



## Séminaire du 30 mars 2023

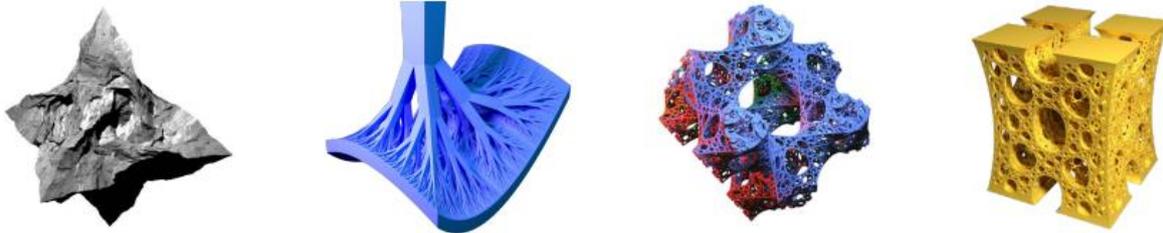


### Matériaux Numériques

# Modélisation géométrique de formes complexes suivant le paradigme de la géométrie fractale

Christian GENTIL<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Université de Bourgogne, Laboratoire d'informatique de Bourgogne (LIB - EA 7534), Dijon, France



Les modèles de représentation géométrique développés pour la conception assistée par ordinateur (C.A.O) ont été initialement conçus pour représenter des formes géométriques matérialisables par des procédés standards de fabrication : fraisage, tournage, emboutissage, moulage,... La représentation de surfaces linéaires, polynomiales ou rationnelles associée à des descriptions topologiques et des opérateurs de combinaison étaient alors suffisants pour répondre aux besoins de modélisation. Les procédés de fabrication additive ont bouleversé les approches de conception et les applications potentielles, en offrant la possibilité de fabriquer une plus grande variété de formes. Par exemple, il est possible de produire des « formes complexes » présentant des micro-structures permettant de changer et contrôler les propriétés des objets (mouillabilité, échange thermique,...). Ces formes complexes peuvent être définies par des algorithmes qui vont produire des représentations de ces géométries. Apparaît alors plusieurs difficultés. Ces algorithmes sont spécifiques à une application ou à un problème posé. Il n'y a pas de modèle explicite de la structure géométrique ou topologique de la forme. L'algorithme fournit un codage (maillage surfacique, volumique, octree, ...) nécessitant une quantité d'information importante, engendrant des temps de calcul importants pour les manipulations ou simulations numériques.

Nous présentons le modèle « Boundary Iterated Function system » (BC-IFS) [2] fondé sur le paradigme de la géométrie fractale. L'un des intérêts de la géométrie fractale est de représenter de façon concise des structures complexes [1]. Ces structures apparaissent souvent dans la nature comme des solutions optimales de systèmes contraints (structure des arbres pour capter la lumière).

Le principe du modèle BC-IFS est de décrire le processus de subdivision des formes auto-similaires à l'aide d'un automate. Ce dernier représente les différentes cellules (sommet, arête fractale, face fractale, volume fractal, ...) et leurs relations topologiques au cours du processus de subdivision à l'aide de contraintes d'incidence et adjacence. Il est alors possible de représenter toutes les formes fractales au sens auto-similaire, mais également toutes les formes générées par des procédés itératifs comme notamment les surfaces et volumes classiques (Bézier, Splines, NURBS et surfaces de subdivisions).

Nous présentons deux contextes d'exploitation, tout d'abord dans le cadre du projet ANR FRACLETTES portant sur la représentation de surfaces rugueuses puis dans celui du projet ANR ITERATE pour l'exploitation de structures lacunaires multi-échelles pour l'allègement de pièces.

## Références

- [1] J. Hutchinson. «Fractals and Self Similarity », Indiana University Mathematics Department, vol. 30, p. 713-747, 1981.
- [2] Gentil, C., G. Gouaty, and D. Sokolov « Modélisation géométrique de formes fractales pour la CAO. Modélisation géométrique et applications », collection : Méthodes numériques. ISBN papier : 9781784056612 ISBN ebook :9781784066611. ISTE Group.

# Propriétés effectives d'un matériau à géométrie périodique lacunaire fractale : simulations numériques et essais expérimentaux

Rawad Wakim<sup>a</sup>, Christian Gentil<sup>b</sup>, Lucien Laiarinandrasana<sup>a</sup>, Alain Thionnet<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centre des Matériaux MINES Paris, Université PSL, Evry, France

<sup>b</sup> Laboratoire d'Informatique de Bourgogne, Université de Bourgogne, Dijon, France\*

La notion de géométrie fractale repose sur le concept d'autosimilarité formalisée par Hutchinson en 1981 [1] à l'aide de la notion de système itéré de fonctions (IFS : Iterated Function System) défini comme un ensemble de transformations géométriques. Dans le cadre de cette étude, on va supposer que les éléments de l'IFS sont des transformations contractantes. Ainsi, on définit l'attracteur A associé à l'IFS, l'objet fractal, qui possède la propriété d'autosimilarité et n'est accessible qu'itérativement.

L'objectif de l'étude est d'évaluer le tenseur  $C \approx$  d'ordre 4 de comportement élastique linéaire d'un matériau dont la microstructure est périodique et dont la géométrie de la période est fractale, donc l'attracteur A d'un IFS. La technique de l'homogénéisation périodique par la méthode de la moyenne (THPMM) est le moyen le plus immédiat pour obtenir le résultat. On utilise cette technique, dans le rôle d'élément de comparaison, à la voie plus originale que l'on va tenter d'emprunter : construire une technique d'homogénéisation combinant les concepts de la THPMM et le procédé géométrique de construction de A.

On met ainsi en évidence que la première étape théorique du travail est la résolution de la question plus générale de l'évaluation d'une fonction  $f$  sur l'attracteur A d'un IFS. Pour cette première étape on montre que deux voies sont possibles : une approche itérative basée sur la propriété d'autosimilarité de l'attracteur de l'IFS auquel il est associé, et une autre non itérative qui consiste à construire l'attracteur du résultat  $f(A)$ .

La seconde étape est de considérer que la fonction  $f$  est la fonction de comportement élastique linéaire (et notamment le tenseur de rigidité homogénéisé) d'un matériau dont la microstructure est périodique et dont la géométrie de la période est fractale. Pour l'heure, on ne donne pas de réponse générale à la question posée mais on regarde, sur quelques exemples et dans le cas de l'approche itérative, si l'objectif est potentiellement accessible.

Une fois la conception théorique et numérique de l'objet "fractal-périodique" effectuée, il est envisagé de fabriquer un tel objet grâce aux progrès considérables des procédés de fabrication additive. Plusieurs problématiques ont été abordées. Tout d'abord, il convient de déterminer la taille maximale de la cellule fractale et donc le niveau maximal d'itérations (théoriquement infini), limité à deux par le dispositif expérimental et la résolution minimale du procédé de fabrication additive. De même, il est essentiel de définir la taille maximale du VER (cubique) et le nombre de cellules fractales par arête, qui sont imposés par le coût de fabrication et la résolution minimale du procédé de fabrication, limitant le nombre de cellules fractales à quatre par arête.

Par la suite, il s'agit d'une étape expérimentale qui sera mise en œuvre par des essais in-situ en tomographie au Synchrotron [2]. Le but est double :

- étudier la variabilité de la structure imprimée avec la structure fractale théorique ;
- analyser l'hétérogénéité des déformations locales en cours d'essai, et la relier au chargement global permettant de vérifier les propriétés effectives.

## Références

[1] John E. Hutchinson. «Fractals and Self Similarity », Indiana University Mathematics Department, vol. 30, p. 713-747, 1981.

[2] Maxime Pelerin, Andrew King, Lucien Laiarinandrasana, Henry Proudhon. «Development of a Versatile Mechanical Testing Device for In Situ Synchrotron Tomography and Diffraction Experiments », Integrating Materials and Manufacturing Innovation, vol. 8 (3), p. 378-387, 2019.

# Simulation numérique avancée pour la compréhension de la résilience de pièces forgées en présence de ségrégations locales

Régis Kenko<sup>a</sup>, Jacques Besson<sup>a</sup>, Pierre Joly<sup>b</sup>, Kais Ammar<sup>a</sup> et Pierre Kerfriden<sup>a</sup>

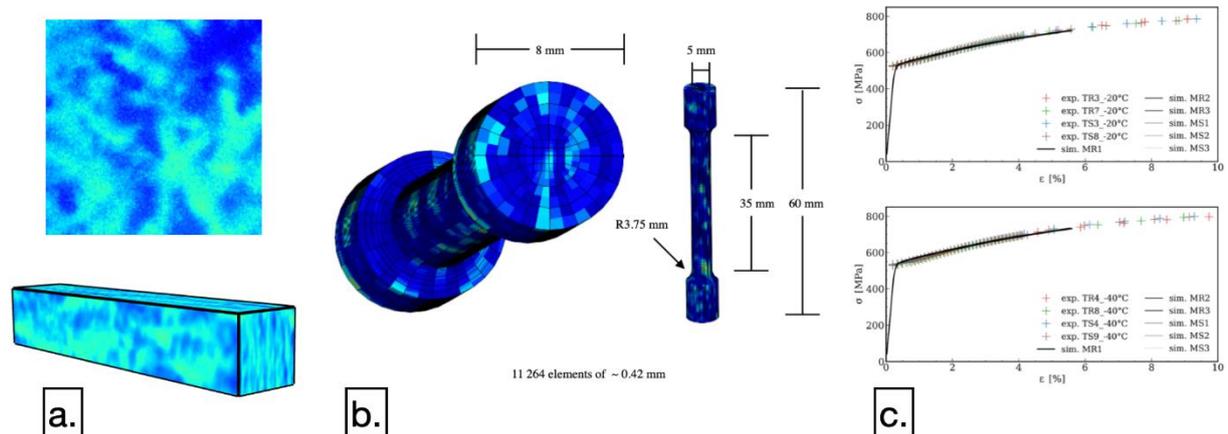
<sup>a</sup> MINES Paris, Université PSL, MAT - Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87, 91003 Evry, France

<sup>b</sup> Framatome, Direction Technique et Ingénierie (DTI), 1 Place Jean Millier, 92084, Paris La Défense, France

L'essai de résilience Charpy est un essai mécanique couramment utilisé par l'industrie nucléaire qui mesure la capacité d'un matériau à dissiper de l'énergie avant de rompre. Des essais récents sur un acier faiblement allié provenant d'une pièce forgée d'essai ont révélé une variabilité significative dans les énergies de rupture et des valeurs anormalement basses. Cette variabilité de la résilience est également observée au sein de certaines zones de grandes pièces forgées présentant des hétérogénéités à l'échelle du millimètre.

Ces hétérogénéités de nature chimique, sont l'héritage, après forgeage et traitements thermiques, de ségrégations chimiques locales (micro et méso-ségrégations) se produisant lors de la solidification des lingots. Elles se traduisent dans la pièce forgée par des variations de microstructure, de dureté et de propriétés mécaniques locales. Il est pressenti que ces hétérogénéités contribuent largement à la variabilité dans les résultats des essais de résilience.

L'objet de notre étude est de comprendre et évaluer l'effet de ces hétérogénéités à l'échelle millimétrique sur la distribution d'énergies de rupture par le biais d'une approche numérique innovante basée sur l'apprentissage profond ainsi que sur une modélisation haute fidélité de la rupture fragile comme présenté sur la [Figure 1](#).



**Figure 1:** (a.) Macrographie expérimentale 2D de 20x20 mm<sup>2</sup> et volume synthétique 3D de 55x10x10 mm<sup>3</sup> généré par réseau de neurones [Kench, 2021]. (b.) Identification et attribution d'une loi de comportement mésoscopique par niveau de gris à partir de corrélations entre des essais de micro-indentation et la teneur des traceurs de la ségrégation chimique. (c.) Validation

de la loi de comportement en vue de simulations sur des éprouvettes Charpy mésoségrégées [Beremin, 1983].

**Références:**

[Kench, 2021] Kench and Cooper (2021) generated 3D structures from a 2D slice using GAN-based dimensionality expansion. (Nat. Mach. Intell. 3: 299–305)

[Beremin, 1983] Beremin et al. (1983) A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. (Metall. Mater. Trans. A 14: 2277–2287)

# Mapping crystal orientation and morphology nondestructively in 3D with lab-based diffraction contrast tomography

Jette ODDERSHEDE<sup>a</sup>, Jun SUN<sup>a</sup>, Florian BACHMANN<sup>a</sup>, Erik LAURIDSEN<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Xnovo Technology ApS, Galoche Alle 15, 1<sup>st</sup> floor, 4600 Køge, Denmark

Mapping the 3D-spatial crystallographic orientation of polycrystalline materials holds tremendous value for 3D materials science since the properties and performance of materials are intricately linked to microstructural morphology including crystal orientation.

3D non-destructive crystallographic imaging techniques were first developed at synchrotron light sources in the early 2000s, using techniques such as synchrotron diffraction contrast tomography (DCT) and 3D X-ray diffraction microscopy (3DXRD), leading to several breakthrough studies uncovering the underlying mechanisms of annealing phenomena in polycrystalline materials.

In response to the need for wider access to non-destructive 3D grain mapping techniques, substantial efforts have been made over the past decade to establish DCT in the laboratory. At the time being, lab-based DCT is serving many users worldwide for routine, non-destructive, time-evolution studies over meaningful sample volumes in the laboratory.

This talk will include recent advancements in data acquisition approaches and ongoing efforts to improve the performance and enhance capabilities of lab-based DCT. In addition, selected relevant application examples will be given.

# Effets polycristallins sur la localisation en déformation plane : tomographie corrélative et simulations numériques

Maryse GILLE<sup>a</sup>, Henry PROUDHON<sup>a</sup>, Jette ODDERSHEDE<sup>b</sup>, Thilo MORGENEYER<sup>a</sup>

<sup>a</sup> MINES Paris, Université PSL, MAT - Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87, 91003 Evry, France

<sup>b</sup> Xnovo Technology ApS, Galoche Alle 15, 1st floor, 4600 Køge, Denmark

Dans une logique d'allègement des structures pour réduire les émissions de CO<sub>2</sub>, les alliages d'aluminium tendent à remplacer l'acier dans les carrosseries automobiles. Lors de la mise en forme des tôles, la plupart des casses en emboutissage ont lieu dans un état proche de la déformation plane [1]. Ce travail s'intéresse donc à la compréhension des effets polycristallins sur la localisation des déformations menant à la rupture pour un alliage d'aluminium 6016 en déformation plane.

Une éprouvette miniaturisée de traction en déformation plane inspirée par Park et al. [2] a été mise au point pour étudier cet état de déformation critique pour la formabilité. Après l'acquisition de manière non-destructive de la cartographie 3D exacte des grains dans la région centrale de l'éprouvette par Tomographie à Contraste de Diffraction (DCT) [3], [4], un test de traction *in situ* imagé par tomographie à contraste d'absorption a été réalisé (voir Figure 1).

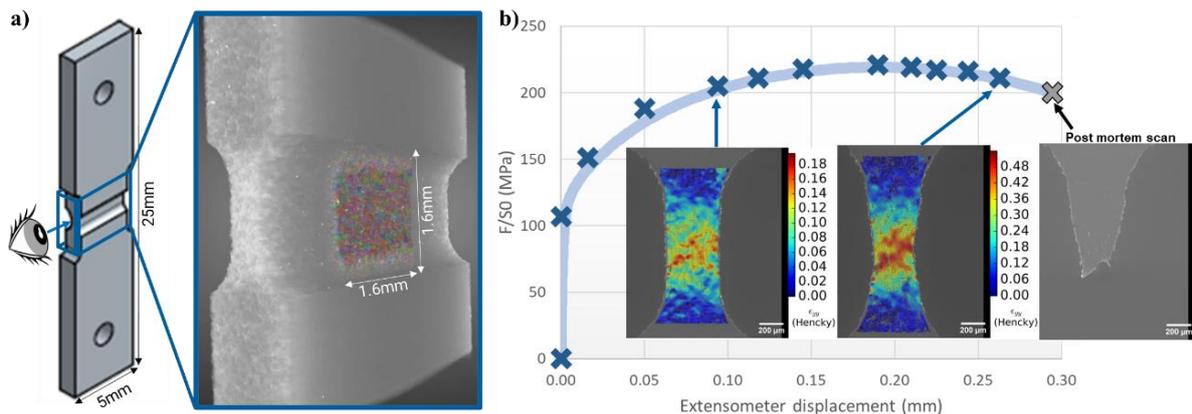


Figure 1 – a) Eprouvette miniaturisée de traction en déformation plane à l'état initial avec la cartographie 3D des grains obtenue par DCT; b) Courbe de charge-déplacement indiquant l'emplacement des 12 scans *in situ* de tomographie d'absorption (croix bleues). Le champ de déformation  $\epsilon_{yy}$  (direction de traction) est visible pour 2 étapes de chargement et est à comparer à la localisation de la rupture finale sur le scan post mortem.

La DIC projetée [5] est utilisée pour calculer à partir des scans de tomographie d'absorption les champs de déformation à l'intérieur de l'éprouvette. Des champs de déformation hétérogènes avec des bandes de localisation correspondant au lieu de la rupture sont ainsi révélés (cf. Figure 1.b). La comparaison des ces résultats expérimentaux à des résultats de simulations numériques basées sur différents modèles (modèle élasto-plastique anisotrope de Bron-Besson [6], calcul de plasticité cristalline [7]) permettra de quantifier le niveau de fidélité des modèles et de mieux comprendre les mécanismes polycristallins en jeu lors de l'emboutissage d'une tôle d'aluminium 6016.

## Références

- [1] J. Bottema, C. Lahaye, R. Baartman, L. Zhuang, P. De Smet, and F. Schoepen, 'Recent Developments in AA6016 Aluminium Type Body Sheet Product', *SAE Transactions*, vol. 107, pp. 900–907, 1998.
- [2] N. Park, T. B. Stoughton, and J. W. Yoon, 'A new approach for fracture prediction considering general anisotropy of metal sheets', *International Journal of Plasticity*, vol. 124, pp. 199–225, 2020, doi: 10.1016/j.ijplas.2019.08.011.
- [3] F. Bachmann, H. Bale, N. Gueninchault, C. Holzner, and E. Lauridsen, '3D grain reconstruction from laboratory diffraction contrast tomography', *J Appl Crystallogr*, vol. 52, Jun. 2019, doi: 10.1107/S1600576719005442.
- [4] J. Oddershede, F. Bachmann, J. Sun, and E. Lauridsen, 'Advanced Acquisition Strategies for Lab-Based Diffraction Contrast Tomography', *Integr Mater Manuf Innov*, vol. 11, no. 1, pp. 1–12, Mar. 2022, doi: 10.1007/s40192-021-00249-w.
- [5] A. Buljac, F. Hild, L. Helfen, and T. F. Morgeneyer, 'On deformation and damage micromechanisms in strong work hardening 2198 T3 aluminium alloy', *Acta Materialia*, vol. 149, pp. 29–45, May 2018, doi: 10.1016/j.actamat.2018.01.026.
- [6] F. Bron and J. Besson, 'A yield function for anisotropic materials Application to aluminum alloys', *International Journal of Plasticity*, vol. 20, no. 4, pp. 937–963, Apr. 2004, doi: 10.1016/j.ijplas.2003.06.001.
- [7] A. Musienko, 'Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement', phdthesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Centre des Matériaux P.M. FOURT, 2005. Accessed: May 10, 2022. [Online]. Available: <https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-00159409>

# Vers l'identification de lois de plasticité cristalline par jumeau numérique et apprentissage statistique

Daria MESBAH<sup>a, b</sup>, David RYCKELYNCK<sup>b</sup>, Henry PROUDHON<sup>b</sup>, Lionel GELEBART<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, 91191 Gif-sur-Yvette

<sup>b</sup> MINES Paris, Université PSL, Centre des Matériaux (MAT), UMR CNRS, 91003 Evry, France

L'observation des hétérogénéités de déformation au sein des matériaux polycristallins a encouragé le développement de modèles mécaniques en plasticité cristalline tenant compte du comportement local de la microstructure [1]. La confrontation des simulations en plasticité cristalline avec des résultats expérimentaux est aujourd'hui réalisée en s'intéressant aux réponses effectives ou à des données microscopiques surfaciques.

L'avènement de l'analyse par diffraction des rayons X (3D X-Ray Diffraction), en infrastructure synchrotron, constitue une opportunité majeure pour la caractérisation volumique des matériaux polycristallins [2]. Ces techniques permettent de cartographier la microstructure, en termes de morphologie, d'orientation des grains mais aussi de déformation élastique, à des résolutions ( $10^{-1} \mu m$ ) et sur des épaisseurs ( $10^2 \mu m$ ) inenvisageables par des moyens plus conventionnels. L'obtention de champs volumiques expérimentaux hautement résolus, témoignant de la déformation des matériaux polycristallins, ouvre la voie à une confrontation en champ complet, avec les modèles de plasticité cristalline.

L'accélération de la réalisation de simulations en plasticité cristalline par la méthode de *Fast Fourier Transform* (FFT) offre la possibilité de mettre en place une procédure de calibration multi-échelle des lois de plasticité cristalline. Le travail présenté porte sur une approche alliant les simulations FFT à l'apprentissage statistique, par *Computer Vision*, visant à accélérer la transition entre les échelles de la simulation par une opération de super-résolution micromécanique [3].

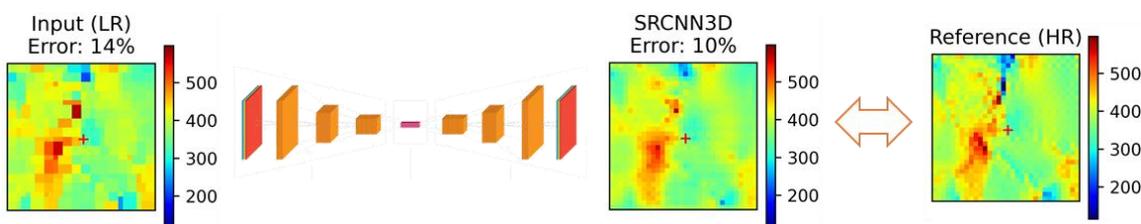


Figure 2 - Super-résolution d'un champ de contraintes à faible résolution à partir d'une architecture SRCNN3D

## Références :

- [1] Méric, L., Poubanne, P., and Cailletaud, G. (1991). Single Crystal Modeling for Structural Calculations: Part 1—Model Presentation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113(1): 162–170.
- [2] Reischig, P. and Ludwig, W. (2020). Three-dimensional reconstruction of intragranular strain and orientation in polycrystals by near-field X-ray diffraction. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 24(5): 100851.
- [3] Dong, C., Loy, C. C., He, K., and Tang, X. (2015). Image Super-Resolution Using Deep Convolutional Networks. arXiv :1501.00092 [cs].



Vous pouvez nous contacter :

- Par courrier postal :

Centre des Matériaux Pierre-Marie Fourt  
Mines Paris  
CNRS UMR 7633, BP 87 91003 Evry, France

- Par téléphone : +33 (0)1 60 76 30 00
- Par courrier électronique : [semteam@mat.mines-paristech.fr](mailto:semteam@mat.mines-paristech.fr)
- Site web : <https://www.mat.minesparis.psl.eu/seminaires/>

**Equipe séminaire :**

Mohamed SAHAOUI  
Matthieu ASSAINTE  
Juliette REDONNET  
Arij GUERZIZ