



Proposition de sujet de thèse - Institut Clément Ader Contrats Doctoraux : IMT Mines Albi – Région Occitanie - 2021

Titre du sujet	Étude numérique de l'influence de la déformation locale héritée du procédé de mise en forme sur le comportement en service de métaux polycristallins (ORCHESTRA)
Directeur de thèse	Denis DELAGNES ¹ , Professeur e-mail : denis.delagnes@mines-albi.fr , tél. : 05 63 49 32 48
Co-Encadrement	Julien GENE ^{1, #} , Damien TEXIER ^{1, 2} , Vincent VELAY ¹ , Vanessa VIDAL ¹ ¹ IMT Mines Albi / Institut Clément ADER (ICA) / Groupe Surface Usinage Matériaux et Outillages ; ² CNRS ; # julien.gene@mines-albi.fr
Laboratoire	Institut Clément Ader (ICA) - UMR CNRS 5312
Ecole Doctorale	ED MEGeP – Spécialité : Génie Mécanique, Mécanique des matériaux

Contexte et problématique :

Durant les phases de production jusqu'à la mise en service, les métaux sont souvent soumis à des états de contraintes mécaniques complexes, de forte amplitude et sous environnement « extrême » (haute température). Au cours de la mise en forme, les alliages métalliques connaissent ainsi de fortes évolutions microstructurales associées au développement d'une distribution de contrainte et de déformation hétérogène au sein du matériau polycristallin. La microstructure issue de ces étapes peut donc être marquée par des déformations résiduelles qui influencent ensuite le comportement du matériau en service. Le projet de thèse vise à développer un modèle numérique basé sur des évolutions de microstructures à différentes échelles et prenant en compte cette histoire de déformation du matériau. L'objectif à terme est de pouvoir prédire l'influence de cet effet d'histoire sur les propriétés mécaniques en service du matériau.

Pour ce faire, l'utilisation d'approches dites « non-locales » est envisagée. Un état de l'art montre que contrairement à des modèles de plasticité standards, ce type de modèles est en mesure de décrire plus fidèlement la distribution et la localisation de la déformation dans les matériaux élasto-viscoplastiques, et l'évolution de cette déformation sous des trajets de chargements thermo-mécaniques relativement complexes. L'implémentation numérique de ce type de modèle peut se faire en utilisant la méthode des éléments finis, mais peut aussi tirer bénéfice de méthodes plus innovantes et plus efficaces, basées sur les transformées de Fourier rapides (approches spectrales de type FFT).

Description du projet :

Le matériau support de l'étude sera un **superalliage base nickel polycristallin**. Le cœur du sujet de thèse constitue le développement d'un modèle numérique de type « non-local ». Celui-ci pourra s'appuyer sur des théories récentes (de type *Continuum Dislocation Dynamics*) documentées dans la littérature et adaptées à la prise en compte des mécanismes élémentaires de déformation pertinents pour une description plus réaliste du comportement mécanique. Le modèle sera implémenté en utilisant la méthode FFT afin de permettre un coût numérique réduit. Les simulations numériques porteront ensuite sur :

- des agrégats polycristallins de taille suffisamment grande pour être représentatifs de la microstructure du matériau d'étude afin d'analyser les **relations entre microstructure et comportement macroscopique** ;
- des agrégats de taille conventionnelle (quelques grains) mais avec un maillage dense afin d'étudier de manière plus fine l'**interaction entre les gradients de déformation initiaux et les mécanismes élémentaires de déformation plastique**.

Le projet de thèse nécessite également la mise en œuvre de **techniques avancées de corrélation d'image numérique (HR-DIC)**, maîtrisées à l'ICA, afin de caractériser expérimentalement les structures de déformation et leur localisation sur des échantillons pré-déformés. Enfin, un **dialogue calculs / essais mécaniques** pourra permettre de valider les capacités prédictives du modèle.

Profil recherché : titulaire d'un master 2 ou d'un diplôme d'ingénieur en sciences et/ou mécanique des matériaux, avec des compétences et un goût prononcé pour la modélisation/simulation numérique et le dialogue essais/calculs.

Date de début de thèse : Octobre 2021

Modalités de candidature :

Déposer un CV et une lettre de motivation sur <https://www.adum.fr/> et en informer les directeurs de thèse par courriel (date limite de candidature : **lundi 31 mai 12h00**).



Thesis proposal for a Doctoral position 2021-2024

Title	Numerical modeling and spectral approaches to study the influence of process-inherited local deformation on in-service behavior of polycrystalline metals (ORCHESTRA)
Thesis Director	Denis DELAGNES ¹ , Professor email : denis.delagnes@mines-albi.fr , tel. : 05 63 49 32 48
Supervising Team	Julien GENEÉ ^{1, #} , Damien TEXIER ^{1, 2} , Vincent VELAY ¹ , Vanessa VIDAL ¹ ¹ IMT Mines Albi / Institut Clément ADER (ICA) / Surface, Machining, Materials and Tools Group ; ² CNRS ; # julien.genee@mines-albi.fr
Laboratory	ICA UMR CNRS 5312 – PhD specialty: Mechanical engineering, mechanics of materials

Background and key issues:

During production stages up until commissioning, metallic materials can be subjected to complex and high-amplitude mechanical stress states, often under extreme conditions (high temperature). Therefore, processing steps of metal alloys induce substantial microstructure evolution associated to the development of heterogeneous stress and strain distributions inside the polycrystal. Residual strains are thus likely to remain in the resulting microstructure. This deformation history is expected to influence the overall behavior of the material stressed under service conditions. The research project aims at developing a numerical model based on microstructural evolutions at different scales (from micro- to macro-scale), taking into account the initial deformation history in order to predict its effect on the mechanical properties of the “processed materials” during service.

To that end, the use of « non-local » modeling approaches is envisaged. In contrast with standard plasticity models, this type of model is able to accurately account for the distribution and localisation of deformation in elastoplastic materials, as well as the evolution of deformation structures through complex thermo-mechanical loading paths. These advanced models can be implemented using finite element methods, but can also benefit from innovative and more efficient Fast-Fourier-transform based methods (FFT spectral approaches).

Description of research project:

The study will focus on a **polycrystalline nickel-based superalloy**. The main objective of the thesis is the development of a numerical non-local model. The latter may rely on existing and recent theories (such as *Continuum Dislocation Dynamics*), that are appropriate to account for elementary deformation mechanisms relevant for a realistic description of mechanical behavior. The implementation of the model might be carried out using a FFT-based spectral approach allowing for reduced numerical cost. Then, numerical simulations will be performed on :

- polycrystalline aggregates large enough to be statistically representative of the microstructure of the studied material, in order to analyze the **relationships between microstructure and macroscopic behavior** ;
- smaller aggregates (only a few grains) but with high-density mesh, in order to study more accurately the **interaction between process-induced deformation gradients and elementary deformation mechanisms** activated during service.

The project also requires the experimental characterization of deformation structures and their localization in pre-deformed samples. This will be performed using **advanced digital image correlation (HR-DIC) techniques**, relying on existing experience at ICA. Finally, an **advanced experiment/simulation dialogue** will be performed and will examine the ability of the model to predict both localisation of plastic strain and overall material behavior.

Required profile: holder of a master 2 or engineer diploma in material sciences and/or mechanics, with skills and interest in modeling and numerical simulation and test-simulation dialogue.

Thesis starting date: October 2021

Application:

Upload CV and motivation letter on <https://www.adum.fr/> and send an e-mail to the supervisors (deadline **monday 31st may 12h00**).