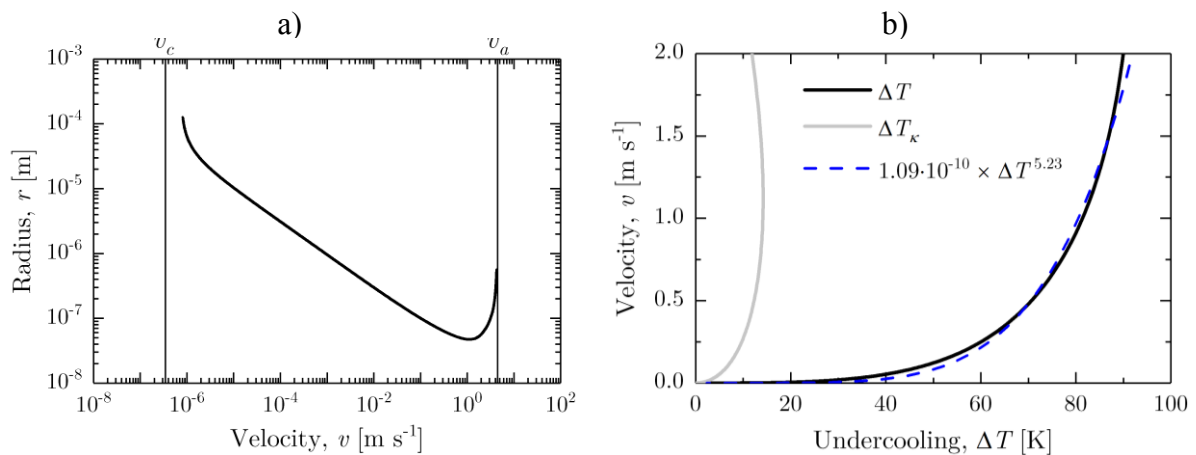


Fig. 6.12 : Cinétique de croissance dendritique calculée avec PY\KIND (alliage IN718). a) Evolution du rayon de courbure de la pointe selon la vitesse, v . Les vitesses de déstabilisation, v_c , et restabilisation, v_a , sont reportées sous la forme des lignes verticales. b) Evolution de la vitesse selon la surfusion de croissance totale à la pointe dendritique, ΔT , (ligne pleine) avec la contribution de courbure, $\Delta T_\kappa = 2 \Gamma / r$ (ligne grise). Une corrélation en loi puissance des données ($\Delta T, v$) est proposée sous la forme de la ligne bleue pointillée [Gui22].

En complément de l'étude précédente, une analyse a été proposée des compositions solutales en cours de croissance. La figure 6.13 a) montre, ainsi, le coefficient de ségrégation et son évolution selon le régime de vitesse. Ainsi, si les coefficients sont proches des valeurs déterminées au liquidus, T_L , à faible vitesse, des écarts importants sont ensuite observés, notamment pour l'espèce carbone. Cet effet est dû à l'évolution en température de la pointe, et aux modifications de la conode de travail, déterminée précisément par le couplage thermodynamique. Il est important de préciser que les effets cinétiques (trainage \ piègeage de soluté [Har22, Mar23]) n'ont pas été considérés à ce stade dans ce modèle, et n'expliquent pas ces évolutions. Comme nous le rappelons et précisons dans [Gui22], il serait, ainsi, incorrect que les évolutions de ces coefficients rapportées dans la littérature soient interprétées comme des effets cinétiques quand les simples changements de température de travail de la pointe suffisent à les expliquer. Ces évolutions montrent, également, l'erreur qui serait commise, au moins pour certaines espèces, à exploiter des diagrammes de phases linéarisés, au regard des résultats reportés en figure 6.13 a), et figure 5 b) dans [Gui22]. Cette approche est, cependant, fréquemment retrouvée dans la littérature. En ce sens, les outils développés dans PhysalurgY, tel que PY\KIND, démontrent tout leur intérêt.

Les profils de composition, tracés pour différentes espèces (Fig. 6.13 b), correspondent aussi à des évolutions d'intérêt. Ces courbes sont en lien avec celles montrées en figure 6.13 a) et révèlent pour les espèces i ségrégeant négativement ($k_i < 1$), (resp. positivement ($k_i > 1$)) un enrichissement (resp. un appauvrissement) à l'interface, au regard de la composition nominale. Le profil, en conséquence, montre une décroissance (resp. une croissance) progressive de la composition jusqu'au retour à la composition nominale. L'évolution des courbes est directement liée à l'importance des valeurs de k_i . On pourra noter le profil non monotone de composition de l'espèce aluminium, conséquence des effets de diffusion croisée marqués. Ces profils sont, aussi, à la vitesse élevée d'étude ($v = 0.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), influencés par les effets de courbure, modifiant la position des conodes, illustrant cet effet qui avait pu déjà être discuté dans le travail précédent (PY\MIAN et PY\MIFT) autour de la précipitation.

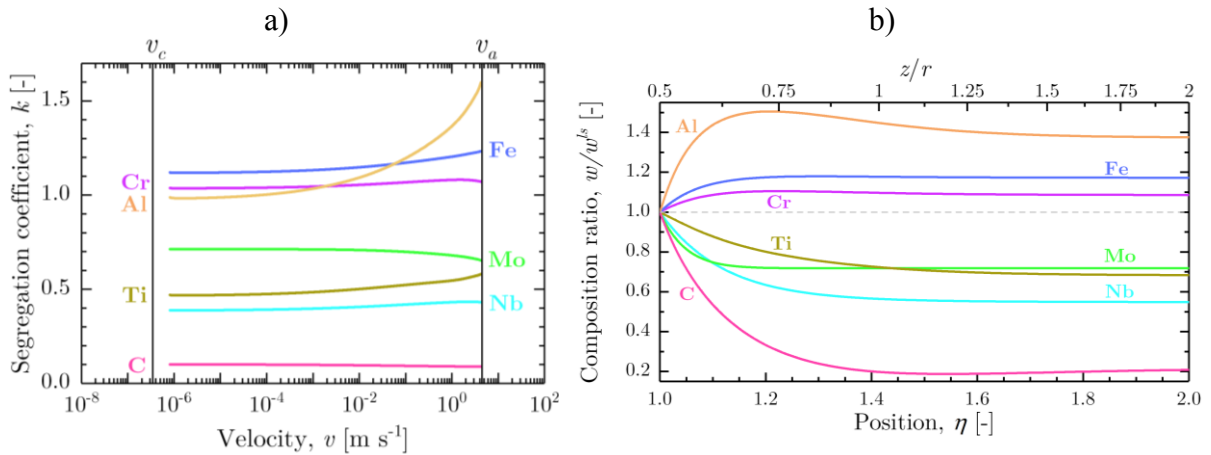


Fig. 6.13 : Cinétique de croissance dendritique calculée avec PYKIND (alliage IN718). a) Evolution du coefficient de ségrégation, $k_i = w_i^{sl}/w_i^{ls}$, selon la vitesse de croissance pour les sept espèces d'addition. b) Profil de composition relative devant la pointe en croissance pour une vitesse élevée de $0.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Les valeurs représentent, pour chaque espèce i , le ratio entre sa composition locale dans le liquide, w_i , et sa composition interfaciale w_i^{ls} . Les valeurs sont renseignées selon la coordonnée paraboloidale η (Fig. 6.11) [Gui22].

Les développements réalisés précédemment ont permis de proposer une méthodologie efficiente de suivi de la croissance dendritique, en solidification. Cette approche, s'est basée sur les propriétés les plus exactes des alliages, déduites des calculs d'équilibres thermodynamiques, et en limitant, en conséquence, les hypothèses *simplificatrices*, telles qu'elles avaient pu être formulées dans la démarche de résolution de Hunziker [Hun00] et son application à un alliage ternaire. Il est apparu, ainsi, intéressant de pouvoir comparer les prédictions de notre modèle de croissance (Fig. 6.12) aux résultats de ces approches plus habituelles de la littérature, telles celles basées sur l'exploitation de diagrammes de phases linéarisés, reconstruits à partir – notamment – des propriétés de l'alliage à son liquidus. Le tableau 4 de [Gui22] détaille six approches retrouvées dans la littérature et dont les résultats sont discutés. Ainsi, une analyse des écarts observés entre ces approches et les résultats du modèle PYKIND a été développée dans la partie discussion de [Gui22]. Ces méthodologies de résolution correspondent à des applications de l'outil PYKILI, et se veulent des simplifications de certaines des étapes de résolution du modèle PYKIND (suppression des étapes bleues dans la figure 2 [Gui22] notamment). Elles sont représentatives des approches de résolution rapportées dans la littérature [Kur86a, Wan07, Gal14, Tou20], notamment pour des applications CAFE [Gan93, Che15]. À titre d'exemples, la figure 6.14 présente les résultats de cinétiques

de croissance (courbes pleines) obtenues par l'exploitation d'un diagramme de phases multi-linéaire (Fig. 6.14 a) ou d'un modèle de surfusion cinétique à la pointe dendritique (Fig. 6.14 b), ceci comparativement à la solution PY\KIND (courbes discontinues). La première approche présentée (section 4.1 [Gui22]) exploite une description des propriétés thermodynamiques basée sur un diagramme de phases multi-linéarisés, dont les pentes des espèces, m_i , et coefficients de ségrégation, k_i , ($1 \leq i \leq N - 1$) sont déterminés au liquidus de l'alliage, $T_L(\mathbf{w}_0)$, les valeurs étant détaillées en Tab. 5 de [Gui22]. Sans exploitation des outils Thermo-Calc, la valeur du coefficient de Gibbs-Thomson est également fixée et définie à la valeur précédemment estimée en exploitant PY\KIND.

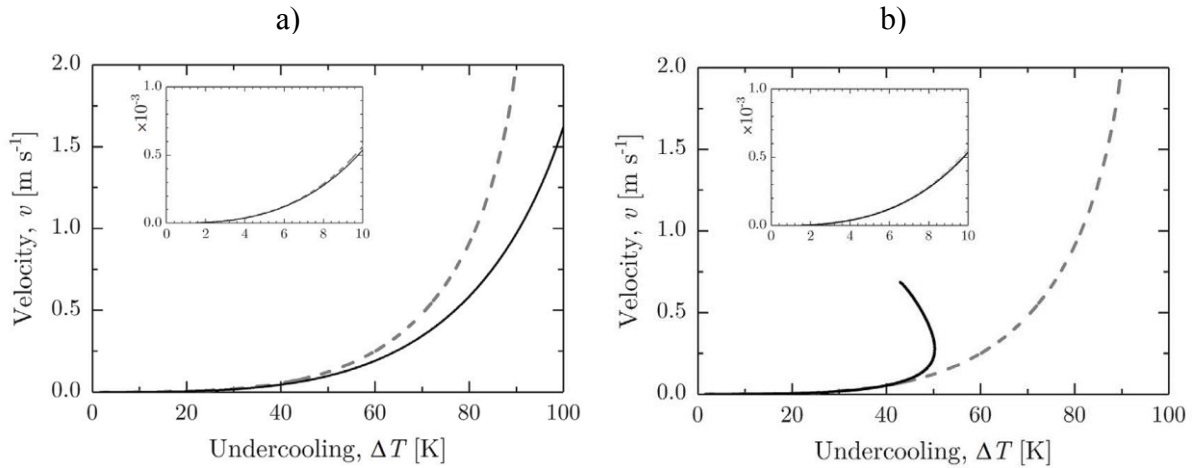


Fig. 6.14 : Cinétique de croissance dendritique calculée avec PY\KILI (alliage IN718) (courbes pleines) comparativement à la solution PY\KIND, développée avec le couplage thermodynamique (courbes discontinues). Evolution surfusion dendritique – vitesse de croissance, avec agrandissement aux faibles vitesses. a) Approche de résolution basée sur un diagramme de phase multi-linéaire (*Multi-linear case*). b) Approche de résolution exploitant une modélisation de l'effet cinétique (*Non-equilibrium interface case*) [Gui22].

On note ainsi (Fig. 6.14 a) un bon accord entre les deux solutions mais seulement à faible vitesse ($v < 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$) lorsque l'approximation reste valable. À forte vitesse, notamment dans les régimes intéressant la fabrication additive, des écarts notables apparaissent, dont l'explication se trouve, en figure 6.13 a), et figure 5 b) dans [Gui22]. En effet, à faible vitesse, les propriétés calculées au liquidus restent pertinentes, la température de travail étant peu écartée du liquidus ($\Delta T < 10 \text{ K}$). À plus fortes vitesses ($v > 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), les écarts de propriétés sur k_i et m_i sont évidentes et l'approximation de linéarisation faite à T_L est incorrecte, amenant à des écarts élevés dans l'estimation des vitesses de croissance.

De manière plus intéressante, la seconde approche présentée (section 4.6 [Gui22]) est une première tentative d'introduire un effet cinétique dans le calcul de la vitesse de croissance dendritique, mais sans couplage Thermo-Calc. Cette correction intéresse surtout les cinétiques de croissance rapide, où cet équilibre n'est plus réalisé, en raison de phénomènes de trainage (*solute drag*) ou de piégeage (*solute trapping*) des solutés. Cependant, seul ce dernier phénomène est considéré ici. Les détails du modèle se retrouvent en [Gui22], et sont essentiellement basés sur les développements de Aziz [Azi82], Boettinger et Coriell [Boe86] et les explications apportées de ces modèles par Kurz [Kur86b]. La description de la surfusion de croissance (Eq. 6.13) se complète, dans cette approche, d'un terme de surfusion cinétique, ΔT_ζ (Eq. 6.14 a), proportionnel à la vitesse de croissance, v . De plus, en faisant l'approximation

d'une solution idéale diluée, les coefficients de ségrégation, k_i^v , et pentes de liquidus, m_i^v , pour les $N - 1$ espèces i , dépendent des valeurs d'équilibre, k_i et m_i (Eq. 6.14 b). L'équation (6.14 a) fait intervenir la valeur d'entropie de fusion, ΔS_f déterminée par Thermo-Calc. Les coefficients de diffusion chimique, D_i^{int} , font référence au transport d'espèce dans l'interface s/l , d'épaisseur δ , en ignorant les effets de diffusion croisée. Le ratio D/δ s'interprète ainsi comme une vitesse de diffusion d'espèces dans cette même interface, notée v^D , sans que les différences de comportement entre ces espèces ne soient, pratiquement, distinguées. La vitesse v_0 est la vitesse maximale à laquelle la cristallisation peut se développer.

$$\Delta T_\zeta = \frac{R T_L}{\Delta S_f} \frac{v}{v_0} \quad (6.14 \text{ a})$$

$$k_i^v = \frac{k_i + \frac{\delta v}{D_i^{int}}}{1 + \frac{\delta v}{D_i^{int}}} \quad \text{et} \quad m_i^v = \frac{1 - k_i^v + k_i^v \ln\left(\frac{k_i^v}{k_i}\right)}{1 - k_i} \quad \forall i \in \{1, N - 1\} \quad (6.14 \text{ b})$$

Comme discuté [Gui22], il est important de noter que v^D autant que v_0 restent très difficilement estimables. Seules d'éventuelles comparaisons à des données expérimentales peuvent permettre de proposer des calibrations ou validations de ces termes, tels le travail entrepris dans [Har22], présenté dans la section suivante, et dans lequel ces grandeurs ont été estimées. De même que dans le cas précédent (Fig. 6.14 a), la figure 6.14 b) montre des écarts réduits avec la solution de référence à faible vitesse. Cependant, à plus forte vitesse, on retrouve des différences marquées et une vitesse terminale, proche de la vitesse absolue de stabilisation du modèle ($v_a = 0.678 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), mais fortement diminuée. Les écarts entre les approches s'observent essentiellement dans la diminution de v_a . Il est à noter que le terme ΔT_ζ contribue peu aux écarts de surfusion observés ($R T_L / (\Delta S_f v_0) \simeq 1.5 \text{ K} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}$), ceux-ci étant essentiellement expliqués par les évolutions des coefficients de ségrégation et pentes du liquidus (Eq. 6.14 b). En particulier, le coefficient de ségrégation tend progressivement vers 1 (*effet de piégeage de soluté \ solute trapping*), mais sans atteindre cette valeur, limitant cependant l'importance des écarts solutaux à la pointe en croissance, et la valeur de ΔT_χ associée. En conséquence, ces évolutions doivent expliquer seuls la diminution de v_a (Eq. 22-23 de [Gui22]) et la transition plus précoce vers un régime de croissance en front plan. Comme nous l'indiquions précédemment, il est, cependant, très important de voir que les coefficients k_i et m_i subissent déjà des variations marquées avant même que l'effet de piégeage de soluté soit à considérer.

iv. Introduction des effets cinétiques

Les développements précédents ont montré l'importance des processus de croissance *hors-équilibre*, rencontrés dans les régimes à grande vitesse de solidification. Dans ces derniers, l'interface se développe à des cinétiques empêchant l'établissement d'un équilibre thermodynamique, lié aux limitations des transports d'espèces à l'interface liquide/solide. En effet, ces transports, notamment par diffusion, à travers l'interface en croissance, de même que la mobilité de l'interface en développement, sont des processus aux cinétiques limitées, qui ont des effets restrictifs sur la vitesse interfaciale, amenant – indirectement – à un écart des compositions interfaciales avec les valeurs d'équilibre. En conséquence, le développement de modèles adaptés à suivre ces évolutions apparaît pertinent, pour déterminer les compositions des phases en présence, et proposer des modèles de microségrégation adaptés aux régimes de croissance rencontrés. Ces études intéressent, bien évidemment, les domaines dans lesquels des cinétiques de croissance rapide sont rencontrées, typiquement supérieures à $v > 1 - 10 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$. Ces derniers sont ceux associés, en premier lieu, à la fabrication additive (FA), que ce soient à travers les procédés DED, L-PBF, WLAM ou WAAM. De manière secondaire, il serait aussi possible de citer les procédés de soudage, en particulier les plus rapides, associés au soudage laser ou par faisceau d'électrons. Les travaux les plus récents rapportés dans la littérature, appliquant ou développant des approches thermodynamiques de calcul hors équilibres, démontrent clairement ces intérêts, comme cela est visible dans les activités de Du *et al.* [Du22], Hariharan *et al.* [Har23] ou Pal et Phillion [Pal22]. Les efforts de la société Thermo-Calc pour intégrer un modèle de croissance hors-équilibre dans le calcul des chemins de solidification Gulliver-Scheil, à travers une correction de leur outil dédié [Hop22, The23j], se voit comme une réponse directe à ces besoins autour de l'amélioration des outils ICME destinés à la FA. Des besoins, encore plus récents, se manifestent aussi dans le cadre de la prédiction des défauts en FA, notamment ceux liés à la fissuration à chaud, comme le montre l'étude de Sargent *et al.* [Sar21].

L'un des principaux modèles rapportés dans la littérature est l'approche de Aziz *et al.* [Azi82, Azi83, Azi88] basée, à l'origine, sur une approche CGM (Continuous Growth Model). Dans le cadre des hypothèses formulées, le soluté est incorporé dans la phase fille, α , à la composition molaire, x^β , de la phase parente, β . Le soluté doit ensuite, pour retrouver la composition molaire de la phase fille, x^α , être désorbé avant de rejoindre cette dernière. Cet effet correspond à un processus de trainage de soluté (*solute drag*). Par la suite, Aziz et Boettinger [Azi94] ont proposé une approche de type *partial drag* dans laquelle la composition interfaciale évolue entre les valeurs des phases parente et fille, et se retrouve définie par un paramètre λ (*solute drag parameter*), fixant la composition molaire effective du soluté à l'interface, x^{eff} , soit :

$$x^{eff} = \lambda x^\beta + (1 - \lambda)x^\alpha \quad (6.15)$$

L'importance du paramètre λ fixe, ainsi, l'intensité des processus de trainage de soluté, entre une valeur de 0 (absence de trainage – *zero drag*) et une valeur de 1 (trainage complet – *full drag*). La croissance de λ montre une adsorption plus importante de soluté à l'interface, réduisant la force motrice de croissance d'autant, en raison de l'énergie nécessaire à désorber

l'écart de composition $x^{eff} - x^\alpha$ pour ramener la composition interfaciale à la valeur de la phase en croissance. De nouveaux modèles de croissance hors-équilibre ont été proposés récemment, enrichissant l'approche et les équations associées de Aziz et Boettinger et redéfinissant le lien entre les valeurs de composition interfaciale et la vitesse de croissance. La partie introductive de [Har22] rappelle, utilement, cet état de l'art. En particulier, les limites des approches de la littérature sont mentionnées. Notamment, les modèles de solidification hors-équilibre ont été, initialement, basés sur des approches théoriques restreintes aux alliages binaires, limitant leur usage dans le cadre d'applications à des systèmes multicomposés d'intérêt industriel. Des solutions, plus récentes, ont été développées pour s'intéresser aux alliages multicomposés, notamment par Du *et al.* [Du22] qui ont cherché à étendre le modèle de Aziz et Boettinger [Azi94] aux alliages contenant plusieurs éléments d'addition, à travers un système d'équations spécifiques dédiées, élargissant l'exploitation des solutions initiales.

Comme indiqué dans [Har22], les modèles de croissance hors équilibre diffèrent par la définition choisie de la composition interfaciale et l'interprétation des deux processus dissipatifs considérés associés, d'une part, à la migration interfaciale et, d'autre part, à la diffusion trans-interfaciale (*à travers l'épaisseur interfaciale*). Le modèle proposé et développé dans nos travaux [Har22] est basé sur cette analyse mais révisé et corrige les approches proposées précédemment [Azi82, Azi83, Azi88, Azi94], en apportant une plus grande cohérence sur la méthodologie mise en œuvre. On retrouvera ce modèle détaillé dans la section 2 de [Har22], s'appuyant sur la description de la situation de croissance illustrée en Fig. 1. Le système est, ici, supposé composé de N espèces, sans hypothèse sur leur importance, et donc sans les considérer diluées dans la matrice. De même, les deux phases ont même volume molaire. De manière résumée, la croissance de l'interface $\alpha \backslash \beta$, définie par $\delta\Omega$, est associée à une vitesse de dissipation d'énergie libre de Helmholtz $\dot{F}$ (W), $\dot{F}_\Omega$, définie, pour le terme surfacique en croissance plane, $\dot{F}_{\delta\Omega}$, par (après réécriture de (12) [Har22]) :

$$\dot{F}_{\delta\Omega} = \int_{\delta\Omega} -\rho_0 \sum_{k=1}^N x_k^{eff} [\mu_k] v + \sum_{k=1}^N [\tilde{\mu}_k] J_k^t dA \quad (6.16)$$

où v représente la vitesse interfaciale de la surface $\alpha \backslash \beta$ se propageant de manière unidirectionnelle, $[\mu_k]$ est l'écart de potentiel chimique, μ , de l'espèce k entre les phases β (mère) et α (fille) ($[\mu_k] = \mu^\beta - \mu^\alpha$) et $[\tilde{\mu}_k]$ est l'écart de la grandeur $[\mu_k]$ entre l'espèce courante et l'espèce '1' supposée majoritaire ($[\tilde{\mu}_k] = [\mu_k] - [\mu_1]$). En revenant sur les éléments précédemment indiqués, le premier terme de (6.16) représente la dissipation d'énergie associée au déplacement interfacial, laquelle doit se réaliser, par adsorption chimique des espèces dissoutes, à la composition x_k^{eff} ($\forall k \in \{1, N\}$). Le second terme est associé au processus de *solute drag* qui doit ensuite ramener la composition locale de x_k^{eff} à x_k^α ($\forall k \in \{1, N\}$) après déplacement interfacial, par un processus de désorption. Enfin, J_k^t ($\forall k \in \{1, N\}$) représente le terme de diffusion de l'espèce k à travers l'interface (Eq. (3) et (4) [Har22]).

Le terme de production d'énergie de Helmholtz devant être négatif, on considère que les deux quantités données dans l'intégrale (6.16) respectent également ce principe. On suppose, de même, que la vitesse de croissance et les flux interfaciaux sont liés, de manière linéaire, à la magnitude des processus de dissipation d'énergie (ce qui différencie cette approche de celle

d’Aziz *et al.*). De même, on considère qu’aucun processus croisé n’a lieu. Ainsi, la magnitude de la vitesse de croissance v est indépendante de la dissipation liée au processus de *solute drag*. De même, la magnitude du flux J_k^t associé à l’espèce k est indépendante de la dissipation liée au processus d’avancée de l’interface à la vitesse v (section 2.3 [Har22]). Dans cette situation, nous sommes ramenés à avoir (Eq. (18) et (19) [Har22]) :

$$\begin{aligned} v &= M^m \sum_{j=1}^N x_j^{eff} \llbracket \mu_j \rrbracket \\ J_i^t &= -\rho_0 \sum_{j=1}^N M_{ij}^t \llbracket \tilde{\mu}_j \rrbracket \end{aligned} \quad (6.17)$$

Le terme M^m ($\text{mol} \cdot \text{m} \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) fait référence à la mobilité interfaciale. De même, M_{ij}^t ($\text{mol}^2 \cdot \text{m} \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) est un coefficient cinétique décrivant les processus de diffusion d’espèces vers la phase mère. Leurs expressions (Eq. (24) et (25) [Har22]) sont rapportées dans la littérature [Azi88, Wan13, And92], en lien avec les propriétés des alliages, aboutissant à :

$$\begin{aligned} M^m &= \frac{v_0}{R T} \\ M_{ij}^t &= x_i^{eff} (\delta_{ij} - x_j^{eff}) \frac{v_i^D}{R T} \end{aligned} \quad (6.18)$$

où v_0 est la vitesse maximale de transformation et v_i^D la vitesse de diffusion de l’espèce i dans l’interface, destinée à permettre le retour de la composition interfaciale, x_i^{eff} , à la composition de la phase en croissance, x_i^α . Cette définition permet ensuite de poser, progressivement, le système à résoudre, constitué des N IRF (Interfacial Response Function) comme détaillé en section 3 [Har22]. Dans le cas nous intéressant, et considéré par la suite, de la solidification d’un alliage binaire, avec une diffusion négligée dans la phase solide ($\alpha \simeq s$ et $\beta \simeq l$), les équations se simplifient en (Eq. (30) et (31) [Har22]) :

$$\begin{aligned} R T \frac{v}{v_0} &= x_a^{eff} \llbracket \mu_a \rrbracket + x_b^{eff} \llbracket \mu_b \rrbracket \quad (\text{VRF}) \\ v (x_b^{eff} - x_b^\alpha) &= x_b^{eff} (1 - x_b^{eff}) \frac{v^D}{R T} (\llbracket \mu_a \rrbracket - \llbracket \mu_b \rrbracket) \quad (\text{CRF}) \end{aligned} \quad (6.19)$$

La première équation est qualifiée de VRF (Velocity Response Function) et la seconde de CRF (Concentrations Response Function). Pour un système multicomposé de N éléments, $N - 1$ équations CRF seraient à considérer. Ces mêmes relations ont été exprimées dans le cadre de systèmes multicomposés, et exploitées en ce sens, dans un travail de recherche plus récent [Mar23, Mar24]. Il est important de noter que les grandeurs v_0 et v^D données dans (6.19) restent difficilement estimables, bien que de première importance dans le modèle. La même remarque peut être faite sur le paramètre λ (Eq. 15). La section 3.1 [Har22] revient sur la difficulté de ces estimations, les méthodes de MD en étant une première réponse. Ainsi, Hareland *et al.* [Har22] retrouvent des valeurs de $v_0 \sim 790 - 890 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et $\lambda \sim 0.29 - 0.34 \text{ mol} \cdot \text{mol}^{-1}$ en comparant les données du modèle ici résumé, et les simulations MD précédemment développées sur un alliage Ni-Cu par Yang *et al.* [Yan11] (Fig. 6.15 a). On notera aussi l’intérêt de cette

comparaison qui permet de différencier les propriétés de croissance des interfaces $\{100\}$ et $\{110\}$. De plus, il faut noter que les valeurs de v_0 données ici se révèlent très différentes de celle du son, de l'ordre de 5 fois plus faibles, alors que v_0 est souvent estimée à cette valeur [Kur86b]. Les mêmes données de simulations MD sont également exploitables pour déterminer la valeur de $v^D \sim 0.32 - 0.46 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ (Fig. 6.15 b), cette valeur étant, dans la suite des applications dédiées aux alliages multicomposés, souvent assumée égale entre espèces, par souci de simplification, cette dernière hypothèse étant cependant très discutable, encore plus, certainement, en comparant espèces interstitielles et substitutionnelles.

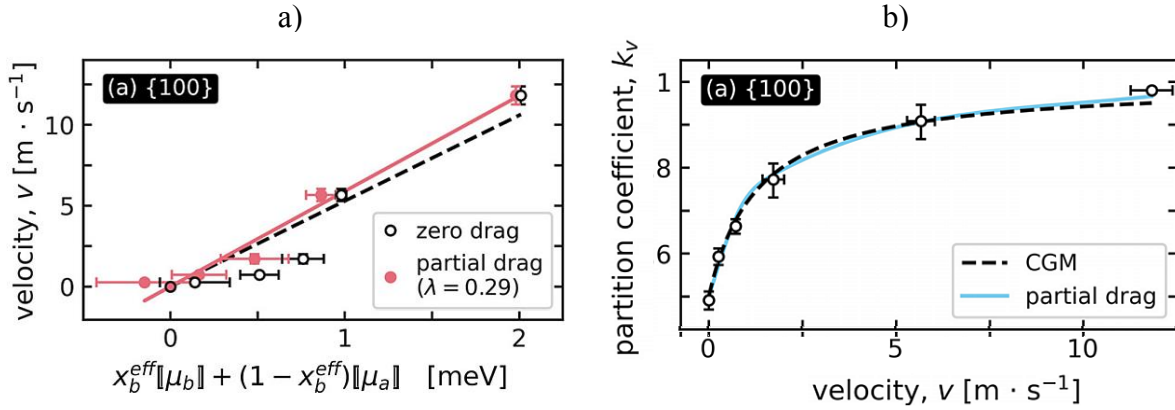


Fig. 6.15 : Calibration des paramètres du modèle PDM. Application à l'alliage Ni-Cu basée sur les simulations MD de Yang *et al.* [Yan11] pour l'interface α/β associée aux plans de croissance $\{100\}$. a) Estimation des valeurs de la vitesse maximale de transformation, $v_0 \approx 890 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, et du paramètre de *solute drag*, $\lambda \approx 0.29 \text{ mol} \cdot \text{mol}^{-1}$, basée sur le calcul MD de la relation entre vitesse de croissance et écart d'énergie de Gibbs interfacial entre phase mère (β) et fille (α) ($x_b^{\text{eff}} \llbracket \mu_b \rrbracket + (1 - x_b^{\text{eff}}) \llbracket \mu_a \rrbracket = G^\beta(x_b^{\text{eff}}) - G^\alpha(x_b^{\text{eff}})$). b) Estimation de la vitesse de diffusion interfaciale, $v^D \approx 0.32 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, basée sur le calcul MD de la relation entre vitesse de croissance et coefficient de partage avec effet cinétique, k_v , défini par le rapport des compositions des phases fille et mère ($k_v = x_b^\alpha / x_b^\beta$) [Har22].

La figure (6.16) est intéressante à consulter, car elle illustre les étapes de construction du modèle PDM proposé dans [Har22], à tout le moins dans le cas simple d'un système binaire. Ainsi, le terme $\Delta G_{\text{eff}}^m = G^\beta(x_b^{\text{eff}}) - G^\alpha(x_b^{\text{eff}})$ (Eq. 6.20 a) représente la variation d'enthalpie libre de l'interface, de composition x_b^{eff} , lors de la transformation $\alpha \rightarrow \beta$. Ce terme correspond, ainsi, à la dissipation d'énergie liée à l'adsorption de l'espèce b , partant de la composition intermédiaire x_b^{eff} associée à la phase β , vers la même composition x_b^{eff} , mais associée à la phase α . De même, le terme $\Delta G_{\text{eff}}^t = [G^\alpha(x_b^{\text{eff}}) - G^\alpha(x_b^\alpha)] - [G^\beta(x_b^{\text{eff}}) - G^\beta(x_b^\alpha)]$ (Eq. 6.20 b) correspond à l'écart d'enthalpie libre de la phase α entre les compositions x_b^{eff} et x_b^α diminué de l'écart d'enthalpie libre de la phase β entre les compositions x_b^{eff} et x_b^β . Ceci revient à ramener la composition interfaciale de x_b^{eff} à x_b^α dans la phase α , par rejet de ce soluté dans la phase mère β , de composition x_b^β . Ce terme correspond ainsi à la dissipation d'énergie liée au *solute drag* et à la désorption des espèces b de l'interface où elles sont associées, transitoirement, à la phase α et la composition x_b^{eff} vers la phase β à la composition x_b^β .

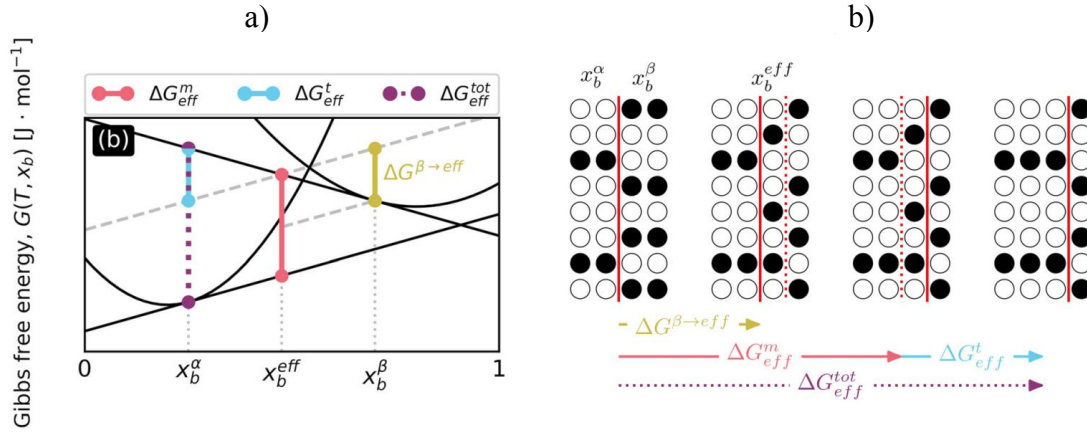


Fig. 6.16 : a) Construction graphique, pour un alliage binaire $a - b$, illustrant le *modèle de trainage partiel* (Partial Drag Model – PDM) développé par Hareland *et al.* [Har22] pour suivre les évolutions de compositions interfaciales en croissance rapide d'un front plan. b) Processus dissipatifs interfaciaux montrés par les différentes étapes d'avancée de l'interface (ligne rouge) de la phase α vers la phase β . Les compositions des deux phases en élément b sont respectivement x_b^α et x_b^β . L'adsorption de l'espèce b se fait, à l'interface α/β , à la composition x_b^{eff} . Les termes ΔG représentent les écarts d'enthalpies libres entre les états considérés [Har22].

La somme totale des deux contributions, $\Delta G_{eff}^{tot} = G^\beta(x_b^\alpha) - G^\alpha(x_b^\alpha)$ (Eq. 6.20 c), représente l'énergie totale dissipée dans le processus de croissance.

$$\Delta G_{eff}^m = x_a^{eff} [\mu_a] + x_b^{eff} [\mu_b] \quad (6.20 \text{ a})$$

$$\Delta G_{eff}^t = (x_b^{eff} - x_b^\alpha)([\mu_a] - [\mu_b]) = \lambda (x_b^\beta - x_b^\alpha)([\mu_a] - [\mu_b]) \quad (6.20 \text{ b})$$

$$\Delta G_{eff}^{tot} = \Delta G_{eff}^m + \Delta G_{eff}^t = x_b^\alpha [\mu_b] + x_a^\alpha [\mu_a] \quad (6.20 \text{ c})$$

La section (4.2) de [Har22] exprime et détaille ces différents termes, bien que leur compréhension reste subtile. De manière intéressante, nous précisons, dans ce même travail, l'origine de l'écart entre ce modèle et les propositions d'Aziz *et al.* [Azi94]. En effet, il apparaît que le terme λ a été exploité pour multiplier le terme de dissipation d'énergie lié à l'effet de *solute drag*, ΔG_{eff}^t , donnant, à terme, l'expression de la relation CRF (Eq. 6.19). Cependant, cette seule modification est critiquable car elle n'inclut pas le terme λ dans le flux d'espèces chimiques considéré, et, en conséquence, ne fait pas apparaître la composition interfaciale dans le terme de droite de cette équation CRF, ce qui constitue une erreur, corrigée dans le présent travail développé. Un point d'attention doit aussi être ajouté concernant la symétrie du modèle. Ainsi, la substitution $a \leftrightarrow b$ amène, dans (6.19) a un résultat similaire dans les états interfaciaux. Cela n'est pas le cas dans les expressions asymétriques proposées par Aziz *et al.* [Azi82-Azi94] où l'utilisation d'un modèle de cinétique exponentiel pour le flux diffusif associé au CRF interdit cette symétrie. Cela aboutit au résultat paradoxal de produire deux solutions différentes selon la considération d'une espèce a dissoute dans b ou b dissoute dans a .

Une unique application de ce modèle est proposée dans [Har22], mais plusieurs autres, notamment dans le cas d'application des alliages multicomposés, sont proposées dans [Mar23, Mar24]. Dans le cadre de l'étude rapportée en Fig. (6.17), nous nous sommes intéressés à étudier l'influence de l'effet cinétique sur le diagramme de phase argent-cuivre. Les données thermodynamiques sont celles de Murray [Mur84]. Les développements présentés ont été

introduits dans l'outil PY\PHDV. Une vitesse de croissance interfaciale de $v = 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ a été choisie mais les valeurs des paramètres v^D et v_0 sont restées arbitraires, simplement définies à travers les ordres de grandeurs des valeurs précédemment mentionnées (Fig. 6.15). Une méthode de type *descente du simplexe*, proposée par Nelder et Mead [Pre07] a été implémentée pour la recherche des compositions x_{Cu}^{ls} et x_{Cu}^{sl} , pour différentes températures d'intérêt, mais, comme déjà mentionné, d'autres approches numériques seraient sans doute plus efficaces pour la suite de ces travaux, en particulier dans le cas de systèmes multicomposés.

Les évolutions présentées (Fig. 6.17) montrent clairement l'effet cinétique sur les équilibres thermodynamiques. La valeur de $\lambda = 0$ amène à être proche de l'équilibre thermodynamique, comme on peut le comprendre à la lecture des Eq. (6.15) ou (6.19), qui conduisent à $[\mu_a] = [\mu_b]$, cette dernière valeur étant faible, sinon nulle, si $v \ll v_0$. À composition donnée, on retrouve, avec l'augmentation de λ , et de l'importance du processus de *solute drag*, une décroissance de l'intervalle de solidification, marquée notamment par la diminution de la température de liquidus. Cet effet s'accroît avec la composition. De plus, on remarque un effet rétrograde, clairement visible, sur la courbe du solidus d'autant plus que la composition est importante. Comme mentionné et discuté [Har22], ces résultats s'écartent fortement de ceux obtenus avec l'application du modèle de Aziz *et al.* (Fig. 5 c-d, [Har22]) qui, à l'inverse, conduisent à trouver des compositions de phase solide dans le domaine de décomposition spinodale (i.e. $\partial^2 G^s / \partial x_{Cu}^2 < 0$) 'interdit'. Cette évolution sur x_{Cu}^s est attribuable, entre autres, à l'asymétrie du modèle de Aziz *et al.* ne permettant pas de retrouver une diminution de la composition solide avec la température.

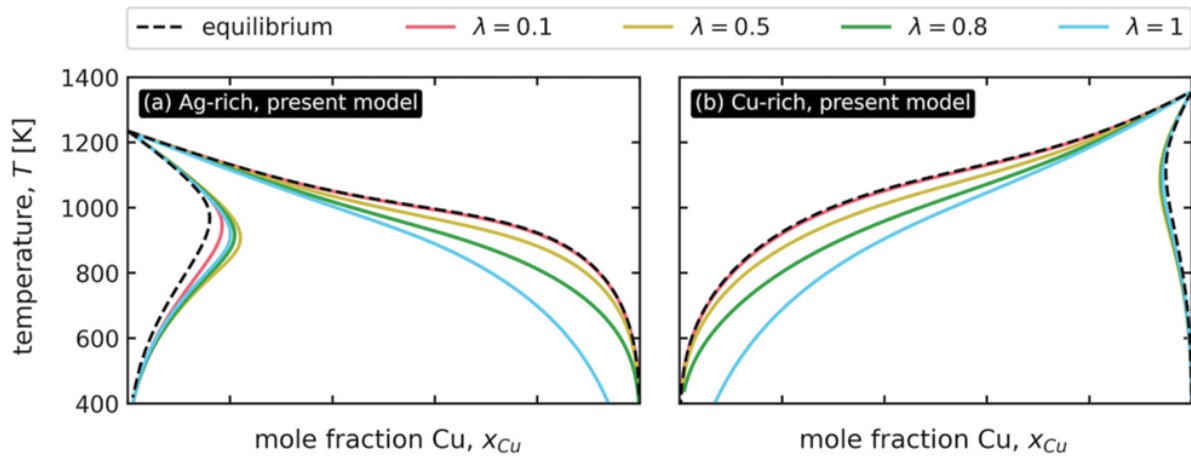


Fig. 6.17 : Frontières des interfaces entre domaines solide et liquide dans le diagramme de phase du système binaire argent-cuivre. Les interfaces sont déplacées depuis la position d'équilibre (ligne pointillée) vers l'intérieur du domaine biphasé, selon la valeur du paramètre λ . Les autres paramètres du modèle PDM sont restées fixes : $v = 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $v^D = 0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et $v_0 = 850 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Il est nécessaire de noter que la transformation eutectique est ignorée dans ces calculs. [Har22].

6.3 Bilan et perspectives

i. Synthèse

Les travaux détaillés dans ce chapitre ont été portés, comme cela a été montré, par notre volonté de développer, de manière continue, dans l'équipe 2MS, la librairie de calculs PhysalurgY [Phy24], destinée au suivi des transformations métallurgiques. Ainsi, cette action, de longue durée, a soutenu différentes activités, sur des échelles d'étude, spatiales et temporelles, très diverses. Cette librairie est, en conséquence, le fruit des travaux de nombreux stagiaires, doctorants et permanents de l'équipe 2MS. Il est également utile de rappeler que PhysalurgY constitue, en ce sens, par la stabilisation des outils, et leur développement dans un environnement unique et collaboratif, un outil de pérennisation des travaux propres à l'équipe et un soutien aux activités actuelles et futures.

Pour rappeler les éléments donnés en introduction de ce chapitre, ces outils nous ont permis de travailler sur l'étude de la cinétique de croissance de précipités, par approche analytique (PY\MIAN) ou suivi de front (PY\MIFT), jusqu'au suivi de population de précipités (PY\PREC). De même, ils nous permettent, actuellement, de déterminer les cinétiques de croissance de structures dendritiques (PY\KIND) ou eutectiques (PY\KINE), ces données pouvant être exploitées, en seconde étape, dans des modèles de suivi microstructuraux, tels CAFE, comme cela a été réalisé dans les doctorats de C. Xue [Xue22a] et T. Camus [Cam23a]. Ainsi, PhysalurgY permet de travailler sur des cinétiques de croissances de morphologies très diversifiées, dans des régimes de croissances stationnaires ou instationnaires. De plus, cette librairie a été très largement exploitée dans les travaux 2MS pour développer les tabulations des propriétés thermodynamiques de phases d'intérêt, en température et composition, et les exploiter dans les solveurs Cimlib pour résoudre les équations de conservation de la chaleur [Car13, Saa15, Mag20, Xue22a, Hou22, Cam23a]. D'autres outils, non décrits dans ce chapitre, peuvent être retrouvés sur le site dédié [Phy24].

Il est important, à travers la synthèse brève des outils mentionnés, d'insister à nouveau sur le fait que ces derniers se révèlent relativement polyvalents, et couvrent un nombre important de besoins liés à la modélisation des phénomènes métallurgiques. Ils sont, ainsi, destinés à travailler sur des alliages industriels, multicomposés, de diverses natures. Leur intérêt est également de ne pas être dédié à une classe unique d'alliage, mais, en s'appuyant sur les bases de données Thermo-Calc [The23b-d], de pouvoir travailler avec tout alliage référencé. Ce point n'a pu être complètement montré dans les applications présentées, essentiellement consacrées aux alliages de nickel. Cependant, d'autres applications de PhysalurgY se sont portées sur les aciers [Saa15, Xue22a], les alliages d'aluminium [Leg15a] ou les oxydes [Hou22]. Cette diversité est aussi visible, indirectement, dans les sources de financement liées à nos travaux, autant associées à des ressourcements industriels directs (CIFRE) que publics (ANR) : Chaire industrielle Daher (Doctorat V. Legrand [Leg15a]), Projet NEMESIS (Doctorat C. Xue [Xue22a]), Projet 'Freckles' Safran – PFX (Doctorat V. Maguin [Mag20]), Projet NILS Safran – SAMC (Doctorat CIFRE actuel de P. Martin [Har22] et S. Ducottet). En ce sens, il doit aussi être rappelé que PhysalurgY suit les évolutions de Thermo-Calc, tant celle liée à la librairie rassemblant les outils d'interfaçage [The23g], que celle associée aux bases de données disponibles, régulièrement enrichies et élargies pour couvrir de nouveaux besoins [The23i].

Le point d'avancée récent, le plus important, est celui lié aux travaux autour de la modélisation de la solidification rapide, en réponse directe aux besoins de la fabrication additive. Ainsi, comme discuté dans la section précédente, les activités menées, notamment dans le cadre du doctorat de P. Martin, cherchent à investiguer l'effet des cinétiques de solidification à haute vitesse sur les équilibres interfaciaux et leur conséquence sur les processus de ségrégation. Ces travaux ont permis d'introduire le modèle de Hareland *et al.* [Har22] dans la librairie PhysalurgY, et d'appliquer ce modèle dans le cas d'alliages binaires ou multicomposés [Mar23, Mar24]. L'exploitation de ces travaux, dans des contextes d'intérêt industriel, doit suivre, à travers leur application dans la simulation des procédés FA et le développement associé de critères de fissuration propres aux conditions de solidification rencontrées dans ces procédés.

ii. Bilan et diffusion

Cette activité autour du développement ou de l'exploitation des outils liés à la librairie PY a permis une publication d'articles diversifiés dans *Acta Materialia* [Gui15, Gui17, Sen18, Gui21] ou *CALPHAD* [Gui22]. De plus, les sorties accessibles avec ces outils ont été exploitées dans différentes publications, notamment liées au calcul des cinétiques de croissance dendritique (modèle CAFE [Xue22b]), eutectique (modèle Jackson-Hunt couplé Thermo-Calc [Sen18]) ou à la résolution des équations de conservation de la chaleur [Xue22a, Cam23a].

Mon bilan d'activité de recherche dans ces thèmes portant sur la modélisation et la simulation numérique des transformations de phase dans les matériaux métalliques, basées sur le développement d'approches de couplages thermodynamiques, est ainsi le suivant :

- ▶ Huit publications dans des journaux de rang A :
[RA19, RA22, RA28, RA35, RA36, RA42¹, RA44, RA46]
- ▶ Vingt-trois conférences internationales :
[CI30, CI34, CI35, CI37, CI39, CI42, CI44, CI51, CI54, CI59, CI63, CI81, CI88, CI90, CI91, CI93, CI94, CI95, CI96, CI97, CI98, CI99, CI100]
- ▶ Cinq conférences nationales : [CN14, CN17, CN18, CN25, CN27]
- ▶ Douze Communications nationales :
[CO6, CO7, CO13, CO17, CO21, CO22, CO24, CO29, CO30, CO31, CO32, CO38]
- ▶ Trois séminaires de recherche : [SR4, SR5, SR10]
- ▶ Deux séminaires d'enseignement : [SE3, SE5]

¹ Best Paper Award for papers published in the *CALPHAD* Journal (2023): <https://calphad.org/calphad-awards>

Cette activité a, également, conduit aux encadrements suivant :

► Deux travaux de doctorat soutenus :

V. Legrand (Chaire Industrielle Daher, Octobre 2012 – Décembre 2015),
V. Maguin (Contrat CIFRE SAFRAN \ PFX, Octobre 2016 – Septembre 2019)

► Trois encadrements de doctorants en cours :

P. Martin (Contrat CIFRE SAFRAN – Projet NILS), Octobre 2021 – Septembre 2024
S. Ducottet (Contrat CIFRE SAFRAN – Projet NILS), Octobre 2023 – Septembre 2026
R. Hammoud (Contrat doctoral Mines Paris PSL), Octobre 2023 – Septembre 2026

► Deux encadrements de Mastère spécialisé MaPMod, *en cours* :

M. Ennaki (Octobre 2023 – Septembre 2024)
N. Rojas Londoño (Octobre 2023 – Septembre 2024)

► Trois travaux de stages :

G. Dumas (Mars 2016 – Aout 2016)
V. Le Maout (Mai 2016 – Septembre 2016)
R. Lecardonnell (Juin 2015 – Septembre 2015)

Les activités réalisées dans le cadre de la librairie PhysalurgY, et plus largement autour du développement de méthodologies couplées aux calculs d'équilibres thermodynamiques apparaissent avoir été bien appréciées de la communauté scientifique. Colin et Voorhees [Col16] rappellent l'apport du travail détaillé dans [Gui15] en termes d'analyse des phénomènes de diffusion croisée dans le cadre de processus de croissance globulitique. De même, Zhang *et al.* [Zha23] ont développé un travail de revue étendu sur la modélisation en champ de phase des processus de solidification. Ces auteurs rappellent, ainsi, que nos travaux contribuent à la proposition de solutions mathématiques aux modèles de croissance de structures de solidification. Enfin, Chen et Wang [Che23b] ont développé, récemment, une analyse en stabilité d'une sphère en croissance dans un alliage binaire, et ont étudié l'effet des compositions d'espèces sur le rayon de germination. Dans leur état de l'art sur cette thématique, ils rappellent, clairement, nos travaux précédents sur ces sujets [Gui15, Gui17, Gui21] notamment dans le cadre d'analyses menées, dans ces articles, sur des systèmes multicomposés, la limite étant que les solutions mathématiques que nous proposons [Gui15, Gui17] ne puissent intégrer, dans leur expression, l'effet de capillarité.

De manière intéressante, nous nous sommes précédemment montrés critiques, dans nos travaux autour de PYMIAN [Gui17], des approches de Chen *et al.* [Che08] basées sur le calcul de longueurs de diffusions chimiques. Plus particulièrement, nous avons montré que ces dernières solutions ne permettent pas de considérer correctement les processus de diffusion croisée. Cependant, ces méthodologies sont reprises dans les méthodes numériques exploitées dans les outils de Thermo-Calc, et en particulier dans PRISMA [Pri23], comme on le retrouve rappelé par Prat *et al.* [Pra14] dans la description détaillée qu'il donne de ce logiciel. Nos critiques émises se retrouvent, maintenant, dans de premières communications. Notamment, Naseri dans son travail de doctorat [Nas19, Nas20] revient, à la lecture du travail [Gui17], et de

manière détaillée, sur l'imprécision du modèle de Chen [Che08], en l'étendant également à PanPrecipitation [Pan23b]. Il note que ces deux outils exploitent des solutions de modèles quasi-stationnaires, liant les longueurs d'une espèce à la même espèce, mais présentent les problèmes que nous évoquions. Naseri rappelle, ainsi, que nous avons prouvé les limitations de cette approche et que la solution proposée [Gui17] se révèle, elle, exacte par rapport au problème mathématique initialement posé.

Plus récemment, Hariharan *et al.* [Har24] proposent une analyse approfondie de plusieurs de nos activités [Har22, Gui22]. Ils rappellent la richesse des modèles proposés, à travers l'intégration de termes de diffusion hors diagonaux et du couplage thermodynamique. Ils concluent en considérant que ce dernier phénomène est plus marqué sur nos résultats que l'exploitation d'une matrice de diffusion complète, en particulier sur les alliages riches en compositions et qui sont des matériaux d'intérêt pour ces modèles.

Sur des travaux non détaillés, une analyse mathématique de la stabilité morphologique d'une sphère en croissance, en régime instationnaire et avec diffusion croisée, a été proposée [Gui21], dans l'objectif d'étendre le critère de Mullins et Sekerka. Viardin *et al.* [Via22] rappelle ce travail et la démonstration apportée des conditions de stabilité morphologique d'une structure de solidification. De même, nous ne sommes pas revenus sur le travail de 'review' [Jac21] réalisé sur la modélisation des processus de précipitation dans les alliages d'aluminium durant les procédés FSW. Il est important de le mettre en lien avec ma participation durant de nombreuses années aux commissions FSW des associations SF2M/AFM [CO06, CO07, CO17, CO38]. Ce travail bénéficie également d'une bonne visibilité dans la communauté.

En conclusion, il doit être rappelé que les activités présentées autour de la solidification rapide ont été réalisés, en large partie, dans le cadre d'une collaboration internationale pérenne, développée depuis plusieurs années avec l'équipe du Pr. P. Voorhees de la *Northwestern University* (Evanston, Illinois, États-Unis). En particulier, il doit être mentionné que le travail présenté dans CALPHAD autour de la modélisation de la croissance dendritique couplée à Thermo-Calc [Gui22] a bénéficié, récemment, d'une grande visibilité grâce à l'obtention du prix du meilleur article publié dans ce journal en 2022 (*The Best Paper Award for papers* : <https://calphad.org/calphad-awards>). Cette récompense démontre la qualité du travail réalisé et le bénéfice tiré de notre collaboration dans ce domaine, cette publication s'étant réalisée conjointement avec l'équipe du Pr. P. Voorhees et son doctorant, C. Hareland.

iii. Perspectives

Les futurs développements autour de la librairie PhysalurgY apparaissent, potentiellement, variés au regard des actuelles applications présentées ici. Il convient ainsi, de notre côté, que nous poursuivions et élargissions les activités menées, actuellement, avec cet outil. Cependant, il semble nécessaire de continuer à améliorer cet outil, en interne, sur sa structuration et son organisation. De même, les aspects de résolution numérique doivent être rediscutés. En particulier, des méthodes de convergence plus efficaces, notamment dans le cas d'études d'alliages multicomposés, devraient être considérées dans PhysalurgY. L'utilisation d'approches de type Newton-Raphson, plus complexes à introduire dans nos recherches de solution, mais plus rapides que les méthodes de type *descente du simplexe* (Nelder et Mead

[Pre07]) devraient être mises en œuvre, afin de faciliter la recherche des points de fonctionnement interfaciaux. Sur ce même sujet, des progrès sensibles sont encore être largement possibles dans les différents outils PhysalurgY. De plus, il serait sans doute pertinent, progressivement, d'aller vers une parallélisation, au moins partielle, de nos outils, qui devrait être aisée à introduire, pour un certain nombre d'applications et diminuer grandement les temps de simulations qui restent régulièrement importants.

En complément, il semble nécessaire de promouvoir une meilleure diffusion de cet outil auprès de la communauté intéressée, académique et industrielle. En ce sens, les développements actuellement réalisés, par S. Kraria (Ing. Recherche, équipe CSM), d'une interface web devant faciliter l'utilisation de l'outil PhysalurgY apparaissent intéressants et prometteurs. L'objectif poursuivi est, ainsi, de faciliter l'utilisation de PhysalurgY à l'extérieur du CEMEF, par les laboratoires et entreprises partenaires de nos projets, actuels et futurs. Cette interface doit, à terme, faciliter l'accès aux résultats de nos travaux, et leur exploitation à distance, dans le cadre de nos collaborations. Un projet de Mastère MAPMOD, en lien avec Safran Additive Manufacturing (SAM-C), est, ainsi, en cours afin de permettre à ce partenaire d'accéder, plus aisément, aux outils PhysalurgY et les réutiliser et exploiter pour de nouveaux cas d'intérêt. La création de cette interface web doit, de même, être vue, à plus long terme, comme un moyen d'intéresser de nouveaux partenaires, en leur assurant la possibilité de pouvoir exploiter, de manière autonome, cette librairie de calcul. À plus long terme, il convient de réfléchir aux possibles diffusions commerciales de cet outil, dans une structure adaptée, soutenant notre démarche. Les dépôts réalisés, régulièrement, des sources de PhysalurgY à l'APP participent de cette volonté. Une possibilité serait, également, de progresser dans nos échanges avec Thermo-Calc pour les convaincre de la valeur de nos outils et de l'intérêt d'une collaboration afin de bénéficier directement de nos développements et de participer à leur diffusion.

Dans l'idée exprimée de développer les collaborations autour de nos activités, il convient également de mentionner que l'équipe est active dans le GDR ALMA (Alliages métalliques par/pour la fabrication additive – GDR CNRS 2089) et l'association AFTherMat (Association Française de Thermodynamique des Matériaux), l'activité de cette dernière faisant suite au GDR TherMatHT (Thermodynamique des Matériaux à Haute Température – GDR CNRS 3584). Ainsi, nos travaux autour des couplages thermodynamiques, notamment en solidification rapide, sont régulièrement présentés dans les réunions et journées dédiées de ces groupements, assurant aussi une visibilité à nos activités, qui doit être poursuivie et encouragée.

Enfin, concernant les collaborations industrielles, le projet NILS, financé par Safran Additive Manufacturing, se poursuit actuellement, à travers deux projets de doctorat au CEMEF portant sur la maîtrise des procédés L-PBF, comme mentionné en fin de chapitre précédent. Le premier (P. Martin) porte sur la modélisation des chemins de microségrégation et le second (S. Ducottet) sur la modélisation des processus de précipitation. Ces deux activités se développent à travers l'exploitation et l'enrichissement des outils PhysalurgY et s'inscrivent dans le projet de pérennisation et d'amélioration de la visibilité de nos outils numériques. Ces projets participent aussi au développement d'une collaboration de plus long terme, avec la société Safran, pour porter de nouveaux et ambitieux projets dans les prochaines années, s'appuyant sur les outils PhysalurgY, et leur enrichissement.

Dans cette vision, il convient également, dans l'équipe 2MS, de poursuivre nos recherches de collaborations industrielles à nos activités, notamment avec les entreprises exploitant actuellement l'outil Thermo-Calc dans leur démarche R&D. Ainsi, nos travaux sont aussi, à cet effet, présentés dans les conférences 'Thermo-Calc' françaises. Le projet ANR PRCE 'TheCap', porté par Ch. A. Gandin, doit également débiter en 2024, avec différents sidérurgistes français, pour développer un outil numérique prédictif des transformations des poudres de couverture exploitées pour la coulée des lingots. De même, des dépôts de projets sont régulièrement réalisés dans l'équipe 2MS, s'appuyant sur les outils PhysalurgY, afin de proposer des prédictions fines des transformations métallurgiques dans les procédés de mise en forme industriels. L'ensemble de ces projets s'inscrit, ainsi, dans cette même volonté de diffusion de nos méthodes et outils de travail dans les prochaines années.

Conclusions & Perspectives

« Une fois de plus, j'arrivais à mon éternelle
conclusion : il fallait s'instruire. »

Persepolis, Marjane Satrapi, 2000

1. Conclusions :

En conclusion de ce manuscrit, il est visible que les travaux de recherche que j'ai eu l'opportunité de développer, dans le domaine de la 'Science des Matériaux', depuis une vingtaine d'années, et l'obtention de mon doctorat (2004), se sont révélés riches et diversifiés. La variété des thèmes abordés, autant concernant mes activités réalisées au sein des Arts et Métiers (équipe CPP, Centre de Lille) (*Chapitre 3*) qu'à Mines Paris – PSL (CEMEF, Sophia Antipolis) (*Chapitre 4–6*), est apparente, à mon sens, dans le rendu, très synthétique, qui en a été fait ici et à travers la liste, plus détaillée, de ma production scientifique (*Chapitre 2*). Initialement liés à la caractérisation des surfaces et interfaces, ils ont évolué, par la suite, vers la maîtrise des processus de solidification, notamment ceux liés au soudage et à la fabrication additive, justifiant le titre donné à ce manuscrit. Ces travaux sont, au cours de ces années, restés liés au souhait d'améliorer la connaissance, à différentes échelles, des propriétés des matériaux, de perfectionner leur usage et d'optimiser leur mise en forme, ce en réponse aux besoins industriels actuels et futurs de nos partenaires.

Cette présentation a, en complément, cherché à mettre en évidence les différentes collaborations qui ont marqué mon activité, autant celles dont j'ai pu bénéficier, notamment à mon arrivée dans les établissements cités, et celles dont j'ai pu, par la suite, être à l'initiative, dans le cadre du développement de mes thématiques propres. En ce sens, cette diversité répond bien aux idées que j'ai exprimées en partie introductive, à travers le principe de la recherche de partenariats, académiques ou industriels, supportant le développement de nos activités. Concernant les collaborations, on notera la présence importante des financements ANR dans les travaux mentionnés, PRC – *Projet de Recherche Collaborative* (Crysalid – AAPG 2014, COLUMBO – AAPG 2021) ou PRCE – *Projet de Recherche Collaborative Entreprise* (Sishyfe – 09-MAPR-0019, NEMESIS et MACCADAM – AAPG 2017, FALSTAFF et TheCap – AAPG 2022). Ma participation à ces projets ANR s'est réalisée sous diverses formes (porteur, responsable scientifique ou simple collaborateur), sans que toutes aient été détaillées précédemment. Il conviendrait également de mentionner le projet FUI (Fonds Unique Interministériel) Soft-Defis (2016-2020), financé par la BPI (Banque Publique d'Investissement), ayant porté l'activité de doctorat de H. Ettroudi (directeur Ch. A. Gandin) sur la modélisation de la solidification des lingots de fonderie, et impliquant une dizaine d'industriels de la sidérurgie. Le succès rencontré par l'équipe 2MS dans sa participation à ces projets collaboratifs est une reconnaissance de la qualité de son travail, et montre, parallèlement, la construction de projets ambitieux et innovants, à l'image des attentes de l'ANR dans ses AAPG. L'ensemble de ces différents projets ont aussi été, fréquemment, labellisé par des pôles de compétitivités locaux ou nationaux (Capenergies, SAFE, ITrans, Nuclear Valley).

Ces financements, associés à des recrutements de doctorants, nous ont permis de développer régulièrement nos activités durant les années passées. Ils ont amené, également, à enrichir et étendre nos travaux vers de nouvelles thématiques (développement des approches LS en soudage dans Sishyfe, exploitation des microstructures virtuelles CAFE en analyse CND dans NEMESIS), l'étude de nouvelles classes de matériaux (solidification du silicium en essai Bridgman dans Crysalid) ou de nouveaux procédés (WAAM dans MACCADAM, WLAM dans COLUMBO). De même, ces projets correspondent à autant d'opportunités permettant le

développement de nos outils numériques (PhysalurgY dans TheCap) et leur diffusion, améliorant également leur visibilité auprès des industriels. Il est à noter que de nouveaux dépôts de projets interviennent régulièrement dans l'équipe dans le cadre des appels AAPG courant, autant dans l'objectif de permettre la poursuite des activités engagées, que de débiter de nouvelles thématiques porteuses. L'ensemble de ces travaux nous ont, en contrepartie, permis de développer un réseau de collaborations, à l'échelle française, complémentaire aux activités de l'équipe, en lien, particulièrement, avec les développements expérimentaux en soudage et fabrication additive, sur lequel nous nous appuyons pour valider nos outils numériques.

En complément, il est important, dans cette partie conclusive, de rappeler que de nombreuses autres activités, passées ou actuelles, ont aussi été réalisées dans le cadre de financements industriels directs, sous forme de contrats de doctorat CIFRE. Ces financements ont eu pour objectif de développer des projets plus applicatifs pour les industriels avec des objectifs précisément identifiés. Ils ont aussi pu correspondre, souvent, à des besoins spécifiques, en termes de livrables, pour lesquels des réponses rapides étaient attendues, qui ne pouvaient être associées au temps des appels à projets publics, ou à des montages collaboratifs extérieurs. En ce sens, la présence de l'industriel Safran est, ici, particulièrement révélatrice et montre l'importance accordée à la maîtrise des procédés de solidification par ce groupe, autant dans la réalisation des aubes de turbines, que dans la maîtrise des procédés de fabrication additive, en termes d'évolution thermomécanique et microstructurale des pièces réalisées. Il est, cependant, important de mentionner que, malgré le caractère confidentiel de certaines activités, leurs résultats ont pu être, régulièrement, diffusés en conférences et ont donné lieu à plusieurs publications.

Au bilan, je rappellerai ci-après les principaux indicateurs de production scientifique associés à l'ensemble de mes activités, et issus des informations données en début de manuscrit. Ces données permettent de montrer une activité régulière d'encadrements de recherche et de suivi d'étudiants, ainsi que de communications autour de leurs travaux.

- ▶ Encadrements
 - 20 doctorants (16 soutenus, 4 en cours)
 - 9 Mastères spécialisés MaPMod
 - 15 Stagiaires (Ingénieurs et Master M2)
- ▶ Communications scientifiques
 - 46 Publications de Rang A
 - 102 Conférences internationales
 - 17 Participations à des séminaires d'enseignement et de recherche

En complément, je reste investi dans les enseignements de Mines de Paris – PSL, à travers ma participation à la formation *Matériaux Pour l'Ingénieur* (MPI) (1A) et ma co-direction du cours d'enseignement spécialisé (ES) *Impression 3D métallique* (2A). De même, plus localement, je participe aux enseignements des cours doctoraux et du Mastère Spécialisé MaPMod (*Digital Materials and Advanced Processes Modelling*), autour de la formation en matériaux et métallurgie de nos étudiants. En complément, je suis également membre du Conseil du Département Mécanique et Matériaux depuis plusieurs années.

2. Perspectives :

Les perspectives des travaux actuels ont été, précisément, détaillées dans les chapitres précédents, mais peuvent être synthétisées ainsi, au regard des thématiques de recherche abordées précédemment, en une vue d'ensemble. Je me permettrai, également, de rappeler, dans le contenu ci-après, les activités en cours de réalisation :

i. Evolution microstructurale :

Les approches de modélisation CAFE, ont été initialement développées pour le suivi du développement des structures de solidification dans les procédés de coulée. Elles font, ainsi, l'objet, actuellement, du mastère MaPMod de M. Elayeb (2023 – 2024) avec Safran, que j'encadre avec Ch. A. Gandin et M. Bellet. Ce projet est destiné à prédire ces développements lors de l'élaboration des aubes de turbine monocristallines, en fonderie de précision appliquée aux superalliages base nickel. Ces mêmes approches CAFE ont été exploitées avec succès, plus récemment, dans le cadre des procédés de soudage et de fabrication additive, comme discuté dans ce manuscrit. Ainsi, un enrichissement du modèle, tenant compte du caractère de croissance épitaxiale des grains, a pu être réalisé dans la librairie Cimlib, appliqué aux procédés de soudage, et exploité pour les procédés TIG et MIG/MAG. Les approches retenues ont pu être reprises dans le projet NEMESIS avec des validations expérimentales probantes. Ces approches ont, ensuite, été étendues au procédé de fabrication additive L-PBF dans le projet CIFRE CETIM [Cam23a-c], aboutissant à de très fortes réductions des temps de simulations, et à la proposition de méthodologies numériques originales permettant le suivi des évolutions microstructurales.

Ainsi, nous avons pu proposer des stratégies efficaces pour suivre le développement des structures de grains, et ce même dans des conditions initialement peu propices aux approches CAFE, associées à de très longues durées de construction. L'utilisation de champs de températures stationnaires, et l'absence de couplage, aboutissent à des simulations extrêmement rapides, limitées aux seuls calculs automatés. Il resterait intéressant de poursuivre ces travaux en L-PBF, en réfléchissant aux approches qui pourraient permettre de réaliser ce suivi sur des trajectoires courtes et/ou complexes (e.g. structures lattices), en tenant compte du réchauffement progressif des pièces ou de thermiques plus complexes. Ces mêmes approches trouveraient un intérêt certain, également, dans le cadre du soudage multipasses de pièces épaisses. On peut penser au développement d'une *zoologie* de champs thermiques, fonction des conditions ou durées de construction, sur laquelle appuyer notre modélisation microstructurale ; base également de méthodes d'interpolation des grandeurs recherchées (*taille/orientation des grains*). De même, il serait intéressant de ne pas se restreindre à l'environnement Cimlib, et de s'appuyer sur des solutions de calculs hautement parallélisées, de type GPU, l'approche CA se prêtant particulièrement bien à ces solutions. Dans une autre direction, il serait tout aussi pertinent de regarder l'apport des outils de l'intelligence artificielle (IA) pour prédire les caractéristiques principales d'une microstructure pour une paramétrie donnée. Ces différentes directions d'étude sont aussi en accord avec la littérature récente, et amèneraient, à nouveau, à des gains certains dans les durées de simulation et la production de résultats.

Différentes exploitations des structures de grains CAFE virtuelles ont été proposées et restent envisageables. Entre autres études, nous avons cherché à les utiliser dans la prédiction de défauts de fissuration à chaud, liés au critère WYSO. Les résultats ont été intéressants, mais ont montré peu de variations avec les résolutions FE, sans doute en raison des orientations des structures, proches des gradients thermiques, ou trop dispersées. Il serait pertinent de renouveler ces études sur des structures plus simples (*croissance de bicristaux, thermique imposée*), en lien aussi avec l'exploitation de ces structures CA dans des modèles de comportement mécanique anisotrope (*plasticité cristalline*), telle que cela a été initié par notre collègue Y. Zhang dans l'équipe 2MS (ANR JCJC GRAMME). De même, comme suggéré par C. Xue, la modélisation mécanique, et la considération de la déformation, pourrait être intégrée dans la résolution CAFE (*transport des cellules*). Des collaborations expérimentales liées à ces études seraient d'une aide certaine dans cette direction.

Concernant l'exploitation des structures de grains virtuelles en contrôle non destructif (CND) dans les modèles de propagation d'ondes ultrasonores (projet NEMESIS), les résultats préliminaires, illustrés précédemment, à travers leur utilisation dans le logiciel CIVA (CEA LIST) [Xue22a], sont intéressants en tant que *preuve de concept* de la méthodologie. Ils ont montré la possibilité d'exploiter les microstructures automatées (CA) dans la prédiction de la propagation d'ondes ultrasonores par la méthode des rayons afin de suivre leur perturbation et diffusion, et d'améliorer, à terme, les conditions d'inspection CND. Cependant, les volumes d'études restent réduits pour représenter les microstructures réelles des pièces soudées du nucléaire, incluant plusieurs dizaines de passes. Dans cette dernière situation, nous sommes conscients, en effet, de la nécessité de réaliser des prédictions sur des volumes conséquents ($10 \sim 100 \text{ cm}^3$), comparativement à ceux actuellement traités, et pour des évolutions thermiques complexes, liées aux conditions évolutives de dépôts. On retrouve ici les thématiques portant actuellement le travail développé au CEMEF, dans le cadre du projet COLUMBO, par notre doctorante, Z. Kong (2022 – 2025), que j'encadre avec Ch. A. Gandin, M. Bellet et D. Sollas (ICMMO). Son objectif est de prédire les microstructures développées en procédé WLAM, afin de les exploiter dans la modélisation de la propagation des ondes ultrasonores pour la détection de défauts. Ceci nous ramène, également, à l'intérêt de la mise en œuvre des stratégies numériques précédemment mentionnées (GPU, IA). En complément, il serait utile de réfléchir à des méthodes de stockages optimisées des résultats à l'échelle CA (*restriction aux bordures des grains*) ou FE (*projection des orientations des structures sur un maillage dédié*). L'ensemble de ces perspectives sont autant d'idées qui nous conduisent à réfléchir à de nouveaux dépôts de projets, suites de NEMESIS, dans les différents guichets appropriés.

ii. Modélisation thermomécanique :

Différents procédés industriels ont été investigués à travers les projets de recherche présentés ici, et plusieurs stratégies de modélisation ont été proposées pour suivre les évolutions thermiques et mécaniques des pièces d'intérêt. Particulièrement, nous nous sommes essentiellement intéressés aux procédés de soudage (TIG, MIG/MAG) et FA (L-PBF, WAAM, WLAM) à travers les études menées dans l'équipe 2MS. Ces dernières ont démontré l'intérêt évident des approches de modélisation de type Level-Set, telles qu'elles ont été proposées, originellement, dans le suivi des procédés de soudage (projet ANR Sishyfe) [Des13, Des14].

Elles facilitent le suivi du dépôt de matière autant dans les procédés de soudage que de fabrication additive au regard de la gestion des contacts matière / matière, entre les cordons déposés et le substrat ou le métal de base, mais également entre les cordons eux-mêmes. Elles conduisent, également, à une résolution générale, sur un maillage unique des problèmes thermiques et mécaniques, dans les domaines liquide, solide et gaz. Cependant, des problèmes sont, régulièrement, rencontrés dans les différentes étapes de résolution. En particulier, le suivi de la fonction distance signée reste complexe, notamment au regard de la dynamique rapide des bains, en régime instationnaire, les positions interfaciales devant être, fréquemment, réestimées. De plus, il demeure nécessaire de mailler finement la zone interfaciale, amenant, en complément, à des opérations de remaillage régulières, coûteuses en temps de calcul. En conséquence, des problèmes restent observés sur la conservation précise de la masse ou de l'énergie du système, conduisant aussi à des opérations de corrections. Il serait pertinent de réfléchir à des approches numériques monodomaines, telle la méthode ALE, déjà pratiquée au sein de l'équipe 2MS pour l'analyse des procédés de solidification, et en particulier la coulée continue (projet ESA – CCEMLCC, doctorat de S. Zhang [Zha20]). Leur efficacité a, également, pu être observée dans la comparaison développée avec l'approche LS [May21b] lors des premiers projets CIFRE menés avec Safran (doctorats CIFRE, Collaboration I2M, PIMM, CEMEF, 2017 – 2021) [Que21, May21a]. Ces méthodologies ALE pourraient être comparées à nos approches de résolution actuelles pour déterminer les solutions les plus pertinentes et efficaces à l'avenir, dans nos études.

Concernant la résolution mécanique, le projet ESA – CCEMLCC [Zha20], mentionné précédemment, s'est intéressé à développer une modélisation découplée fluide / solide dans le cadre du suivi du procédé de coulée continue. Cette approche a permis de réaliser une description séparée et adaptée du comportement des deux milieux, dont les évolutions mécaniques sont spécifiques aux propriétés associées. Ces développements se sont limités aux études de fonderie, notamment en coulée continue, mais aurait pu intéresser les problèmes rencontrés dans le domaine du soudage ou de la fabrication additive. La stratégie proposée a permis de concevoir un modèle numérique amenant à une prédiction des écoulements et des contraintes/déformations de manière séparée [Zha21b], à travers des stratégies dédiées. Cette résolution a aussi amené à considérer l'effet de la résolution mécanique sur les écoulements. De même, des résolutions à des fréquences séparées des deux approches mécaniques ont été discutées. Les modèles développés à cette occasion pourraient être, ainsi, appliqués utilement à nos procédés de soudage.

Enfin, de manière plus immédiate, un travail important, précédemment mentionné, est mené dans l'équipe 2MS, par notre collègue Y. Zhang, afin de proposer des lois de comportement mécanique anisotropes s'appuyant sur les microstructures virtuelles prédites en FA par approches automates cellulaires (CA) (Projet JCJC GRAMME). Dans le cadre de ces nouvelles méthodologies, les champs de déformation sont prédits en considérant un matériau texturé, dont la microstructure est parfaitement déterminée par les calculs CA. Ces méthodologies permettent, ainsi, de coupler résolution microstructurale et mécanique, et d'améliorer la prédiction du comportement des pièces, à la sollicitation mécanique subie en FA. Elles doivent, également, évoluer vers des modèles, plus précis et adaptés, de plasticité cristalline, notamment destinés à l'étude des superalliages base nickel, produits par FA, dont la

texturation est marquée. Ces différentes études, internes à 2MS, sont autant de supports intéressants pour le développement des méthodologies automatées cellulaires, dans l'objectif de prédire l'état mécanique final des pièces, dans la suite de nos travaux.

Ce cadre de travail, et les idées exprimées ici sur les perspectives de nos activités, nécessiteraient également, certainement, des moyens humains supplémentaires. En particulier, un besoin fort apparaît dans l'équipe 2MS, de développer nos compétences expérimentales. En premier lieu, ces développements sont liés à notre équipement de traction/relaxation Dedimet, destiné à caractériser mécaniquement les alliages métalliques à haute température. Ce système nous permet la réalisation de mesures de déformation dans des gammes de température importantes, imposées par chauffage résistif, pour des cycles de sollicitation donnés. Il doit nous permettre d'alimenter, sur la base de données expérimentales, les lois de comportement mécaniques à chaud exploités dans nos outils numériques, ou de valider les lois que nous souhaiterions être amenés à utiliser. L'arrivée, dans l'équipe 2MS, d'un enseignant-chercheur, avec un profil expérimental fort, soutiendrait ces développements d'essais, en lien avec la fabrication additive, sur lesquels nos activités numériques doivent nécessairement s'appuyer, pour valider ou enrichir les modèles proposés.

iii. Suivi des transformations de phases :

Les travaux réalisés dans le cadre de la librairie PhysalurgY ont permis de stabiliser, dans un environnement de travail unique et formalisé, nos différentes activités autour de la prédiction des transformations de phases des alliages métalliques couplés au calcul des équilibres thermodynamiques. Ces outils utilisent ainsi, indirectement, l'approche CALPHAD pour définir les états interfaciaux des phases en développement, à travers le logiciel Thermo-Calc, et exploitent les bases de données thermodynamiques accessibles. Comme nous l'avons indiqué précédemment, nous poursuivons l'objectif de diffuser, au mieux, cet outil et de pouvoir en faciliter l'utilisation et l'accès, notamment en contexte industriel. Il est important de mentionner, également, que les travaux présentés autour du suivi des transformations de phases dans les alliages métalliques trouveront une meilleure visibilité lors de l'Ecole d'été *Solidification 2024* que ma collègue du CEMEF, O. Senninger (CR Mines Paris – PSL), et moi-même, organisons en Juin 2024, à Oléron, avec le soutien du CNRS, du Réseau National de la Métallurgie (RNM) et du GDR ALMA [Sol24].

Dans ce cadre, il reste nécessaire de permettre cet accès à PhysalurgY à une plus grande communauté de personnes, académiques et industrielles. Ainsi, comme indiqué dans le chapitre précédent, une interface web est en cours de développement, destinée à faciliter l'usage de PhysalurgY, notamment auprès des partenaires actuels de nos projets de recherche dans l'équipe 2MS. Ce travail se réalise dans le cadre du mastère MaPMod de M. Ennaki (2023–2024) porté par Safran, que j'encadre avec Ch. A. Gandin et S. Kraria (IR CEMEF). À terme, cette interface doit leur donner la possibilité de bénéficier d'un accès immédiat aux résultats des activités financées et d'exploiter, personnellement, les outils numériques développés, dans une structure confidentielle et protégée. Cette interface doit, par là même, servir de vecteur à nos futurs développements, et se voir comme un outil de promotion des travaux de l'équipe, facilitant les démarches et le montage de projets à vocation industrielle. Elle doit également améliorer la visibilité académique et industrielle de cette librairie de calcul scientifique. En

complément, nous devons aussi réfléchir à la gestion optimale des masses de résultats générées par cet outil. Dans ce cadre, à nouveau, les méthodes de l'intelligence artificielle devraient nous aider à post-traiter et exploiter, de manière pertinente, ces données.

Bien évidemment, il apparaît tout aussi nécessaire d'étendre les domaines d'application de ces outils de suivi des transformations de phases. En particulier, les études récentes en FA nous ont conduits à contribuer au développement de modèles de solidification rapide, introduit dans PhysalurgY (outil PY\PHDV), et destinés au suivi des équilibres interfaciaux, dans différents régimes de croissance, pour des évolutions rapides des microstructures. Ce travail correspond à l'activité de doctorat de P. Martin (Doctorat CIFRE, 2021 – 2024), réalisé dans le projet NILS, soutenu par Safran, que j'encadre avec Ch. A. Gandin et M. Bellet. Ces outils permettent, déjà, de définir des modèles de microségrégation propres à la solidification des superalliages base nickel, exploités dans les procédés LPBF, dans le but d'améliorer la prédiction des défauts associés aux étapes de solidification [Mar23]. De plus, ce travail est complété par des modèles de suivi des processus de précipitation en fabrication additive, en cours de développement dans le cadre du doctorat de S. Ducottet (2023 – 2026), encadré avec Ch. A. Gandin, M. Bellet et Y. Zhang, s'inscrivant également dans le projet NILS. L'ambition affichée est, de suivre, à travers l'outil PY\PREC, ces processus d'évolutions métallurgiques lors des cycles thermiques rapides et complexes subis par les superalliages lors des procédés en FA. Il doit être rappelé que ces mêmes travaux autour de la solidification rapide sont en cours d'exploitation dans le master MaPMod de N. Rojas Londoño (2023 – 2024, ArcelorMittal), que j'encadre avec Ch. A. Gandin, dans l'objectif d'améliorer la compréhension des transformations de phases dans les aciers Usibor®, liés à l'utilisation de procédés de soudage laser. À terme, les divers outils cités autour du suivi des transformations de phases en refroidissement rapide doivent pouvoir être utilisés afin de déterminer les phases primaires de solidification, ainsi que les cartes de sélection des microstructures, relatives aux croissances dendritiques et eutectiques, ce travail correspondant aux objectifs affichés dans le doctorat de R. Hammoud (Contrat doctoral, 2023 – 2026), porté par O. Senninger, que je co-encadre avec M. Bellet. Ces travaux devraient aussi trouver leur usage, rapidement, pour des applications FA, dans le contexte des alliages multicomposés industriels.

Le développement de ces activités thermodynamiques, dans les différentes directions mentionnées, nécessiterait, également, en réponse aux ambitions affichées, de s'appuyer sur des moyens humains supplémentaires. L'arrivée, dans notre équipe, d'un enseignant chercheur expert dans le développement de méthodes et de solutions numériques nouvelles relativement aux thématiques mentionnées (IA, GPU) serait, en ce sens, très bénéfique. Cette arrivée serait nécessaire pour permettre le développement, la stabilisation et à la pérennisation de notre librairie de calcul PhysalurgY, destinée à la modélisation des transformations de phases dans les alliages métalliques, en permettant également d'élargir la gamme des matériaux et des procédés étudiés. Elle conduirait également à améliorer la visibilité et la diffusion de ces travaux, auprès des communautés autant scientifiques que industrielles.

Références Bibliographiques

« Plus on lit, et moins on imite. »

Jules Renard, Journal (26 Avril 1893)

- [Aar70] H. B. Aaron, D. Fainstein, G. R. Kotler, Diffusion-Limited Phase Transformations: A Comparison and Critical Evaluation of the Mathematical Approximations, *Journal of Applied Physics* 41 (11), 1970, 4404–4410
- [Abd06] S. Abdullah, J.C. Choi, J.A. Giacomini, J.R. Yates, Bump extraction algorithm for variable amplitude fatigue loading, *International Journal of Fatigue* 28 (7), 2006, 675-691
- [Ach18] B. Acherjee, Hybrid laser arc welding: State-of-art review, *Optics and Laser Technology* 99, 2018, 60-71
- [AFH23] AFH, Plateforme Additive Factory Hub, www.additivefactoryhub.com
- [Aft23] AFTherMat – Association Française de Thermodynamique des Matériaux, www.afthermat.fr
- [Agr23] J. Ågren, CALPHAD and the materials genome – A 10 year anniversary, *CALPHAD* 80, 2023, 102532
- [Ali22] N. Alinejadian, L. Kollo, I. Odnevall, Progress in additive manufacturing of MoS₂-based structures for energy storage applications – A review, *Materials Science in Semiconductor Processing* 139, 2022, 106331
- [Alm23] GDR ALMA (Alliages Métalliques par/pour la fabrication additive), GDR 2089, <https://alma.cnrs.fr/>
- [Ama14] H.-Y. Aمانieu, D. Rosato, M. Sebastiani, F. Massimi, D. C. Lupascu, Mechanical property measurements of heterogeneous materials by selective nanoindentation: Application to LiMn₂O₄ cathode, *Materials Science and Engineering: A* 593, 2014, 92–102
- [And92] J. Andersson, J. Ågren, Models for numerical treatment of multicomponent diffusion in simple phases, *Journal of Applied Physics* 72 (4), 1992, 1350–1355
- [Anr22] Agence Nationale de la Recherche (ANR), Des matériaux innovants pour simplifier les dispositifs PhOLEDs des écrans et des systèmes d'éclairage de demain : le projet ANR SPIRO-QUEST, <https://anr.fr/en/latest-news/read/news/des-materiaux-innovants-pour-simplifier-les-dispositifs-pholeds-des-ecrans-et-des-systemes-declaira/>
- [Anr23] Agence Nationale de la Recherche (ANR), Appel à projets bilatéral ANR – JST CREST sur les thématiques : "Exploring Unknown Materials", "Society 5.0 System Software" et "MultiSensing", <https://anr.fr/fr/detail/call/appel-a-projets-bilateral-anr-jst-crest-sur-les-thematiques-exploring-unknown-materials-soci/>
- [Ans00] K. Anselme, M. Bigerelle, B. Noel, E. Dufresne, D. Judas, A. Iost, P. Hardouin, Qualitative and quantitative study of human osteoblast adhesion on materials with various surface roughnesses, *Journal of Biomedical Materials Research* 49 (2), 2000, 155–166
- [Ant23] E. A. Antillon, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Solute trapping and solute drag during non-equilibrium solidification of Fe–Cr alloys, *Acta Materialia* 248, 2023, 118769
- [App23] APP - Agence pour la protection des programmes, <https://www.app.asso.fr/>
- [Ash17] M. F. Ashby, *Materials Selection in Mechanical Design*, Fifth Edition, Butterworth-Heinemann editor, 2017

- [Azi56] P.M. Aziz, Application of the statistical theory of extreme values to the analysis of maximum pit depth data for aluminium, *Corrosion* 13, 1956, 495-506
- [Azi82] M. J. Aziz; Model for solute redistribution during rapid solidification, *Journal of Applied Physics* 53 (2), 1982, 1158-1168
- [Azi83] M.J. Aziz, Dissipation-theory treatment of the transition from diffusion controlled to diffusionless solidification, *Applied Physics Letters* 43 (6), 1983, 552-554
- [Azi88] M.J. Aziz, T. Kaplan, Continuous growth model for interface motion during alloy solidification, *Acta Metallurgica* 36 (8), 1988, 2335-2347
- [Azi94] M.J. Aziz, W. Boettinger, On the transition from short-range diffusion-limited to collision-limited growth in alloy solidification, *Acta Metallurgica et Materialia* 42 (2), 1994, 527-537
- [Baï00] J.-P. Baïlon, J.-M. Dorlot, *Des matériaux* (3^{ème} édition), Presses internationales polytechniques, 2000
- [Bai18] X. Bai, P. Colegrove, J. Ding, X. Zhou, C. Diao, P. Bridgeman, J. Hönnige, H. Zhang, S. Williams, Numerical analysis of heat transfer and fluid flow in multilayer deposition of PAW-based wire and arc additive manufacturing, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 124, 2018, 504-516
- [Baj11] S. Bajaj, A. Landa, P. Söderlind, P. E.A. Turchi, R. Arróyave, The U–Ti system: Strengths and weaknesses of the CALPHAD method, *Journal of Nuclear Materials* 419 (1–3), 2011, 177-185
- [Ban23] A. Bansal, P. Kumar, S. Yadav, V.S. Hariharan, R. M R, G. Phanikumar, Accelerated design of high entropy alloys by integrating high throughput calculation and machine learning, *Journal of Alloys and Compounds* 960, 2023, 170543
- [Bas06] O. Basset, *Simulation Numérique d'Ecoulements Multi Fluides sur Grille de Calcul*. PhD thesis, Mines ParisTech, 2006
- [Bat16] C. Bataille, E. Luc, M. Bigerelle, R. Deltombe, M. Dubar, Rolls wear characterization in hot rolling process, *Tribology International* 100, 2016, 328-337
- [Bau21] A. Baumard, D. Ayrault, O. Fandeur, C. Bordreuil, F. Deschaux-Beaume, Numerical prediction of grain structure formation during laser powder bed fusion of 316 L stainless steel, *Materials & Design* 199, 2021, 109434
- [Bay21] M. Bayat, W. Dong, J. Thorborg, A. C. To, J. H. Hattel, A review of multi-scale and multi-physics simulations of metal additive manufacturing processes with focus on modeling strategies, *Additive Manufacturing* 47, 2021, 102278
- [Bed14] M. Bedel, *Étude de la formation des structures de solidification et des macroségrégations en coulée semi-continue d'aluminium*, Thèse de doctorat en Sciences des matériaux, Université de Lorraine, soutenue le 28 Janvier 2014

- [Bee08] D. Beegan, S. Chowdhury and M.T. Laugier, Modification of composite hardness models to incorporate indentation size effects in thin films, *Thin Solid Films* 516, 2008, 3813-3817
- [Bel09] M. Bellet, O. Cerri, M. Bobadilla, Y. Chastel, Modeling hot tearing during solidification of steels: assessment and improvement of macroscopic criteria through the analysis of two experimental tests. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 40 (11), 2705-2717
- [Bel13] M. Bellet, M. Hamide, Direct modeling of material deposit and identification of energy transfer in gas metal arc welding, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 23 (8), 2013, 1340-1355
- [Bel16] M. Bellet, G. Qiu, J.M. Carpreau, Comparison of two hot tearing criteria in numerical modelling of arc welding of stainless steel AISI 321. *Journal of Materials Processing Technology*, 230, 2016, 143-152
- [Bel18] M. Bellet, M. Bernacki, N. Bozzolo, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, E. Massoni, C. Moussa, O. Senninger, Y. Zhang, Action prospective CNRS ‘Nouveaux alliages métalliques’, Grenoble, 25-26 octobre 2018
- [Ben97] P. Benaben, Chromage, Dossier des Techniques de l’Ingénieur - m1615, 1997
- [Ber05] G. Béranger, H. Mazille, Approche scientifique des surfaces et de leurs traitements. Introduction, *Techniques de l’Ingénieur*, dossier m1424, 2005
- [Ber12] B. Berman, 3-D printing: The new industrial revolution, *Business Horizons* 55 (2), 2012, 155-162
- [Bes21] H. Besharatloo, J.M. Wheeler, Influence of indentation size and spacing on statistical phase analysis via high-speed nanoindentation mapping of metal alloys. *Journal of Materials Research* 36, 2021, 2198–2212
- [Bid18] P. Bidare, I. Bitharas, R.M. Ward, M.M. Attallah, A.J. Moore, Fluid and particle dynamics in laser powder bed fusion, *Acta Materialia*, 142, 2018, 107-120
- [Bie22] F. Biermair, V. I. Razumovskiy, G. Ressel, Influence of alloying on thermodynamic properties of AlCoCrFeNiTi high entropy alloys from DFT calculations, *Computational Materials Science* 202, 2022, 110952
- [Big03] M. Bigerelle, D. Najjar, A. Iost, Relevance of roughness parameters for describing and modelling machined surfaces, *Journal of Materials Science*, 38, 2003, 2525-2536
- [Big08] M. Bigerelle, A. Van Gorp, A. Iost, Multiscale Roughness Analysis in injection-molding process, *Polymer Engineering and Science*, 48 (9), 2008, 1725-1736
- [Big13] M. Bigerelle, G. Guillemot, Z. Khawaja, M. El Mansori, J. Antoni, Relevance of Wavelet Shape Selection in a Complex Signal, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 41, 2013, 14-33
- [Big15] M. Bigerelle, J.M. Nianga, A. Iost, Decomposition of a tribological system by chaos theory on rough surfaces, *Tribology International* 82, Part B, 2015, 561-576

- [Big17] M. Bigerelle, Vers la construction d'un patrimoine de surfaces topographiques, 23^e Congrès Français de Mécanique Lille, 28 Août-1^{er} Septembre 2017
- [Bob88] M. Bobadilla, J. Lacaze, L. G., Influence des conditions de solidification sur le déroulement de la solidification des aciers inoxydables austénitiques, *Journal of Crystal Growth* 89, 1988, 531-544
- [Boe86] W.J. Boettinger, S.R. Coriell, Microstructure formation in rapidly solidified alloys, in: P.R. Sahm, H. Jones, C.M. Adam (Eds.), *Science and Technology of the Undercooled Melt*, 1986, 81–109
- [Boe96] R. Boekholt, 3 - Welding systems and processes used in the fabrication, assembling and building dock, Editor(s): Richard Boekholt, In *Woodhead Publishing Series in Welding and Other Joining Technologies, Welding Mechanisation and Automation in Shipbuilding Worldwide*, Woodhead Publishing, 1996, 69-102
- [Bor14] C. Bordreuil, A. Niel, Modeling of hot cracking in welding with a cellular automaton combined with an intergranular fluid flow model, *Computational Materials Science* 82, 2014, 442-450
- [Bou09] B. Bounichane, Vers une méthodologie d'Analyse des Etats de Surfaces en Science des Matériaux : de la Caractérisation à la Recherche de Paramètres Pertinents, Doctorat de l'Université de Technologie de Compiègne, soutenue le 3 décembre 2009
- [Bra91] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modelling surface tension. *Journal of Computational Physics* 100, 1991, 335–354
- [Bre13] Y. Bréchet, La science des matériaux : du matériau de rencontre au matériau sur mesure, Collège de France, Leçon inaugurale prononcée le jeudi 17 janvier 2013
- [Bri10] T. B. Britton, H. Liang, F. P. E. Dunne, A. J. Wilkinson, The effect of crystal orientation on the indentation response of commercially pure titanium: experiments and simulations, *Proceedings of the Royal Society*, 466, 2010, 695-719
- [Bri13] The British Museum, Department 'Prehistory and Europe', Registration number 2007,8045.34, www.britishmuseum.org, consulté le 19/01/2024
- [Büc60] H. Bückle, L'essai de micro dureté et ses applications, Publications Scientifiques et Techniques du Ministère de l'Air, NT90, Paris, 1960
- [Büc65] H. Bückle, *La Machine-Outil Française* 206, 1965, 125
- [Büc71] H. Bückle, Use of the Hardness Test to Determine Other Materials Properties, in: J.H. Westbrook, H. Conrad (Eds.), *Science of Hardness Testing and Its Research Applications*, ASM, Metals park, Ohio, 1971, 453
- [Bur87] P.J. Burnett, D.S. Rickerby, The mechanical properties of wear-resistant coatings: I: Modelling of hardness behavior, *Thin Solid Films* 148, 1987, 41-50
- [Cal09] F. Caleyó, J.C. Velázquez, A. Valor, J.M. Hallen, Markov chain modeling of pitting corrosion in underground pipelines, *Corrosion Science* 51, 2197-2207, 2009

- [Cam23a] T. Camus, Modélisation des microstructures générées en fabrication additive par procédé LPBF d'un alliage base nickel, Doctorat PSL, Sophia Antipolis, 2023
- [Cam23b] T. Camus, D. Maisonnnette, O. Baulin, O. Senninger, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional modeling of solidification grain structures generated by laser powder bed fusion, *Materialia* 30, 2023, 101804
- [Cam23c] T. Camus, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, O. Senninger, D. Maisonnnette, O. Baulin, Three-dimensional modelling of solidification grain structures generated by laser powder bed fusion - Application to Inconel 718 Nickel-based superalloy, Journées GDR ALMA, INSA Rouen, 27-29 Juin 2023
- [Cao09] W. Cao, S.-L. Chen, F. Zhang, K. Wu, Y. Yang, Y.A. Chang, R. Schmid-Fetzer, W.A. Oates, PANDAT software with PanEngine, PanOptimizer and PanPrecipitation for multi-component phase diagram calculation and materials property simulation, *CALPHAD* 33 (2), 2009, 328-342
- [Car13] T. Carozzani, Ch.-A. Gandin, H. Digonnet, Optimized parallel computing for cellular automaton–finite element modeling of solidification grain structures, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 22 (1), 2013, 015012
- [CET23] CETIM, Centre technique des industries mécaniques, <https://www.cetim.fr/>
- [Cha98] M.M. Chaudhri, M. Winter, The load-bearing area of a hardness indentation, *Journal of Physics D: Applied Physics* 21, 1998, 370-374
- [Che01] X. Chen, J.J. Vlassak, Numerical study on the measurement of thin film mechanical properties by means of nanoindentation, *Journal of Materials Research* 16 (10), 2001, 2974-2982
- [Che08] Q. Chen, J. Jeppsson, J. Ågren, Analytical treatment of diffusion during precipitate growth in multicomponent systems, *Acta Materialia* 56 (8), 2008, 1890-1896
- [Che10] L. Cherif, S.M. Hamza, M. Debbal, F. Bereksi-Reguig, Choice of the wavelet analyzing in the phonocardiogram signal analysis using the discrete and the packet wavelet transform, *Expert Systems with Applications* 37, 2010, 913–918
- [Che14a] S. Chen, Three dimensional Cellular Automaton-Finite Element (CAFE) modeling for the grain structures development in Gas Tungsten / Metal Arc Welding processes, Doctorat Mines de Paris, Sophia Antipolis, 2014
- [Che14b] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, 3D Coupled Cellular Automaton-Finite Element Modeling for Solidification Grain Structures in Gas Tungsten Arc Welding, *ISIJ International* 54, 2014, 402
- [Che15] R. Chen, Q. Xu, B. Liu, Cellular automaton simulation of three-dimensional dendrite growth in Al–7Si–Mg ternary aluminum alloys, *Comput. Mater. Sci.* 105, 2015, 90–100
- [Che16a] S. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional cellular automaton-finite element modeling of solidification grain structures for arc-welding processes, *Acta Materialia* 115, 2016, 448-467

- [Che16b] M. Chen, J. Xu, L. Xin, Z. Zhao, F. Wu, Comparative study on interactions between laser and arc plasma during laser-GTA welding and laser-GMA welding, *Optics and Lasers in Engineering* 85, 2016, 1-8
- [Che17a] F. Chegdani, S. Mezghani, M. El Mansori, Correlation between mechanical scales and analysis scales of topographic signals under milling process of natural fibre composites, *Journal of Composite Materials* 51 (19), 2017, 2743-2756
- [Che17b] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Three-dimensional finite element thermomechanical modeling of additive manufacturing by selective laser melting for ceramic materials, *Additive Manufacturing*, 16, 2017, 124-137
- [Che18a] Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical modelling of the impact of energy distribution and Marangoni surface tension on track shape in selective laser melting of ceramic material, *Additive Manufacturing*, 21, 2018, 713-723
- [Che18b] Q. Chen, Thermomechanical numerical modeling of additive manufacturing by selective laser melting of powder bed - Application to ceramic materials, Doctorat PSL Research University, Ecole doctorale Sciences Fondamentales et Appliquées, Spécialité Mécanique Numérique et Matériaux, 2018
- [Che19] Q. Chen, L. Moniz Da Silva Sancho, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, J.-D. Bartout, M.H. Berger, C. Colin, Level-set modelling of Laser Beam Melting process applied to ceramic materials - Comparison with experimental results, 5th International Conference on Advances in Solidification Processes (ICASP-5) - 5th International Symposium On Cutting Edge of Computer Simulation of Solidification, Casting And Refining (CSSCR-5) , Salzburg, 17 juin 2019 - 21 juin 2019
- [Che23a] L. Che, Z. He, K. Zheng, T. Si, M. Ge, H. Cheng, L. Zeng, Deep learning in alloy material microstructures: Application and prospects, *Materials Today Communications* 37, 2023, 107531
- [Che23b] M.W. Chen, Z.D. Wang, The evolution and morphological stability of a particle in a binary alloy melt, *Journal of Crystal Growth* 607, 2023, 127113
- [Chi95] D. Chicot, J. Lesage, Absolute hardness of films and coatings, *Thin Solid Films* 254, 1995, 123-130
- [Chi20] S. Chibani, F.-X. Coudert, Machine learning approaches for the prediction of materials properties. *APL Mater.* 8, 2020, 080701
- [Cho15] R. Chou, J. Milligan, M. Paliwal, and M. Brochu. Additive Manufacturing of Al-12Si Alloy Via Pulsed Selective Laser Melting. *JOM*, 67(3):590–596, 2015
- [Cho22] S. Chowdhury, N. Yadaiah, C. Prakash, S. Ramakrishna, S. Dixit, L. Raj Gupta, D. Buddhi, Laser powder bed fusion: a state-of-the-art review of the technology, materials, properties & defects, and numerical modelling, *Journal of Materials Research and Technology* 20, 2022, 2109-2172
- [Civ23] Logiciel CIVA de simulation et d'analyse CND : <https://www.extende.com/fr>

- [CMA16] Projets phare - Fabrication Additive : La Fusion Sélective par Laser Appliquée à des Matériaux Céramiques : <https://agenda.minesparis.psl.eu/Donnees/data46/4667-Projet-phare-Matériaux-2016.pdf>
- [CMA17] Impression 3D en céramique sur lit de poudre, Présentation des activités du CMAT et du projet de doctorat de L. Moniz Da Silva Sancho, https://youtu.be/2fm-UX6_ZmA
- [Cmo24] Corning Museum of Glass, Department Ancient - Origins of Glassmaking, Corning, NY, Etats-Unis, www.cmog.org/set/mythology, consulté le 19/01/2024
- [Coa68] D. Coates, S. Subramanian, G.R. Purdy, Solid-liquid interface stability during solidification of dilute ternary alloys, Transactions of the Metallurgical Society of AIME 242, 1968, 800
- [Coe22] V. Coen, L. Goossens, B. Van Hooreweder, Methodology and experimental validation of analytical melt pool models for laser powder bed fusion, Journal of Materials Processing Technology 304, 2022, 117547
- [Col01] S. Coles, An introduction to statistical modeling of extreme values, Springer series in statistic, Springer-Verlag, Londres, 2001, 47
- [Col16] J. Colin, P. W. Voorhees, Morphological instability of a solid sphere of dilute ternary alloy growing by diffusion from its melt, Journal of Crystal Growth 448, 2016, 17-20
- [Col21] Projet ANR COLUMBO : Multiscale Characterization and cOntrollability by Laser Ultrasounds of WLAM components: towards a physics-Based and ML enhanced online mOnitoring, ANR PRCE 21-CE08-0026, <https://columbo-project.cea.fr/>
- [Com23] COMSOL Multiphysics®, <https://www.comsol.fr>
- [Cos04] F. Costes. Modélisation thermomécanique tridimensionnelle par éléments finis de la coulée continue d'aciers. PhD thesis, Mines ParisTech, 2004
- [Cou11] T. Coupez, Metric construction by length distribution tensor and edge based error for anisotropic adaptive meshing, Journal of Computational Physics, 230 (7), 2011, 2391-2405
- [CP18] Site web custompartnet, www.custompartnet.com/wu/direct-metal-laser-sintering. Consulté le 01/12/2023
- [Cul89] P. McCullagh, J.A. Nelder, Generalized Linear Models, 2nd ed., Chapman & Hall, London, 1989
- [Cun19] R. Cunningham, C. Zhao, N. Parab, C. Kantzos, J. Pauza, K. Fezzaa, T. Sun, A. D. Rollett, Keyhole threshold and morphology in laser melting revealed by ultrahigh-speed x ray imaging, Science 363, 2019, 849-852
- [CW13] Composites World, GE and GrabCAD, Open 3D-printing challenge to redesign a jet engine bracket, 2013, www.compositesworld.com/blog/post/additive-manufacturing-metal-vs-composites
- [Dah12] Chaire industrielle Daher - MINES ParisTech - École des Mines de Nantes, Procédés métalliques pour l'aéronautique et le nucléaire, Recueil de Chaires ParisTech, https://paristech.fr/sites/default/files/documents/recueil_des_chaires_paristech-29-05-12.pdf

- [Dan09] J.A. Dantzig, M. Rappaz, Solidification, EPFL Press, Engineering Science, 2009
- [Dar15] DARPA, Defense Advanced Research Projects Agency, Materials Science: Advancing the Next Revolution of “Stuff”, <https://www.darpa.mil/news-events/2015-08-14>
- [Deb18] T. DebRoy, H.L. Wei, J.S. Zuback, T. Mukherjee, J.W. Elmer, J.O. Milewski, A.M. Beese, A. Wilson-Heid, A. De, W. Zhang, Additive manufacturing of metallic components – Process, structure and properties, *Progress in Materials Science* 92, 2018, 112-224
- [Del14] R. Deltombe, K. J. Kubiak, M. Bigerelle, How to Select the Most Relevant 3D Roughness Parameters of a Surface, *Scanning* 36, 2014, 150–160
- [Dem22] A. G. Demir, J. Kim, F. Caltanissetta, A. J. Hart, C. C.Tasan, B. Previtali, B. M. Colosimo, Enabling multi-material gradient structure in laser powder bed fusion, *Journal of Materials Processing Technology* 301, 2022, 117439
- [Des12] O. Desmaison, G. Guillemot, M. Bellet, A Multi-Physic Level Set Approach for the Simulation of the Hybrid Laser / GMAW Process, IWS conference, 10th International Seminar Numerical Analysis of Weldability, Schloss Seggau, Graz, Autriche, 24-26 September 2012, Eds. C. Sommitsch, N. Enzinger, Seggau, Austria. Technical University of Graz, 725-736
- [Des13] O. Desmaison, Modélisation numérique d’un procédé de soudage hybride arc / laser en approche Level Set : application au soudage multi-passes de tôles d’acier de forte épaisseur, Doctorat Mines ParisTech, soutenu le 16 décembre 2013
- [Des14] O. Desmaison, M. Bellet, G. Guillemot, A Level Set Approach for the simulation of the Multipass Hybrid Laser / GMA Welding Process, *Computational Materials Science*, 91, 2014, 240-250
- [Dha22] G. Dharmalingam, R. Baskar, M. Arun Prasad, Sachin Salunkhe, Development of microstructure - processing correlations of Inconel718 through additive manufacturing, *Materials Today: Proceedings* 68 (6), 2022, 1891-1897
- [Dic23] Simulate diffusion-controlled reactions in multicomponent alloys using the Add-on Diffusion Module (DICTRA), <https://thermocalc.com/products/add-on-modules/diffusion-module-dictra>
- [Du22] Q. Du, A. S. Azar, M. M'Hamdi, Kinetic interface condition phase diagram for the rapid solidification of multi-component alloys with an application to additive manufacturing, *CALPHAD* 76, 2022, 102365
- [Dub14] A. Dubois, E. Luc, M. Dubar, L. Dubar, C. Thibaut, J.-M. Damasse, Initiation of Sticking during Hot Rolling of Stainless Steel Plate, *Procedia Engineering* 81, 2014, 1958-1963
- [Duh02] P. Duhem, *Thermodynamique et Chimie, Leçons élémentaires*, A. Hermann et fils, Paris, 1902
- [Dor19] T. T. Dorini, L. T.F. Eleno, Liquid Bi–Pb and Bi–Li alloys: Mining thermodynamic properties from ab-initio molecular dynamics calculations using thermodynamic models, *CALPHAD* 67, 2019, 101687

- [Ebr22] A. Ebrahimi, M. Sattari, S. J.L. Bremer, M. Luckabauer, G.-W. R.B.E. Römer, I. M. Richardson, C. R. Kleijn, M. J.M. Hermans, The influence of laser characteristics on internal flow behaviour in laser melting of metallic substrates, *Materials & Design* 214, 2022, 110385
- [Efr79] B. Efron, 1977-Rietz Lecture, Bootstrap methods – Another look at the jackknife, *Annals of statistics*, 7 (1), 1979, 1-26
- [Efr93] B. Efron et R.J. Tibshirani, An introduction to the bootstrap, Chapman and Hall, Londres (Eds.), 1993
- [Eik23] J. Eiken, Exploring microstructure evolution of cast alloys in 3D space using phase-field simulations, Conference: WebLearn module “Simulation Technology in Metal Casting”, Jönköping University, Webinar, Mai 2023
- [Elh22] B. Elhazmiri, N. Naveed, M. Naveed Anwar, M. Irfan Ul Haq, The role of additive manufacturing in industry 4.0: An exploration of different business models, *Sustainable Operations and Computers* 3, 2022, 317-329
- [Esi16] V. A. Esin, V. Maurel, P. Breton, A. Köster, S. Selezneff, Increase in ductility of Pt-modified nickel aluminide coating with high temperature ageing, *Acta Materialia* 105, 2016, 505-518
- [Fac23] FactSage – The Integrated Thermodynamic Databank System, www.factsage.com
- [Fal22] Projet ANR PRCE ‘Fabrication additive d’alliages magnétiques à faibles pertes par feuilletage 3D’ (FALSTAFF), <https://anr.fr/Projet-ANR-22-CE08-0029>
- [Fan22] J. Fang, M. Xie, X. He, J. Zhang, J. Hu, Y. Chen, Y. Yang, Q. Jin, Machine learning accelerates the materials discovery, *Materials Today Communications* 33, 2022, 104900
- [Far96] G. Farin, *Curves and Surfaces for Computer-Aided Geometric Design—A Practical Guide*, 4th ed., Academic press, New York, 1996
- [Fel05] E. Felder, Dureté des corps et analyse qualitative, *Techniques de l’Ingénieur*, dossier m4154, 2005
- [Fle94] N. A. Fleck, G. M. Muller, M. F. Ashby, J. W. Hutchinson, Strain gradient plasticity: Theory and experiment, *Acta Metallurgica et Materialia*, 42 (2), 1994, 475-487
- [Fou07] B. Fournier, N. Rupin, M. Bigerelle, D. Najjar, A. Iost, R. Wilcox, Estimating the parameters of a generalized lambda distribution, *Comput. Stat. Data Anal.* 51, 2007, 2813-2835
- [Fra12] E. Franquet, S. Gibout, J.-P. Bédécarrats, D. Haillot, J.-P. Dumas, Inverse method for the identification of the enthalpy of phase change materials from calorimetry experiments, *Thermochimica Acta*, 546, 2012, 61-80
- [Fra14] W. E. Frazier, Metal Additive Manufacturing: A Review, *Journal of Materials Engineering and Performance* 23 (6), 2014, 1917-1928
- [Gad02] E.S. Gadelmawla, M.M. Koura, T.M.A Maksud, I.M. Elewa, H.H. Soliman, Roughness parameters, *Journal of Materials Processing Technology*, 2002, 133-145

- [Gal14] P.K. Galenko, M. Kolbe, D.M. Herlach and M. Rettenmayr, Kinetics of dendrite growth and dendritic fragmentation in the undercooled Co_{81.2} Cu_{18.8} alloy's melt, *Metall. Res. Technol.* 111 (5), 2014, 295-303
- [Gam04] C. Gamonpilas, E. P. Busso, On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems, *Materials Science and Engineering: A* 380 (1-2), 2004, 52-61
- [Gan93] Ch.-A. Gandin, M. Rappaz, R. Tintiller, Three-dimensional probabilistic simulation of solidification grain structures: Application to superalloy precision castings, *Metall. Trans. A* 24A, 1993, 467–479
- [Gan94a] Ch.-A. Gandin, M. Rappaz, A coupled Finite Element-Cellular Automaton model for the prediction of dendritic grain structure in solidification processes, *Acta Metallurgica et Materialia* 42, 1994, 2233-2246
- [Gan94b] Ch.-A. Gandin, M. Rappaz, R. Tintillier, 3-Dimensional simulation of the grain formation in investment castings. *Metall Mater Trans A* 25, 1994, 629–635
- [Gan00] Ch.-A Gandin, From constrained to unconstrained growth during directional solidification, *Acta Materialia* 48 (10), 2000, 2483-2501
- [Gan03] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, B. Appolaire, N. T. Niane, Boundary layer correlation for dendrite tip growth with fluid flow, *Materials Science and Engineering A* 342, 2003, 44 - 50
- [Gan15] Ch.-A. Gandin, G. Guillemot Analytical model for equiaxed globulitic solidification in multicomponent alloys, International Congress & Exhibition “Non-Ferrous Metals and Minerals”, Session "Casting of non-ferrous metals and alloys", International Business Center “Siberia” (Krasnoyarsk, RUS) 14-17 Septembre 2015
- [Gao99] H. Gao, Y. Huang, W.D. Nix, J.W. Hutchinson , Mechanism-based strain gradient plasticity—I. Theory, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47 (6), 1239-1263
- [Gao16] Z. Gao, X. Shao, P. Jiang, L. Cao, Q. Zhou, C. Yue, Y. Liu, C. Wang, Parameters optimization of hybrid fiber laser-arc butt welding on 316L stainless steel using Kriging model and GA, *Opt. Laser Technol.* 83, 2016, 153–162
- [Gao22a] F. Gao, B. Macquaire, Y. Zhang, M. Bellet, A new localized inverse identification method for high temperature testing under resistive heating: Application to the elastic-viscoplastic behaviour of L-PBF processed In718, *Strain*, 58 (3), 2022, e12409
- [Gao22b] J. Gao, J. Zhong, G. Liu, S. Yang, B. Song, L. Zhang, Z. Liu, A machine learning accelerated distributed task management system (Malac-Distmas) and its application in high-throughput CALPHAD computation aiming at efficient alloy design, *Advanced Powder Materials* 1 (1), 2022, 100005
- [Ge17] General Electric, GE Additive takes bold moves in aerospace industry, www.ge.com/additive/press-releases/ge-additive-takes-bold-moves-aerospace-industry, consulté le 19/01/24
- [Ghi94] D. Ghiglione, C. Leroux, C. Tournier, Cémentation. Carbonituration - Définitions et principes, *Dossier des Techniques de l'Ingénieur m1226*, 1994

- [Gib76] J.W. Gibbs, Transactions of the Connecticut Academy III, 1876, 108-248
- [Gib78] J.W. Gibbs, Transactions of the Connecticut Academy III, 1878, 343-524
- [Gil96] P. Gilgien, Calcul de cartes de microstructures de solidification pour le système Al-Fe-Si, Doctorat EPFL, Lausanne, 1996
- [Goh21] G.D. Goh, S.L. Sing, W.Y. Yeong, A review on machine learning in 3D printing: applications, potential, and challenges. Artificial Intelligence Review 54, 2021, 63–94
- [Goi16] G. Le Goïc, M. Bigerelle, S. Samper, H. Favrelière, M. Pillet, Multiscale roughness analysis of engineering surfaces: A comparison of methods for the investigation of functional correlations, Mechanical Systems and Signal Processing 66–67, 2016, 437-457
- [Goo20] R. E. A. Goodall, A. A. Lee, Predicting materials properties without crystal structure: deep representation learning from stoichiometry, Nature Communications 11 (1), 2020
- [Gor16] A. van Gorp, M. Bigerelle, D. Najjar, Relationship between brightness and roughness of polypropylene abraded surfaces, Polymer Engineering & Science 56 (1), 2016, 103-117
- [Gra20] D. Grange, Fusion laser sélective de pièces en Inconel 738 et René 77 : vers une maîtrise de la fissuration au cours du procédé pour les superalliages à haute fraction de précipités γ' , Doctorat Université PSL, 2020
- [Gra21] D. Grange, A. Queva, G. Guillemot, M. Bellet, J-D. Bartout, C. Colin, Effect of processing parameters during the laser beam melting of Inconel 738: Comparison between simulated and experimental melt pool shape, Journal of Materials Processing Technology 289, 2021, 116897
- [Gu07] D. Gu and Y. Shen. Balling phenomena during direct laser sintering of multi-component Cu-based metal powder. Journal of Alloys and Compounds, 432 (1–2):163–166, 2007
- [Gu12] D. D. Gu, W. Meiners, K. Wissenbach and R. Poprawe, Laser additive manufacturing of metallic components: materials, processes and mechanisms, International Materials Reviews, 57 (3), 2012, 133-164
- [Gue11a] E.L. Guen, R. Fabbro, M. Carin, F. Coste, P.L. Masson, Analysis of hybrid Nd: Yag laser-MAG arc welding processes, Opt. Laser Technol. 43, 2011, 1155–1166
- [Gue11b] E.L. Guen, M. Carin, R. Fabbro, F. Coste, P.L. Masson, 3D heat transfer model of hybrid laser Nd:Yag-MAG welding of S355 steel and experimental validation, Int. J. Heat Mass Transf., 54, 2011, 1313–1322
- [Gui04] G. Guillemot, Formation de Structures de Grains dans des Alliages à Solidification Dendritique – Modélisation Couplée Automates Cellulaires et Eléments Finis, Doctorat en Science et Ingénierie des Matériaux, Institut National Polytechnique de Lorraine (INPL), soutenu le 7 Juillet 2004

- [Gui10] G. Guillemot, A. Iost, D. Chicot, ‘Comments on the paper “Modification of composite hardness models to incorporate indentation size effects in thin films”, D. Beegan, S. Chowdhury and M.T. Laugier, Thin Solid Films 516, 2008, 3813-3817’, Thin Solid Films, 518 (8), 2010, 2097-2101
- [Gui11] G. Guillemot, A. Iost, A. Van Gorp, S. Allain, Caractérisation des aciers innovants par essais mécaniques croisés, Matériaux et Techniques 99 (2), 2011, 227-238
- [Gui12a] G. Guillemot, A. van Gorp, T. Coorevits, A. Iost, Estimation of the Constitutive Law by Dual Small Punch Test and Instrumented Indentation, Solid State Phenomena (Volume 188 - Advanced Materials and Structures IV), 2012, 193-198
- [Gui12b] G. Guillemot, M. Bigerelle, J. Antoni, K. Anselme, How to characterize the regularity of surface topographies ?, Journal of Physics : Conference Series 311 (1), 2011, art. 012012 (*article de conference: Metrology and Properties of Engineering Surfaces, 2011*)
- [Gui14] G. Guillemot, M. Bigerelle, Z. Khawaja, 3D Parameter to Quantify the Anisotropy Measurement of Periodic Structures on Rough Surfaces, Scanning 36, 2014, 127-133
- [Gui15] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Analytical model for equiaxed globular solidification in multicomponent alloys, Acta Materialia 97, 2015, 419-434 [+Corrigendum in Acta Materialia 122, 2017, 513-514]
- [Gui17] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, An analytical model with interaction between species for growth and dissolution of precipitates, Acta Materialia 134, 2017, 375-393
- [Gui21] G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, Morphological stability of spherical particles - Extension of the Mullins-Sekerka criteria to multi-component alloys under a non-stationary diffusive regime, Acta Materialia 205, 2021, 116539
- [Gui22] G. Guillemot, O. Senninger, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Thermodynamic coupling in the computation of dendrite growth kinetics for multicomponent alloys, CALPHAD 77, 2022, 102429
- [Gum58] E.J. Gumbel, Statistics of Extremes, Columbia Univ. Press, 1958
- [Gus09] A. V. Gusarov, I. Yadroitsev, Ph. Bertrand, I. Smurov, Model of Radiation and Heat Transfer in Laser-Powder Interaction Zone at Selective Laser Melting, Journal of Heat Transfer, 131 (7), 2009, 072101
- [Hal16] S. Hällgren, L. Pejryd, J. Ekengren, (Re)Design for Additive Manufacturing, Procedia CIRP, 50, 2016, 246-251
- [Ham08] M. Hamide, Modélisation numérique du soudage à l’arc des aciers, Doctorat Mines ParisTech, 2008
- [Ham11] N. Hammouda, H. Chadli, G. Guillemot, K. Belmokre, The Corrosion Protection Behaviour of Zinc Rich Epoxy Paint in 3% NaCl Solution, Advances in Chemical Engineering and Science 1, 2011, 51-60
- [Ham12] H. Ben Hamouda, Modélisation et simulation de la structure de solidification dans les superalliages base-nickel : application AM1, Thèse de doctorat ENSMP, 2012

- [Har22] C. A. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. W. Voorhees, The thermodynamics of non-equilibrium interfaces during phase transformations in concentrated multicomponent alloys, *Acta Materialia* 241, 2022, 118407
- [Har23] V.S. Hariharan, B. Nithin, L. Ruban Raj, S.K. Makineni, B.S. Murty, G. Phanikumar, Modeling Microsegregation during Metal Additive Manufacturing: Impact of Dendrite Tip Kinetics and Finite Solute Diffusion. *Crystals* 2023, 13, 842
- [Har24] V.S. Hariharan, B.S. Murty, G. Phanikumar, Interface Response Functions for multicomponent alloy solidification—An application to additive manufacturing, *Computational Materials Science* 231, 2024, 112565
- [Haz22] E. Hazemann, Etude d'apparition de grains recristallisés dans les superalliages base nickel monocristallins pour application aux aubes de turbine, Doctorat Mines Paris – PSL, Sophia Antipolis, le 19 Décembre 2022
- [He23] X. He, J. Liu, C. Yang, G. Jiang, Predicting thermodynamic stability of magnesium alloys in machine learning, *Computational Materials Science* 223, 2023, 112111
- [Her92] J. Hertz, Josiah Willard Gibbs and teaching thermodynamics of materials (history). *JPE* 13, 1992, 450–458
- [Hil68] M. Hillert, Phase transformation, ASM, Cleveland, OH 1968, 181
- [Hol16] M. Holzer, K. Hofmann, V. Mann, F. Hugger, S. Rotha, M. Schmidt, Change of Hot Cracking Susceptibility in Welding of High Strength Aluminum Alloy AA 7075, *Physics Procedia* 83, 2016, 463-471
- [Hop22] A. Hope, K. Wu, J. Julin, J. Jeppsson, P. Mason, Predicting Material Behavior with Improved Solidification Models for the AM Process Window, Additive Manufacturing Benchmarks 2022 (AM-Bench-2022), Bethesda, Maryland | August 15 – 18, 2022
- [Hor18] M. F. Horstemeyer, Integrated Computational Materials Engineering (ICME) for Metals: Concepts and Case Studies, Ed. Wiley, 2018
- [Hou15] S. Hou, Laser Additive Manufacturing of Embedded 3D Circuit System and Microstructure Manipulation Using Gaussian and Holographic Optical Elements Reconstructed Beams, Doctoral thesis, Loughborough University, 2015
- [Hou22] T. Houdard, Etude thermo-mécanique de la solidification de produits réfractaires électrofondus à base d'alumine, de zircone et de silice, Doctorat Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis, soutenue le 13 Juillet 2022
- [Hu07] J. Hu, H.L. Tsai, Heat and mass transfer in gas metal arc welding. Part I: The arc, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50, 2007, 833-846
- [Hu22] J. Hu, S. Stefanov, Y. Song, *et al.*, MaterialsAtlas.org: a materials informatics web app platform for materials discovery and survey of state-of-the-art. *npj Computational Materials* 8, 65 (2022)

- [Hub16] G. Hübschen, 7 - Ultrasonic techniques for materials characterization, Editor(s): Gerhard Hübschen, Iris Altpeter, Ralf Tschuncky, Hans-Georg Herrmann, Materials Characterization Using Nondestructive Evaluation (NDE) Methods, Woodhead Publishing, 2016, 177-224
- [Hun00] O. Hunziker, Theory of plane front and dendritic growth in multicomponent alloys, *Acta Materialia* 49 (20), 2001, 4191-4203
- [Iam23] GDR IAMAT, Intelligence Artificielle en Sciences des Matériaux, <https://iamat.cnrs.fr/>
- [Ian22] M. Iannuzzi, G. S. Frankel, The carbon footprint of steel corrosion, *npj Materials Degradation* 6, 101, 2022
- [Ibf21] IBF – Institute of Metal Forming, Rwth Aachen University, ICME topic : <https://www.ibf.rwth-aachen.de/cms/IBF/Forschung/Querschnittsthemen/~plye/Integrierte-Simulation/?lidx=1>
- [IF16] 3Dnatives, L’Institut Fraunhofer dévoile une imprimante 3D métal low-cost, www.3dnatives.com/imprimante-3d-metal-low-cost-02112016, consulté le 18/12/2016
- [Inf23] Actualités CNRS, Juillet 2023, Les supercalculateurs, creusets des alliages de demain, www.inc.cnrs.fr/fr/cnrsinfo/les-supercalculateurs-creusets-des-alliages-de-demain, consulté le 20/07/2023
- [Inn23] Innovative Materials, Material innovation & Innovative use of materials, <https://www.innovativematerials.nl>
- [Ins23] Institut de Soudure, Friction Stir Welding / FSW : quelles utilisations pour quelles applications ? <https://www.isgroupe.com/fr/blog/fsw-friction-stir-welding-utilisations-et-application>
- [Ios03] A. Iost, D. Najjar, R. Hellouin, Modelling of the Vickers hardness of paint coatings deposited on metallic substrates, *Surface and Coatings Technology* 165, 2003, 126-132
- [Ios12] A. Iost, G. Guillemot, Y. Rudermann, M. Bigerelle, A comparison of models for predicting the true hardness of thin films, *Thin Solid Films* 524, 2012, 229-237
- [Iva47] G.P. Ivantsov, Temperature field around a spherical, cylindrical, and needle-shaped crystal, growing in a pre-cooled melt, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 58 (4), 1947, 567-569
- [Iza23] International Zinc Association, www.zinc.org/coatings-2, consulté le 01/12/2023
- [Jac66] K.A. Jackson, J.D. Hunt, Lamellar and rod eutectic growth, *Transactions of the Metallurgical Society AIME* 236, 1966, 1129-1142
- [Jac21] D. Jacquin, G. Guillemot, A review of microstructural changes occurring during FSW in aluminium alloys and their modelling, *Journal of Materials Processing Technology* 288, 2021, 116706
- [Jan22] G. Janardhan, G. Mukhopadhyay, K. Dutta, Failure behaviour of Spot-welds on automotive steel sheets, *Materials Today: Proceedings* 62, Part 10, 2022, 6120-6124

- [Jao98] O. Jaouen. Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse Thermo-Mécanique du refroidissement des pièces coulées. Doctorat, Mines ParisTech, 1998
- [Jar09] A. Jarrah, Développement de méthodes statistiques et probabilistes en corrosion par piqures pour l'estimation de la profondeur maximale: Application à l'aluminium A5, Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Ecole doctorale Sciences des Métiers de l'Ingénieur, soutenue le 8 décembre 2009
- [Jar10] A. Jarrah, J.-M. Nianga, A. Iost, G. Guillemot, D. Najjar, On the detection of corrosion pits interactions using two-dimensional spectral analysis, *Corrosion Science* 52 (2), 2010, 303-313
- [Jar11] A. Jarrah, M. Bigerelle, G. Guillemot, D. Najjar, A. Iost, J.-M. Nianga, A generic statistical methodology to predict the maximum pit depth of a localized corrosion process, *Corrosion Science* 53 (8), 2011, 2453-2467
- [Jen55] A. F. Jenkinson. The frequency distribution of the annual maxima (or minimum) values of meteorological elements. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 81, 1955
- [JMa23] JMatPro, Practical Software for Materials Properties, Sente Software Ltd., <https://www.sentesoftware.co.uk/jmatpro>
- [Jön84] B. Jönsson, S. Hogmark, Hardness Measurements of Thin Films, *Thin Solid Films* 114, 1984, 257-269
- [Jon94] P.G. Jonsson, J. Szekely, R.T.C. Choo, T.P. Quinn, Mathematical models of transport phenomena associated with arc-welding processes: a survey, *Modelling and Simulation in Materials Science Engineering* 2, 1994, 995-1016
- [Jon98] L.A. Jones, T.W. Eagar, J.H. Lang, A dynamic model of drops detaching from a gas metal arc welding electrode, *Journal of Physics D: Applied Physics* 31, 1998, 107-123
- [Jos18] R. Jose, S. Ramakrishna, Materials 4.0: Materials big data enabled materials discovery, *Applied Materials Today* 10, 2018, 127-132
- [Kam11] A. Kamoun, M. M. Chaabouni, H. F. Ayedi, Plans d'expériences et traitements de surface- Étude quantitative des effets et interactions, *Dossier des Techniques de l'Ingénieur*, M1428 v2, 2011
- [Kan12] S. Kang, Y.S. Jung, B.-G. Yoo, J. Jang, Y.-K. Lee, Orientation-dependent indentation modulus and yielding in a high Mn twinning-induced plasticity steel, *Materials Science and Engineering: A* 532, 2012, 500-504
- [Kar00] Z.A. Karian, E.J. Dudewicz, Fitting Statistical Distributions, The Generalized Lambda Distribution and Generalized Bootstrap Methods, Chapman and Hall, CRC Press, Boca Raton, Florida, 2000
- [Kar10] Z.A. Karian, E.J. Dudewicz, Handbook of Fitting Statistical Distributions with R, Chapman and Hall, CRC Press, Boca Raton, Florida, 2010

- [Kat16] U. R. Kattner. The Calphad method and its role in material and process development, *Tecnol Metal Mater Min.* 13(1) 2016, 3-15
- [Kat97] U. R. Kattner, The thermodynamic modeling of Multicomponent Phase Equilibria, *JOM* 49, 1997, 14-19
- [Kat20] U. R. Kattner, The need for reliable data in computational thermodynamics, *High Temp High Press* 49 (1-2), 2020, 31-47
- [Kau70] L. Kaufman, H. Bernstein, Computer calculation of phase diagrams with special reference to refractory metals, New York, Academic Press, 1970
- [Kay20] Y. Kaynak, E. Tascioglu, Post-processing effects on the surface characteristics of Inconel 718 alloy fabricated by selective laser melting additive manufacturing. *Progress in Additive Manufacturing*, 5, 2020, 221-234
- [Ke07] L. Ke, Q. Du, Z. Su, The correlation between the wavelet base properties and image compression, *Proceedings – CIS Workshops 2007, 2007 International Conference on Computational Intelligence and Security Workshops*, N° 4425526, 2007, 429-432
- [Ker00] A. Kermanpur, M. Rappaz, N. Varahram, P. Davami, Thermal and grain-structure simulation in a land-based turbine blade directionally solidified with the liquid metal cooling process, *Metall. Mater. Trans. B* 31, 2000, 1293–1304
- [Kha14] Z. Khawaja, Analyse des états de surfaces en science des matériaux : Caractérisation multi-échelles par ondelette et détermination de l'anisotropie des surfaces, Doctorat de l'Université de Technologie de Compiègne, Ecole Doctorale Sciences pour l'Ingénieur, soutenue le 21 janvier 2014
- [Kim03] C.H. Kim, W. Zhang, T. DebRoy. Modelling of temperature field and solidified surface profile during gas / metal arc fillet welding. *Journal of Applied Physics*, 94, 2003, 2667–2679
- [Kim16] J. Kim, J. S. Kyeong, M.-H. Ham, A. M. Minor, D. H. Kim, E. S. Park, Development of Mo-Ni-Si-B metallic glass with high thermal stability and H versus E ratios, *Materials & Design* 98, 2016, 31–40
- [Kir63] J. S. Kirkaldy, L. C. Brown, Diffusion Behaviour in Ternary, Multiphase Systems, *Canadian Metallurgical Quarterly*, 2:1, 1963, 89-115
- [Koe18] J.A. Koepf, M. Rasch, A.J. Meyer, M. Markl, M. Schmidt, C. Körner, 3D grain growth simulation and experimental verification in laser beam melting of IN718, *Procedia CIRP* 74, 2018, 82-86
- [Koe19] J.A. Koepf, D. Soldner, M. Ramsperger, J. Mergheim, M. Markl, C. Körner, Numerical microstructure prediction by a coupled finite element cellular automaton model for selective electron beam melting, *Computational Materials Science* 162, 2019, 148-155
- [Kor98] A.M. Korsunsky, M.R. McGurk, S.J. Bull, T.F. Page, On the hardness of coated systems, *Surface and Coatings Technology* 99, 1998, 171-183

- [Kos16] T. Koshikawa, M. Bellet, C.A. Gandin, H. Yamamura, M. Bobadilla, Study of Hot Tearing During Steel Solidification Through Ingot Punching Test and Its Numerical Simulation, *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, 47 (8), 2016, 4053-4067
- [Kou02] S. Kou, *Welding Metallurgy*, Wiley-Interscience, 2002
- [Kow94] M. Kowaka, *Introduction to Life Prediction of Industrial Plant Materials: Application of the Extreme Value Statistical Method for Corrosion Analysis*. Allerton Press, INC, 1994
- [Kum94] S. Kumar, S.C. Bhaduri, Three-Dimensional Finite Element Modeling of Gas Metal Arc Welding, *Metallurgical and Materials Transactions B*, 25 B, 1994, 435-441
- [Kum04] A. Kumar, T. DebRoy, Guaranteed fillet weld geometry from heat transfer model and multivariable optimization, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47, 2004, 5793-5806
- [Kur86a] W. Kurz, B. Giovanola, R. Trivedi, Theory of microstructural development during rapid solidification, *Acta Metall* 34, 1986, 823–830
- [Kur86b] W. Kurz, D. J. Fisher, *Fundamentals of Solidification*, 4th Revised Edition, Trans Tech Publications Ltd, Suisse, 1998
- [Kur19] W. Kurz, D. J. Fisher, R. Trivedi, Progress in modelling solidification microstructures in metals and alloys: dendrites and cells from 1700 to 2000, *International Materials Reviews* 64 (6), 2019, 311-354
- [Kur21] W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi, Progress in modelling solidification microstructures in metals and alloys. Part II: dendrites from 2001 to 2018, *International Materials Reviews*, 66 (1), 2021, 30-76
- [Kvi17] Å. Kvik, X-Ray Diffraction, *Materials Science Applications, Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry (Third Edition)*, Editor(s): John C. Lindon, George E. Tranter, David W. Koppenaal, Academic Press, 2017, 648-655
- [Laa08] J. J. van Laar, *Z. Phys. Chem.* 63, 1908, 216 – 64, 1908, 257
- [Laf22] P. Lafaye, K. Oishi, M. Bourdon, J.-P. Harvey, Crystal chemistry and thermodynamic modelling of the $\text{Al}_{13}(\text{Fe,TM})_4$ solid solutions (TM = Co, Cr, Ni, Pt), *Journal of Alloys and Compounds* 920, 2022, 165779
- [Lam03] J. Lamesch, *L'Histoire Mondiale de la Galvanisation*, Ed. Arcelor, 2003
- [Lam04] J. Lamesch, *L'Histoire Mondiale de la Galvanisation*, Journée des Ingénieurs Saar-Lor-Lux, *Revue Technique Luxembourgeoise* 3, 2004, 121-126
- [Lam22] M. Lambrecht, M. T. de Miguel, M. I. Lasanta, G. García-Martín, F. J. Pérez, Computational modelling of the local structure and thermophysical properties of ternary $\text{MgCl}_2\text{-NaCl-KCl}$ salt for thermal energy storage applications, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 196, 2022, 123273
- [Lan78] J.S Langer, H. Müller-Krumbhaar, Theory of dendritic growth—I. Elements of a stability analysis, *Acta Metallurgica* 26 (11), 1978, 1681-1687

- [Lan86] J.F. Lancaster, The Physics of Welding, 2nd edition, ed. Pergamon Press, Oxford, 1986
- [Lan03] D. Landolt, Corrosion et chimie de surfaces des métaux, Traité des Matériaux Tome 12, Presses polytechniques et universitaires romandes (PPUR), 3^{ème} édition, 2003
- [Lay93] N.J. Laycock, P.J. Laycock, P. Scarf, D.P. Krouse, Applications of statistical analysis techniques in corrosion experimentation, testing, inspection and monitoring, in: R.A. Cottis, M.J. Graham, R. Lindsay, S.B. Lyon, J.A. Richardson, J.D. Scantlebury, F.H. Stott (Eds.), Shreir's Corrosion, fourth ed., Elsevier, 1547-1580, 2009
- [Lay03] N.J. Laycock, S. Hodges, D. Krouse, D. Keen, P. Laycock, Pitting of carbon steel heat exchanger tubes in industrial cooling water systems, Journal of Corrosion Science and Engineering, 6, 2003, 24
- [Lec15] R. Lecardonnel, Modélisation de la diffusion dans les alliages métalliques multicomposés, Rapport de stage de deuxième année de l'Enseirb-Matmeca, 2015
- [Leg15a] V. Legrand, Modélisation des processus de précipitation et prédiction des propriétés mécaniques résultantes dans les alliages d'aluminium à durcissement structural : Application au soudage par Friction Malaxage (FSW) de tôles AA2024, Thèse de Doctorat ENSMP, 2015
- [Leg15b] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, J.-J. Rousse, J. Vaudour, Modeling of Microstructural Evolution during Friction Stir Welding, 2015 TMS Annual Meeting & Exhibition, Symposium Friction Stir Welding and Processing, 15-19 Mars 2015, Orlando, FL, USA
- [Leg16] V. Legrand, S. Gastebois, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, L. Fourment, Microstructural evolution during friction stir welding on AA2024 aluminium alloys - Application to the prediction of the mechanical properties (*Keynote*), 11th International Seminar 'Numerical Analysis of Weldability' (Graz – Seggau, Austria), 27-30 Septembre 2015, Mathematical Modelling of Weld Phenomena 11, Eds. C. Sommitsch, N. Enzinger and P. Mayr, Verlag der Technischen Universität Graz, 2016, 497-513
- [LeG16] G. Le Goïc, M. Bigerelle, S. Samper, H. Favrelière, M. Pillet, Multiscale roughness analysis of engineering surfaces: A comparison of methods for the investigation of functional correlations, Mechanical Systems and Signal Processing 66–67, 2016, 437-457
- [LeM16] V. Le Maout, Modélisation des processus de solidification par méthodes de suivi de front Application aux alliages métalliques industriels, Rapport stage de deuxième année de l'Enseirb-Matmeca, 2016
- [Lem23] https://www.lemonde.fr/energies/article/2023/03/16/le-nouveau-plan-d-edf-pour-controler-les-soudures-a-risque-de-fissures-dans-ses-centrales-nucleaires_6165799_1653054.html
- [Lhu17] P.E. Lhuillier, B. Chassignole, M. Oudaa, S.O. Kerhervé, F. Rupin, T. Fouquet, Investigation of the ultrasonic attenuation in anisotropic weld materials with finite element modeling and grain-scale material description, Ultrasonics 78, 2017, 40–50

- [Lhu22] P.E. Lhuillier, A. Schumm, Y. Gelebart, J. Dalphin, G. Guillemot, C-A Gandin, C. Xue, Modeling method for the simulation of austenitic weld ultrasonic inspection - realistic prediction of echoes and structural noise in weld inspection, 5th LUS4Metals Conference, 5–6 Mai 2022, Gif-sur-Yvette, France
- [Li12a] Z. Li, P. Munroe, Z. Jiang, X. Zhao, J. Xu, Z. Zhou, J. Jiang, F. Fang, Z. Xie, Designing superhard, self-toughening CrAlN coatings through grain boundary engineering, *Acta Materialia* 60 (16), 2012, 5735–5744
- [Li12b] R. Li, J. Liu, Y. Shi, L. Wang, W. Jiang, Balling behavior of stainless steel and nickel powder during selective laser melting process, *Int J Adv Manuf Technol* 59, 2012, 1025–1035
- [Li17] S. Li, H. Xiao, K., Liu, W. Xiao, Y. Li, X. Han, J. Mazumder, L. Song, Melt-pool motion, temperature variation and dendritic morphology of Inconel 718 during pulsed- and continuous-wave laser additive manufacturing: a comparative study, *Mater. Des.* 119, 2017, 351–360
- [Li19] N. Li, S. Huang, G. Zhang, R. Qin, W. Liu, H. Xiong, G. Shi, J. Blackburn, Progress in additive manufacturing on new materials: A review, *Journal of Materials Science & Technology* 35 (2), 2019, 242-269
- [Lin01] Q. Lin, X. Li, S.W. Simpson. Metal transfer measurements in gas metal arc welding, *Journal of Physics D : Applied Physics*, 34, 2001, 347–357
- [Lip84] J. Lipton, M.E. Glicksman, W. Kurz, Dendritic growth into undercooled alloy metals, *Materials Science and Engineering* 65 (1), 1984, 57-63
- [Lip87] J. Lipton, W. Kurz, R. Trivedi, Rapid dendrite growth in undercooled alloys, *Acta Metallurgica* 35 (4), 1987, 957-964
- [Liu03] W. Liu, J.N. DuPont, Fabrication of functionally graded TiC/Ti composites by Laser Engineered Net Shaping, *Scripta Materialia* 48, 2003, 1337–1342
- [Liu17] Y. Liu, T. Zhao, W. Ju, S. Shi, Materials discovery and design using machine learning, *Journal of Materiomics*, 3 (3) 2017, 159-177
- [Liu21] B. Liu, J. Zhao, L. Liu, Applicability of Beer's law in particulate system from random to regular arrangement: A numerical evaluation, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 276, 2021, 107938
- [Lu17] W. Lu, R. Xiao, J. Yang, H. Li, W. Zhang, Data mining-aided materials discovery and optimization, *Journal of Materiomics* 3 (3), 2017, 191-201
- [Luk07] H. Lukas, S. Fries, B. Sundman, Computational Thermodynamics: The Calphad Method, Cambridge University Press, 2007, ISBN : 9780511804137
- [Luo12] S. Luo, M. Zhu, S. Louhenkilpi, Numerical Simulation of Solidification Structure of High Carbon Steel in Continuous Casting Using Cellular Automaton Method, *ISIJ International* 52 (5), 2012, 823–830
- [MAC17] Projet ANR PRCE Maccadam, <https://anr.fr/Projet-ANR-17-CE08-0052>

- [Mac20] Machine-Outil, Soudage : Le FSW arrive à maturité industrielle, <https://www.machine-outil.com/actualites/t582/a9133-soudage-friction-malaxage-fsw.html>
- [MaC23] MatCalc Engineering, Metallurgical Processing Solutions, www.matcalc-engineering.com/
- [Mag20] V. Maguin, Simulation multi-physique de la macroségrégation et de la formation des freckles lors de la solidification d'aubes de turbines monocristallines, Thèse de doctorat en Mécanique numérique et Matériaux, Mines Paris – PSL, soutenue le 16-12-2020
- [Mah19] A. Mahata, M. A. Zaeem, Effects of solidification defects on nanoscale mechanical properties of rapid directionally solidified Al-Cu Alloy: A large scale molecular dynamics study, *Journal of Crystal Growth* 527, 2019, 125255
- [Mal00] S. Mallat, Une exploration des signaux en ondelettes, Les éditions de l'Ecole Polytechnique, 2000
- [Mao12] Z. Mao, C. Booth-Morrison, C. K. Sudbrack, G. Martin, D. N. Seidman, Kinetic pathways for phase separation: An atomic-scale study in Ni–Al–Cr alloys, *Acta Materialia*, 60 (4), 2012, 1871-1888
- [Mar13] E. A. Marquis, M. Bachhav, Y. Chen, Y. Dong, L. M. Gordon, A. McFarland, On the current role of atom probe tomography in materials characterization and materials science, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 17 (5), 2013, 217-223
- [Mar21a] K. Marchais, Analyse numérique de l'étalabilité d'une poudre métallique : Application au procédé de fabrication additive Laser Beam Melting, Doctorat HESAM, 2021
- [Mar21b] K. Marchais, J. Girardot, C. Metton *et al.*, A 3D DEM simulation to study the influence of material and process parameters on spreading of metallic powder in additive manufacturing, *Computational Particle Mechanics* 8, 2021, 943–953
- [Mar23] P. Martin, G. Guillemot, M. Bellet, F. Pichot, N. Leriche, Y. Mayi, Ch.-A. Gandin, Solidification path for rapid solidification – Application to multicomponent alloys for L-PBF, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 1281, 16th International Conference on the Modelling of Casting, Welding, and Advanced Solidification Processes, 2023, Banff, Canada, 18-23 Juin 2023
- [Mar24] P. Martin, G. Guillemot, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Kinetic effects during the plane-front and dendritic solidification of multicomponent alloys, *Acta Materialia* 263, 2024, 119473
- [Mat16] M. J. Matthews, G. Guss, S. A. Khairallah, A. M. Rubenchik, P. J. Depond, W. E. King, Denudation of metal powder layers in laser powder bed fusion processes, *Acta Materialia* 114, 2016, 33 – 42
- [Mat23] D. M. Matson, L. Battezzati, P. K. Galenko, Ch.-A. Gandin, A. K. Gangopadhyay, H. Henein, K. F. Kelton, M. Kolbe, J. Valloton, S. C. Vogel, T. Volkmann, Electromagnetic levitation containerless processing of metallic materials in microgravity: rapid solidification, *npj Microgravity*, 9 - 65, 2023, 2373-8065

- [Mat23b] mathworks, wavedec - Multilevel 1-D discrete wavelet transform, R2023b version, <https://www.mathworks.com/help/wavelet/ref/wavedec.html>
- [Mat24] MatWeb, Your Source for Materials Information, <https://www.matweb.com>, consulté le 29/01/2024
- [Mau11] F. Maurizio, C. Lorenzo, Composite continuous wavelet transform of potential fields with different choices of analyzing wavelets, *Journal of Geophysical Research – Solid Earth* 116, 2011, B07104
- [Mau12] V. Maurice, P. Marcus, Passive films at the nanoscale, *Electrochimica Acta* 84, 2012, 129-138
- [May21a] Y. Mayi, Compréhension et simulation des phénomènes physiques affectant la fabrication additive en SLM, Doctorat HESAM, soutenue le 5 Octobre 2021
- [May21b] Y.A. Mayi, A. Queva, M. Dal, G. Guillemot, C. Metton, C. Moriconi, P. Peyre, M. Bellet, Multiphysics simulation of single pulse laser powder bed fusion: comparison of front capturing and front tracking methods, *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* 32 (6), 2021, 2149-2176
- [May23] Y. A. Mayi, M. Dal, P. Peyre, M. Bellet, R. Fabbro, Physical mechanisms of conduction-to-keyhole transition in laser welding and additive manufacturing processes, *Optics & Laser Technology* 158, Part A, 2023, 108811
- [Mel08] R.E. Melchers, Extreme value statistics and long-term marine pitting corrosion of steel, *Probabilistic Engineering Mechanics* 23, 2008, 482-488
- [Met16] Metallurgy Europe, <https://www.europarl.europa.eu/cmsdata/148819/Booklet.pdf>
- [Mez18] S. Mezghani, Identification of relevant wavelet functions for multiscale characterization of manufactured surfaces using a genetically optimized neural network, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 96, 2018, 1891-1903
- [MGI21] The Materials Genome Initiative, The 2021 MGI Strategic Plan, www.mgi.gov, consulté le 29/01/2024
- [Mic23] MICRESS® – The Microstructure Evolution Simulation Software <https://micress.rwth-aachen.de/index.html>
- [Mik17] P. Mikolajczak, A. Genau, J. Janiszewski, L. Ratke, Thermo-Calc Prediction of Mushy Zone in AlSiFeMn Alloys, *Metals* 7(11), 2017, 506
- [Moh23] M. Mohr, Y. Dong, G. P. Bracker, R. W. Hyers, D. M. Matson, R. Zboray, R. Frison, A. Dommann, A. Neels, X. Xiao, J. Brillo, R. Busch, R. Novakovic, P. Srirangam, H.-J. Fecht, Electromagnetic levitation containerless processing of metallic materials in microgravity: thermophysical properties, *npj Microgravity* 9 - 34, 2023, 2373-8065
- [Mon18] L. Moniz, C. Colin, J.-D. Bartout, K. Terki and M.-H. Berger, Laser Beam Melting of Alumina: Effect of Absorber Additions, *JOM*, 70 (3), 2018, 328-335

- [Mon19] L. Moniz, Q. Chen, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, C. Colin, J.-D. Bartout, M.-H. Berger, Additive manufacturing of an oxide ceramic by laser beam melting - Comparison between finite element simulation and experimental results, *Journal of Materials Processing Technology* 270, 2019, 106–117
- [Mon20] L. Moniz da Silva Sancho. Etude de l'interaction laser-matière pour la fabrication de pièces à haute valeur ajoutée en céramiques oxydes semi-transparentes par fusion laser sélective sur lit de poudre. *Matériaux composites et construction*. Université Paris Sciences et Lettres, Doctorat soutenu le 15 Décembre 2020
- [Moy03] J. Moysan, A. Apfel, G. Corneloup, B. Chassignole, Modelling the grain orientation of austenitic stainless steel multipass welds to improve ultrasonic assessment of structural integrity, *The International Journal of Pressure Vessels and Piping* 80(2), 2003, 77-85
- [MTD03] MTDATA, Phase Transformations & Complex Properties Research Group, University of Cambridge, <http://www.phase-trans.msm.cam.ac.uk/mtdata/introduction.html>
- [Mul63] W. W. Mullins, R. F. Sekerka, Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow, *Journal of Applied Physics* 34 (2), 1963, 323–329
- [Mul64] W. W. Mullins, R. F. Sekerka, Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy, *Journal of Applied Physics* 35 (2), 1964, 444–451
- [Mur84] J.L. Murray, Calculations of stable and metastable equilibrium diagrams of the Ag-Cu and Cd-Zn systems, *Metall. Trans. A* 15 (2), 1984, 261–268
- [Myr00] O. R. Myhr, Ø. Grong, Modelling of non-isothermal transformations in alloys containing a particle distribution. *Acta Materialia* 48, 2000, 1605–1615
- [Nac02] NACE International (National Association of Corrosion Engineers, Houston, Texas, US), Corrosion Costs and Preventive Strategies in the United States, Rapport 2002
- [Nad21] N. Nadammal, T. Mishurova, T. Fritsch, I. Serrano-Munoz, A. Kromm, C. Haberland, P.D. Portella, G. Bruno, Critical role of scan strategies on the development of microstructure, texture, and residual stresses during laser powder bed fusion additive manufacturing, *Additive Manufacturing* 38, 2021, 101792
- [Naj03a] D. Najjar, M. Bigerelle, C. Lefebvre, A. Iost, A new approach to predict the pit depth extreme value of a localized corrosion process, *ISIJ Int.* 43, 2003, 720-725
- [Naj03b] D. Najjar, M. Bigerelle, A. Iost, The computer-based bootstrap method as a tool to select a relevant surface roughness parameter, *Wear*, 254 (5-6) 2003, 450-460
- [Naj06] D. Najjar, M. Bigerelle, H. Migaud, A. Iost, About the relevance of roughness parameters used for characterizing worn femoral heads, *Tribology International* 39, 2006, 1527-1537
- [Nar22] S. R. Narasimharaju, W. Zeng, T. L. See, Z. Zhu, P. Scott, X. Jiang, S. Lou, A comprehensive review on laser powder bed fusion of steels: Processing, microstructure, defects and control methods, mechanical properties, current challenges and future trends, *Journal of Manufacturing Processes* 75, 2022, 375-414

- [Nas19] T. Naseri, D. Larouche, R. Martinez, F. Breton, D. Massinon, Analytical Modeling of the Mixed-Mode Growth and Dissolution of Precipitates in a Finite System. *Metals* 9 (8), 2019, 889
- [Nas20] T. Naseri, Mixed-mode model for studying microstructural evolution of precipitates inside Aluminum alloys, Doctorat en génie des matériaux et de la métallurgie, Université Laval, 2020
- [Nat13] National Geographic, The early 19th-century ship is the deepest wreck under investigation in U.S. waters, Watch Archaeologists Explore a Gulf of Mexico Shipwreck, <https://www.nationalgeographic.com/adventure/article/130719-shipwreck-gulf-mexico-archaeology-ocean-science>, consulté le 27/01/2024
- [Nem18] Projet NEMESIS, Agence Nationale de la Recherche, www.agence-nationale-recherche.fr/Projet-ANR-17-CE08-0036, consulté le 5/10/2023
- [Nez17] M. Ghasemi Nezhadhighi, S. M. S. Movahed, T. Yasserli and S. Mehdi Vaez Allaei, Characterization of the anisotropy of rough surfaces: Crossing statistics, *Journal of Applied Physics* 122, 2017, 085302
- [Ng08] K.S. Ng, A.H.W. Ngan, Stochastic nature of plasticity of aluminum micro-pillars, *Acta Materialia* 56, 2008, 1712-1720
- [Nie13] A. Niel, C. Bordreuil, F. Deschaux-Beaume, G. Fras, Modeling hot cracking in 6061 Aluminum alloy weld with a microstructural based criterion, *Science and Technology of Welding and Joining* 18, 2013, 154
- [Nis12] Quantitative Techniques (section 1.3.5), NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods), <https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/eda35.htm>
- [Nis23a] Additive manufacturing benchmark test series (am-bench), NIST (National Institute of Standards and Technology), www.nist.gov/ambench
- [Nis23b] CALPHAD Assessments, NIST (National Institute of Standards and Technology), <https://materialsdata.nist.gov/handle/11256/8>
- [Nom15] The Novel Materials Discovery Laboratory (NoMaD), H2020 project, Grant agreement ID: 676580, <https://cordis.europa.eu/project/id/676580>, consulté le 29/01/2024
- [Ntn18] Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Department of Manufacturing and Civil Engineering, Additive Manufacturing Laboratory, <https://www.ntnu.edu/ivb/additive-manufacturing-laboratory>, consulté le 10/01/2018
- [Oli92] W.C. Oliver, G.M. Pharr, An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments, *Journal of Materials Research* 7 (6), 1992, 1564-1583
- [Ols03] C.-O.A Olsson, D Landolt, Passive films on stainless steels—chemistry, structure and growth, *Electrochimica Acta* 48 (9), 2003, 1093-1104

- [Oli04] W. C. Oliver, G. M. Pharr, Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology, *Journal of Materials Research* 19 (1), 2004, 3-20
- [Ope23] OpenCalphad, Open Software for modeling and equilibrium calculations, www.opencalphad.com, *sources accessibles sur* <https://github.com/sundmanbo/opencalphad>
- [OPM24] Oxford Performance Medical, Biomedical 3DP, Patching the Skull, <https://www.oxfordpm.com/biomedical-3dp>, consulté le 19/01/2024
- [Pab19] J. J. de Pablo, N. E. Jackson, M. A. Webb, *et al.*, New frontiers for the materials genome initiative, *npj Computational Materials* Article 5, 41 (2019)
- [Pal03] S PalDey, S.C Deevi, Single layer and multilayer wear resistant coatings of (Ti,Al)N: a review, *Materials Science and Engineering: A* 342 (1–2), 2003, 58-79
- [Pal22] P. Pal, A.B. Phillion, Predicting solid–liquid interfacial characteristics during rapid solidification, *Computational Materials Science* 213, 2022, 111629
- [Pal23] L. Palmeira Belotti, T.F.W. van Nuland, M.G.D. Geers, J.P.M. Hoefnagels, J.A.W. van Dommelen, On the anisotropy of thick-walled wire arc additively manufactured stainless steel parts, *Materials Science and Engineering: A*, 863, 2023, 144538
- [Pan23a] Pandat Software: CALPHAD-based materials design, CompuTherm company, <https://computherm.com/software>
- [Pan23b] PanEvolution, CompuTherm company, <https://computherm.com/panevolution>
- [Pan23c] PanOptimizer – Optimizing thermodynamic, kinetic and thermo-physical model parameters, <https://computherm.com/panoptimizer>
- [Pap35] A. Papapetrou. Untersuchungen über dendritisches Wachstum von Kristallen, *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials* 92 (1-6), 1935, 89-130
- [Par15] U. Ayachit, The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application, Kitware, 2015, site official : <https://www.paraview.org>
- [Pat09] S. Pathak, D. Stojakovic, S. R. Kalidindi, Measurement of the local mechanical properties in polycrystalline samples using spherical nanoindentation and orientation imaging microscopy, *Acta Materialia* 57 (10), 2009, 3020-3028
- [Pat21] U. M. R. Paturi, S. Cheruku, S. R. Geeredy, Process modeling and parameter optimization of surface coatings using artificial neural networks (ANNs): State-of-the-art review, *Materials Today: Proceedings* 38 (5), 2021, 2764-2774
- [Pau19] N. H. Paulson, E. Jennings, M. Stan, Bayesian strategies for uncertainty quantification of the thermodynamic properties of materials, *International Journal of Engineering Science* 142, 2019, 74-93
- [Per15] M. Perrut, Life Prediction Methodologies for Materials and Structures - Thermodynamic Modeling by the CALPHAD Method and its Applications to Innovative Materials, *Journal Aerospace Lab* (9), 2015, AL09-10

- [Pfe21] S. Pfeiffer, K. Florio, D. Puccio, M. Grasso, B. Maria Colosimo, C. G. Aneziris, K. Wegener, T. Graule, Direct laser additive manufacturing of high performance oxide ceramics: A state-of-the-art review, *Journal of the European Ceramic Society* 41 (13), 2021, 6087-6114
- [Phy24] PhysalurgY, CEMEF, Mines Paris PSL, physalurgy.cemef.mines-paristech.fr
- [Pie07] R. Pierer, C. Bernhard, C. Chimani, A contribution to hot tearing in the continuous casting process, *Rev. Métallurgie–International J. Metall.* 104, 2007, 72–83
- [Pin20] A. Pineau, G. Guillemot, G. Reinhart, G. Regula, N. Mangelinck-Noël, Ch.-A. Gandin, Three-dimensional cellular automaton modeling of silicon crystallization with grains in twin relationships, *Acta Materialia* 191, 2020, 230-244
- [Pot52] R. Potts, 1952. Some generalized order- disorder transformations. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 48 (1), 106–109
- [Pr18] Primante 3D, Impression 3D métal : 10 exemples concrets d'applications, www.primante3d.com/applications-impression3d-metal-05052018
- [Pra14] O. Prat, J. García, D. Rojas, J.P. Sanhueza, C. Camurri, Study of nucleation, growth and coarsening of precipitates in a novel 9%Cr heat resistant steel: Experimental and modeling, *Materials Chemistry and Physics* 143 (2), 2014, 754-764
- [Pre07] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes – the Art of Scientific Computing*, 3th edition, Cambridge University Press, 2007
- [Pri23] Precipitation Simulations Precipitation Module (TC-PRISMA), <https://thermocalc.com/products/add-on-modules/precipitation-module-tc-prisma/>
- [Puc02] E.S. Puchi-Cabrera, A new model for the computation of the composite hardness of coated systems, *Surface and Coatings Technology* 160, 2002, 177-186
- [Puc15] E. S. Puchi-Cabrera, M. H. Staia, A. Iost, A description of the composite elastic modulus of multilayer coated systems, *Thin Solid Films* 583, 2015, 177–193
- [Puc23] E. S. Puchi-Cabrera, E. Rossi, G. Sansonetti, M. Sebastiani, E. Bemporad, Machine learning aided nanoindentation: A review of the current state and future perspectives, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 27 (4), 2023, 101091
- [Pym22] Pymatgen (Python Materials Genomics) - a robust, open-source Python library for materials analysis. <https://pymatgen.org/>
- [Qia12] X. G. Qiao, M. J. Starink, Prediction of hardness of Al alloys processed by accumulative roll bonding, *Materials Science and Engineering: A* 531, 2012, 45–50
- [Qiu15] K. Qiu, R. Wang, C. Peng, X. Lu, N. Wang, Polynomial regression and interpolation of thermodynamic data in Al–Si–Mg–Fe system, *Calphad* 48, 2015, 175-183
- [Que20] A. Queva, G. Guillemot, C. Moriconi, C. Metton, M. Bellet, Numerical study of the impact of vaporisation on melt pool dynamics in Laser Powder Bed Fusion - Application to IN718 and Ti–6Al–4V, *Additive Manufacturing* 35, 2020, 101249

- [Que21] A. Queva, Simulation numérique multiphysique du procédé de fusion laser de lit de poudre : Application aux alliages métalliques d'intérêt aéronautique, Doctorat PSL, Sophia Antipolis, soutenue le 19 Juillet 2021
- [Rah09] K. Rahmoun, A. Iost, V. Keryvin, G. Guillemot, N.E. Chabane Sari, 'A multilayer model for describing hardness variations of aged porous silicon low-dielectric-constant thin films', *Thin Solid Films* 518 (1), 2009, 213-221
- [Ram22] M. Ramoni, R. Shanmugam, N. Thangapandian, M. Vishnuvarthanan, Challenges in Additive Manufacturing for Metals and Alloys. In: Khan, M.A., Jappes, J.T.W. (eds) *Innovations in Additive Manufacturing*. Springer Tracts in Additive Manufacturing. Springer, Cham, 2022
- [Ran09] N. X. Randall, M. Vandamme, F.-J. Ulm, Nanoindentation analysis as a two-dimensional tool for mapping the mechanical properties of complex surfaces, *Journal of Materials Research* 24 (3), 2009, 679-690
- [Rap93] M. Rappaz, Ch-A. Gandin, Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes, *Acta Metallurgica et Materialia* 41, 1993, 345-360
- [Rap96] M. Rappaz, C.A. Gandin, J.L. Desbiolles, Ph. Thévoz, Prediction of grain structures in various solidification processes, *Metallurgical and Materials Transactions A* 27, 1996, 695-705
- [Rap08] B. Raphet, Etats de surface – Caractérisation, Dossier des 'Techniques de l'ingénieur', Réf. R1230 V2, 2008
- [Rav22] L. Ravix, Maîtrise du procédé WAAM - Phénomènes physique et modélisation, Doctorat PSL, Sophia Antipolis, 2022
- [Riv08] D. Rivas, F. Caleyó, A. Valor, J.M. Hallen, Extreme value analysis applied to pitting corrosion experiments in low carbon steel: Comparison of block maxima and peak over threshold approaches, *Corrosion Science* 50, 2008, 3193-3204
- [Rop10] F. Ropital, Corrosion des matériaux dans l'industrie pétrolière, Dossier des 'Techniques de l'ingénieur', Réf. COR750, 2010
- [Ros23] E. Rossi, J. M. Wheeler, M. Sebastiani, High-speed nanoindentation mapping: A review of recent advances and applications, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 27 (5), 2023, 101107
- [Rou13] L. Rougier, A. Jacot, Ch.-A. Gandin, P. Di Napoli, P.-Y. Théry, D. Ponsen, V. Jaquet, Numerical simulation of precipitation in multicomponent Ni-base alloys, *Acta Materialia* 61 (17), 2013, 6396-6405
- [Roy12] S. Roychowdhury, V. Kain, A. Matcheswala, A. Bhandakkar, σ -Phase induced embrittlement in titanium containing austenitic stainless steel tie-bars in a condenser, *Engineering Failure Analysis*, 25, 2012, 123-132

- [Saa15] A. Saad, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Temperature-based energy solver coupled with tabulated thermodynamic properties – Application to the prediction of macrosegregation in multicomponent alloys, *Computational Materials Science*, 99, 2015, 221-231
- [Saa16] A. Saad, Modélisation par level set des macroségrégations induites par le retrait à la solidification, Thèse de Doctorat Mines Paris – PSL, 2016
- [Sac22] S. Sachi, Coupling solidification model with CALPHAD data for the prediction of macrosegregation and solidification structures, Thèse de doctorat en Science des Matériaux, Université de Lorraine, soutenue le 5 Mai 2022
- [Sah02] R. Saha, W. D. Nix, Effects of the substrate on the determination of thin film mechanical properties by nanoindentation, *Acta Materialia* 50 (1), 2002, 23-38
- [San21] S. Sanchez, P. Smith, Z. Xu, G. Gaspard, C. J. Hyde, W. W. Wits, I. A. Ashcroft, H. Chen, A. T. Clare, Powder Bed Fusion of nickel-based superalloys: A review, *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 165, 2021, 103729
- [Sar21] N. Sargent, M. Jones, R. Otis, A.A. Shapiro, J.-P. Delplanque, W. Xiong, Integration of Processing and Microstructure Models for Non-Equilibrium Solidification in Additive Manufacturing. *Metals* 2021, 11, 570
- [Say20] N. Sayyar, M. Shamanian, B. Niroumand, J. Kangazian, J. A. Szpunar, EBSD observations of microstructural features and mechanical assessment of INCOLOY 825 alloy/AISI 321 stainless steel dissimilar welds, *Journal of Manufacturing Processes*, 60, 2020, 86-95
- [Sch16] Microstructure Modelling, Handbook of Software Solutions for ICME, Editor(s) : Georg J. Schmitz, Ulrich Prahl, Eds. Wiley-Vch, (Weinheim, DE) 2016
- [Sel14] B. Selvarajou, J-H. Shin, T. Kwon Ha, I. Choi, S. P. Joshi; H. N. Han, Orientation-dependent indentation response of magnesium single crystals: Modeling and experiments, *Acta Materialia* 81, 2014, 358-376
- [Sen18] O. Senninger, Ch.-A. Gandin, G. Guillemot, Modeling of eutectic growth kinetics with thermodynamic couplings, *Acta Materialia* 161, 2018, 110-126
- [Ser15] K. Serpin, S. Mezghania, M. El Mansori, Multiscale assessment of structured coated abrasive grits in belt finishing process, *Wear* 332–333, 2015, 780-787
- [Set19] A. Settouf, H. Rached, N. Benkhetou, D. Rached, DFT calculations of structural, optoelectronic and thermodynamic properties of BxAl1-xP alloys, *Computational Condensed Matter* 19, 2019, e00377
- [Sha14] L. H. Shah, M. Ishak, Review of Research Progress on Aluminum–Steel Dissimilar Welding, *Materials and Manufacturing Processes*, 29, 2014, 928-933
- [She08] A. Shevchenko, J. Carter, G.R.J. Cooper, R.W. Fearick, Y. Kalmykov, P. Von Neumann-Cosel, V.Y. Ponomarev, A. Richter, I. Usman, J. Wambach, Analysis of fine structure in the nuclear continuum, *Physical Review C*, 77 (2), 2008, 024302

- [Shi91] T. Shibata, Evaluation of corrosion failure by extreme value statistics, *ISI Int.* 31, 115-121, 1991
- [Shi96] T. Shibata. Statistical and stochastic approaches to localized corrosion, *Corrosion* 52 (11), 1996, 813-830
- [Sin23] Sintef, Thermopack, A flexible workbench for thermodynamic properties of fluids, <https://www.sintef.no/en/software/thermopack/>
- [Sis17] B. Sista K. Vemaganti, Estimation of statistical parameters of rough surfaces suitable for developing micro-asperity friction models, *Wear* 316, 1–2, 2014, 6-18
- [Soa06] J. V. B. Soares, J. J. G. Leandro, R. M. Cesar, H. F. Jelinek, M. J. Cree, Retinal vessel segmentation using the 2-D Gabor wavelet and supervised classification, *IEEE transactions on medical imaging* (25) 9, 2006, 1214-1222
- [Sol17] Z. Soltani Asadi, R. E. Melchers, Extreme value statistics for pitting corrosion of old underground cast iron pipes, *Reliability Engineering & System Safety* 162, 2017, 64-71
- [Sol24] Ecole d'été 'Solidification 2024', Théories, Outils et Applications, 16-21 juin 2024, Oléron, <https://solidification2024.sciencesconf.org>
- [Sou21] B. Soundararajan, D. Sofia, D. Barletta, M. Poletto, Review on modeling techniques for powder bed fusion processes based on physical principles, *Additive Manufacturing* 47, 2021, 102336
- [Spe08] P.J. Spencer, a brief history of CALPHAD, *Computer coupling of Phase Diagram and Thermochemistry* 32, 2008, 1-8
- [Ste78] W.M. Steen, M. Eboo, J. Clarke, Arc augmented laser welding, in: *Proc. of the 4th International Conference on Advances in Welding Processes*, Vol. 1, Harrogate, U.K., 1978, 257–265
- [Sun16] B. Sundman, U. R. Kattner, C. Sigli, M. Stratmann, R. Le Tellier, M. Palumbo, S. G. Fries, The OpenCalphad thermodynamic software interface, *Computational Materials Science*, 125, 2016, 188-196
- [Sun21] B. Sundman, N. Dupin, B. Hallstedt, Algorithms useful for calculating multi-component equilibria, phase diagrams and other kinds of diagrams, *Calphad* 75, 2021
- [Tab15] S. Tabibian, E. Charkaluk, A. Constantinescu, G. Guillemot, F. Szmytka, Influence of process-induced microstructure on hardness of two Al-Si alloys, *Materials Science and Engineering A* 646, 2015, 190-200
- [Tan16] F. Tang, B. Hallstedt, Using the PARROT module of Thermo-Calc with the Cr–Ni system as example, *Calphad*, 55, Part 2, 2016, 260-269
- [Tan17a] Y. Tan, A. M. Maniatty, C. Zheng, J. T. Wen, Monte Carlo grain growth modeling with local temperature gradients, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 25 (6), 2017, 065003

- [Tan17b] F. Tancrét, I. Toda-Caraballo, E. Menou, P. E. J. Rivera Díaz-Del-Castillo, Designing high entropy alloys employing thermodynamics and Gaussian process statistical analysis, *Materials & Design* 115, 2017, 486-497
- [Tan20] J. H. K. Tan, S. L. Sing, W. Y. Yeong, Microstructure modelling for metallic additive manufacturing: a review, *Virtual and Physical Prototyping* 15 (1), 2020, 87-105
- [Tec23] <https://www.techniques-ingenieur.fr/actualite/articles/soudage-et-cobotique-lalliance-entre-le-savoir-faire-du-soudeur-et-la-souplesse-des-robots-collaboratifs-121803/>
- [Ten98] T.L. Teng, C.C. Lin, Effect of welding conditions on residual stresses due to butt welds, *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 75 (12), 1998, 857-864
- [The23a] Thermo-Calc Software, Computational Thermodynamics and CALPHAD-based calculations – Software Development, Solna, Stockholm, <https://thermocalc.com/>
- [The23b] Thermo-Calc Software, Steel and Fe-Alloys Databases – TCFE13 Quick Overview, <https://thermocalc.com/products/databases/steel-and-fe-alloys/>
- [The23c] Thermo-Calc Software, Nickel-based Superalloys Databases – TCNI12 Quick Overview, <https://thermocalc.com/products/databases/nickel-based-alloys/>
- [The23d] Thermo-Calc Software, Aluminium-based Alloys Databases - TCAL8 Quick Overview, <https://thermocalc.com/products/databases/aluminum-based-alloys/>
- [The23e] Thermo-Calc Software, Thermodynamic, Kinetic, and Properties Databases, Overview 2023b, https://thermocalc.com/wp-content/uploads/Brochures_and_Flyers/Current/marketing-database-overview.pdf
- [The23f] Thermo-Calc Software, Data Optimization Module (PARROT), <https://thermocalc.com/about-us/methodology/the-calphad-methodology/data-optimization-module-parrot/>
- [The23g] Thermo-Calc Software, SDKs – Easily link Thermo-Calc to other software programs or your own software code, <https://thermocalc.com/products/software-development-kits/>
- [The23h] Thermo-Calc Software, Our History, <https://thermocalc.com/about-us/our-history>
- [The23i] Thermo-Calc Software, High Entropy Alloys Databases – TCHEA6 Quick Overview, <https://thermocalc.com/products/databases/high-entropy-alloys/>
- [The23j] Thermo-Calc Software, Capturing the Effects of Rapid Solidification, <https://thermocalc.com/solutions/solutions-by-application/additive-manufacturing/>
- [Til53] W. A. Tiller, K. A. Jackson, J. W. Rutter, B. Chalmers, The redistribution of solute atoms during the solidification of metals, *Acta Metallurgica* 1 (4), 1953, 428-437
- [Tli10a] B. Tlili, C. Nouveau, G. Guillemot, Elaboration, characterization of CrN-based coatings, AIP Conference Proceedings, International Conference on Advances in Materials and Processing Technologies, AMPT 2010, Vol. 1315, 2010, 1311-1316

- [Tli10b] B. Tlili, N. Mustapha, C. Nouveau, Y. Benlatreche, G. Guillemot, M. Lambertin, Correlation between thermal properties and aluminum fractions in CrAlN layers deposited by PVD technique, *Vacuum* 84 (9), 2010, 1067-1074
- [Tom12] I. Tomashchuk, I. Bendaoud, E. Cicala, S. Matteï, H. Andrzejewski, P. Sallamand, A. Mathieu, F. Bouchaud, Modélisation numérique du soudage hybride laser- MIG des aciers inoxydables en fortes épaisseurs Conference: Conference: LASERAP'7 , Ecole CNRS, île d'Oléron, France, Octobre 2012
- [Tom22] B. Tomar, S. Shiva, T. Nath, A review on wire arc additive manufacturing: Processing parameters, defects, quality improvement and recent advances, *Materials Today Communications* 31, 2022, 103739
- [Tou09] D. Tourret, Modélisation des cinétiques de réactions multiples dans les alliages métalliques : étude de la microségrégation lors de la solidification dendritique, péritectique et eutectique d'alliages aluminium-nickel, Thèse de Doctorat ENSMP, 2009
- [Tou20] D. Tourret, L. Sturz, A. Viardin, M. Založnik. Comparing mesoscopic models for dendritic growth. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 861, 2020, 012002
- [Tra11] A. Traidia, F. Roger, Numerical and experimental study of arc and weld pool behaviour for pulsed current GTA welding, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54, 2011, 2163-2179
- [Tra17] J. Trapp, A.M. Rubenchik, G. Guss, M.J. Matthews, In situ absorptivity measurements of metallic powders during laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Applied Materials Today* 9, 2017, 341–349
- [Tra24] TRANSWELD®, Logiciel TRANSVALOR, www.transvalor.com/fr/transweld
- [Tri86] R. Trivedi, W. Kurz, Morphological stability of a planar interface under rapid solidification conditions, *Acta Metallurgica* 34 (8), 1986, 1663–1670
- [Trt09] B. Trtik, B. Münch, P. Lura, A critical examination of statistical nanoindentation on model materials and hardened cement pastes based on virtual experiments, *Cement and Concrete Composites* 31 (10), 2009, 705-714
- [Ulm10] F.-J. Ulm, M. Vandamme, H. M. Jennings, J. Vanzo, M. Bentivegna, K. J. Krakowiak, G. Constantinides, C. P. Bobko, K. J. Van Vliet, Does microstructure matter for statistical nanoindentation techniques?, *Cement and Concrete Composites* 32 (1), 2010, 92-99
- [Val07] A. Valor, D. Rivas, F. Caleyó, J.M. Hallen, Discussion: statistical characterization of pitting corrosion - Part 1: data analysis and Part 2: probabilistic modeling for maximum pit depth, *Corrosion* 63, 2007, 107-113
- [Val10] A. Valor, F. Caleyó, L. Alfonso, D. Rivas, J.M. Hallen, Stochastic modeling of pitting corrosion: a new model for initiation and growth of multiple corrosion pits, *Corrosion Science* 49, 2007, 559-579

- [Via22] A. Viardin, B. Böttger, M. Apel, Phase field assisted analysis of a solidification based metal refinement process. *Mater Theory* 6 (14), 2022
- [Vig19] B. Vignesh, W.C. Oliver, G. Siva Kumar, P. Sudharshan Phani, Critical assessment of high speed nanoindentation mapping technique and data deconvolution on thermal barrier coatings, *Materials & Design* 181, 2019, 108084
- [Vin86] O. Vingsbo, S. Hogmark, B. Jönsson, A. Ingemarson, in: P.J. Blau, B.R. Lawn (Eds.), *Microindentation Techniques in Materials Science and Engineering ASTM STP 889*, American Society for Testing and materials, Philadelphia, 1986, 257
- [Vin23] The strategic innovation programme for Metallic material, www.vinnova.se/en/calls-for-proposals/the-strategic-innovation-programme-for-metallic-material, www.metalliskamaterial.se/en/home
- [Vol22] G. Maziero Volpato, U. Tetzlaff, M. C. Fredel, A comprehensive literature review on laser powder bed fusion of Inconel superalloys, *Additive Manufacturing* 55, 2022, 102871
- [Wag52] C. Wagner, *Thermodynamics of Alloys*, Addison-Wesley, Reading MA, 1952, 67
- [Wag91] R. Wagner, R. Kampmann, Homogeneous second-phase precipitation, *Materials Science and Technology: Phase Transformations in Materials*, eds, Cahn, R. W., Haasen, P., Kramer, E. J., 213–302. VCH, Weinheim, 1991
- [Wal17] A. van de Walle, R. Sun, Q.-J. Hong, S. Kadkhodaei, Software tools for high-throughput CALPHAD from first-principles data, *Calphad* 58, 2017, 70-81
- [Wan04] N. Wang, S. Mokadem, M. Rappaz, W. Kurz, Solidification cracking of superalloy single- and bi-crystals, *Acta Mater* 52, 2004, 3173–3182
- [Wan07] H. Wang, F. Liu, Z. Chen, G. Yang, Y. Zhou, Analysis of non-equilibrium dendrite growth in a bulk undercooled alloy melt: Model and application, *Acta Materialia*, 55 (2), 2007, 497-506
- [Wan13] K. Wang, H. Wang, F. Liu, H. Zhai, Modeling rapid solidification of multicomponent concentrated alloys, *Acta Mater.* 61 (4), 2013, 1359–1372
- [Wan16a] Y. Wang, G. Cheng, Quantitative evaluation of pit sizes for high strength steel: Electrochemical noise, 3-D measurement, and image-recognition-based statistical analysis, *Materials & Design* 94, 2016, 176-185
- [Wan16b] Y. Wang, G. Cheng, Application of gradient-based Hough transform to the detection of corrosion pits in optical images, *Applied Surface Science* 366, 2016, 9-18
- [Wan16c] H. Wang, E.H Han, Computational simulation of corrosion pit interactions under mechanochemical effects using a cellular automaton/finite element model 103, 2016, 305-311
- [Wan21] W. Xu, X. Li, J. Zhang, Z. Xue, J. Cao, Ultrasonic signal enhancement for coarse grain materials by machine learning analysis, *Ultrasonics*, 117, 2021, 106550
- [Wan22a] Y. Wang, X. Zhang, D. Wang, J. Chen, C. Yu, J. Chen, J. Xu, P. Zhu, H. Lu, A comprehensive analysis of ultrasonic pulse current reducing hot cracking in Inconel 718 welds, *Materials Characterization*, 187, 2022, 111840

- [Wan22b] W. Wang, W. Lin, R. Yang, Y. Wu, J. Li, Z. Zhang, Z. Zhai, Mesoscopic evolution of molten pool during selective laser melting of superalloy Inconel 738 at elevating preheating temperature, *Materials & Design* 213, 2022, 110355
- [War13] B. Warcholinski, A. Gilewicz, Effect of substrate bias voltage on the properties of CrCN and CrN coatings deposited by cathodic arc evaporation, *Vacuum* 90, April 2013, 145–150
- [War16] A. D. Warren, R. L. Harniman, Z. Guo, C. M. Younes, P. E. J. Flewitt, T. B. Scott, Quantification of sigma-phase evolution in thermally aged 2205 duplex stainless steel, *Journal of Materials Science* 51 (2), 2016, 694 - 707
- [Wat22] M. Watanabe, C. Koyama, Y. Watanabe, T. Ishikawa, Density and viscosity of Ni–Ti melts measured by an electrostatic levitation technique, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 198, 2022, 123435
- [Wei16] Y.J. Wei, D.H. Xia, S.Z. Song, Detection of SCC of 304 NG stainless steel in an acidic NaCl solution using electrochemical noise based on chaos and wavelet analysis, *Russian journal of electrochemistry* 52 (6), 2016, 560-575
- [Wei17] H.L. Wei, J.W. Elmer, T. DebRoy, Crystal growth during keyhole mode laser welding, *Acta Materialia* 133, 2017, 10-20
- [Wei19] J. Wei, X. Chu, X.-Y. Sun *et al.*, Machine learning in materials science. *InfoMat.* 1, 2019, 338-358
- [Wel01] *Welding Handbook* in 9th ed, in American Welding Society Inc (Ed.), *Welding Processes*, 2, 2001
- [Whe92] A.A. Wheeler, W.J. Boettinger, G.B. McFadden, Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys, *Phys. Rev. A* 45, 1992, 7424–7439
- [Whi82] D.J. Whitehouse, The parameter rash – is there a cure ? *Wear*, 1982, 75-78
- [Won00] Y. M. Won, T. J. Yeo, D. J. Seol, K. H. Oh, A new criterion for internal crack formation in continuously cast steels. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 31(4), 2000, 779-794
- [Wri20] J. Wright, C. Giacobbe, M. Majkut, New opportunities at the Materials Science Beamline at ESRF to exploit high energy nano-focus X-ray beams, *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 24 (2), 2020, 100818
- [Wu23] Y. Wu, J. Fang, C. Wu, C. Li, G. Sun, Q. Li, Additively manufactured materials and structures: A state-of-the-art review on their mechanical characteristics and energy absorption, *International Journal of Mechanical Sciences* 246, 2023, 108102
- [Xu09] G. Xu, J. Hu, H.L. Tsai, Three-dimensional modeling of arc plasma and metal transfer in gas metal arc welding, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 52, 2009, 1709-1724
- [Xue22a] C. Xue, Modeling of Grain Structure and Hot Cracking for Arc Welding Processes, Doctorat Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis, soutenue le 15 Mars 2022

- [Xue22b] C. Xue, N. Blanc, F. Soulié, C. Bordreuil, F. Deschaux-Beaume, G. Guillemot, M. Bellet, Ch.-A. Gandin, Structure and texture simulations in fusion welding processes – comparison with experimental data, *Materialia* 21, 2022, 101305
- [Xue22c] C. Xue, G. Guillemot, C.-A. Gandin, M. Bellet, P.-E. Lhuillier, A. Schumm, J. Dalphin, Z. Aghenzour, Grain structure modeling in fusion welding processes using a coupled CAFE approach - Application in NDT methods, 5th International Workshop on Laser-Ultrasound for Metals (Lus4Metals), 5-6 Mai 2022, Gif-sur-Yvette, France
- [Yan11] Y. Yang, H. Humadi, D. Buta, B. B. Laird, D. Sun, J. J. Hoyt, M. Asta, Atomistic simulations of nonequilibrium crystal-growth kinetics from alloy melts, *Phys. Rev. Lett.* 107 (2), 2011, 025505
- [Yan18] Z. Yan, W. Liu, Z. Tang, X. Liu, N. Zhang, M. Li, H. Zhang, Review on thermal analysis in laser-based additive manufacturing, *Optics and Laser Technology*, 106, 2018, 427-441
- [Yan21] T.F. Yan, G.Z. Wang, K. Wang, F.Z. Xuan, S.T. Tu, Limit loads of dissimilar metal welded joints for joining safe end to pipe-nozzle of nuclear pressure vessel, *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 194, Part B, 2021, 104554
- [Yap15] C. Y. Yap, C. K. Chua, Z. L. Dong, Z. H. Liu, D. Q. Zhang, L. E. Loh et S. L. Sing, Review of selective laser melting: Materials and applications, *Applied Physics Reviews* 2, 2015, 041101
- [Yas99] P. C. Yashar, W. D. Sproul, Nanometer scale multilayered hard coatings, *Vacuum* 55, 1999, 179-190
- [Ye16] Y.F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C.T. Liu, Y. Yang, High-entropy alloy: challenges and prospects, *Materials Today* 19 (6), 2016, 349-362
- [You20] G. A. Young, M. J. Hackett, J. D. Tucker, T. E. Capobianco, 3.15 - Welds for Nuclear Systems, Editor(s): Rudy J.M. Konings, Roger E. Stoller, *Comprehensive Nuclear Materials* (Second Edition), Elsevier, 2020, 517-544
- [Yu22] W. Yu, H. Zheng, Z. Xiao, Microstructure of aluminum alloys manufactured via laser powder bed fusion: A review, *Materials Today: Proceedings* 70, 2022, 382-387
- [Zan03] M.-L. Zani, Mesures Mécaniques, La mesure de rugosité ? Quelques normes ... et plusieurs dizaines de paramètres, *Mesures* 758, 2003, 59-63
- [Zen49] C. Zener, Theory of Growth of Spherical Precipitates from Solid Solution, *Journal of Applied Physics* 20 (10), 1949, 950–953
- [Zha04] R. Zhang, X. Wang, Z. Chen & W. Jie, Simulation of constrained dendrite growth of multicomponent alloys using a Calphad method, *Materials Science and Technology* 20 (2), 2004, 181-184
- [Zha12a] X. Zhang, J. Zhao, H. Jiang, M. Zhu, A three-dimensional cellular automaton model for dendritic growth in multi-component alloys, *Acta Materialia* 60 (5), 2012, 2249-2257

- [Zha12b] Z.Z. Zhang, C.S. Wu, Monte Carlo simulation of grain growth in heat-affected zone of 12wt.% Cr ferritic stainless-steel hybrid welds, *Computational Materials Science* 65, 2012, 442-449
- [Zha16a] J. Zhang, F. Liou, W. Seufzer, K. Taminger, A coupled finite element cellular automaton model to predict thermal history and grain morphology of Ti-6Al-4V during direct metal deposition (DMD), *Additive Manufacturing* 11, 2016, 32-39
- [Zha16b] Z. Zhang, Q. Wu, M. Grujicic, Z. Y.Wan, Monte Carlo simulation of grain growth and welding zones in friction stir welding of AA6082-T6, *Journal of Materials Science* 51 (4), 2016, 1882- 1895
- [Zha18a] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bernacki, M. Bellet, Macroscopic thermal finite element modelling of additive metal manufacturing by selective laser melting process, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 331, 2018, 514-535
- [Zha18b] Y. Zhang, Q. Chen, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, M. Bellet, Numerical modelling of fluid and solid thermomechanics in additive manufacturing by powder-bed fusion: Continuum and level set formulation applied to track- and part-scale simulations, *Computational methods in welding and additive manufacturing / Simulation numérique des procédés de soudage et de fabrication additive, Comptes Rendus Mecanique* 346 (11), 2018, 1055-1071
- [Zha19] Y. Zhang, J. Zhang, Modeling of solidification microstructure evolution in laser powder bed fusion fabricated 316L stainless steel using combined computational fluid dynamics and cellular automata, *Additive Manufacturing* 28, 2019, 750-765
- [Zha20] S. Zhang, Numerical simulation of mechanical interactions between liquid and solid phases in solidification processes, Doctorat Mines Paris - PSL, Sophia Antipolis, soutenue le 25 février 2020
- [Zha21a] Y.-Z. Zhang, Z.-G. Wang, L.-Y. Xie, Z.-Y. Ding, Y.-H. Ma, J.-H. Ouyang, Z.-G. Liu, Y.-J. Wang, Y.-M. Wang, Laser surface nanocrystallization of oxide ceramics with eutectic composition: a comprehensive review, *Heat Treatment and Surface Engineering*, 3 (1), 2021, 37-54
- [Zha21b] S. Zhang, G. Guillemot, CA. Gandin, CA., M. Bellet, A Partitioned Solution Algorithm for Concurrent Computation of Stress–Strain and Fluid Flow in Continuous Casting Process. *Metall Mater Trans B* 52, 2021, 978–995
- [Zha22] C. Zhang et Y. Yang, The CALPHAD approach for HEAs: Challenges and opportunities. *MRS Bulletin* 47, 2022, 158–167
- [Zha23] Z. Zhang, Z. Guo, B. Jiang, S. Xiong, F. Pan, Numerical solution to phase-field model of solidification: A review, *Computational Materials Science* 228, 2023, 112366
- [Zho18] M. Zhou, Effect of laser-MIG hybrid welding on microstructure and properties of seismic steel plate for buildings, *Results in Physics* 12, 2019, 840–845

Contribution à la modélisation des procédés de mise en forme par solidification

– Application au soudage et à la fabrication additive

Résumé :

Ce manuscrit présente, à travers différents chapitres, les travaux que j'ai été amené à suivre, encadrer et développer durant mes activités de recherche, dans un premier temps, au sein de l'équipe CPP (Arts et Métiers, Centre de Lille) puis au CEMEF (Mines Paris - PSL). Les premiers de ces travaux ont, ainsi, été liés à la caractérisation des surfaces et interfaces des matériaux. Les thèmes abordés ont été, en ce sens, très divers et ont permis de nous intéresser à des problématiques de dureté, de rugosité et de corrosion. Les seconds, de nature différente, se sont orientés vers la modélisation des transformations de phases dans les alliages métalliques. Ces dernières activités ont porté, plus particulièrement, sur l'étude des procédés de soudage et de fabrication additive. Elles présentaient un caractère très numérique, en s'intéressant, notamment, au comportement thermomécanique de différents matériaux d'intérêt durant ces procédés, couplé au suivi de leurs évolutions microstructurales. Un formalisme level set a été mis en place pour simuler ces procédés, dans le cadre de prises de moyennes volumiques et d'une résolution éléments finis.

Des modèles ont, ainsi, été proposés pour représenter l'apport de matière en soudage (TIG, MIG/MAG), ainsi que l'effet des sources d'énergie. De même, dans le cadre des procédés de fabrication additive (L-PBF, WAAM, WLAM), nous avons développé des approches destinées au suivi de l'apport d'énergie et des transformations rapides de la matière. Le développement des microstructures a été étudié par des méthodes automates cellulaires qui ont permis de prédire les morphologies finales des grains formés et les textures des matériaux élaborés. Une exploitation originale des structures de grains virtuelles, produites en simulation du soudage, s'est faite dans le cadre de l'amélioration des outils de contrôle non destructif (projet NEMESIS). En complément, une activité forte de conception d'outils destinés au suivi des transformations de phases dans les alliages métalliques est décrite, à travers le développement de la librairie PhysalurgY, couplée au calcul des équilibres thermodynamiques (logiciel Thermo-Calc). Différents outils de cette librairie sont rappelés, permettant un suivi de ces évolutions à différentes échelles spatiales et temporelles.

L'ensemble de ces activités se sont réalisées dans le cadre de partenariats académiques (projets ANR) et industriels (Thèses CIFRE) pérennes, régulièrement rappelés, qui ont contribué à valider nos modèles numériques et à démontrer la qualité des résultats obtenus. La reconnaissance de cette qualité s'est faite au travers de publications et communications scientifiques régulières. Un bilan des encadrements, et des productions scientifiques associées, est apporté dans le descriptif des activités, ainsi que dans la conclusion finale. Des perspectives sont, ensuite, tracées pour discuter des orientations futures de ces travaux, des ouvertures envisagées et des besoins associés.

Mots clefs : Surfaces et interfaces, Soudage, Fabrication additive, Couplages thermodynamiques, Evolution microstructurale, Modélisation numérique