

Modélisation et simulation de l'impact de l'orientation de la
structure microscopique d'un matériau métallique dans un
processus de conduction thermique

par

Emile-Marie BERTHOUMIEU

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DE LA MAÎTRISE
AVEC MÉMOIRE EN AÉROSPATIALE
M. Sc. A.

MONTREAL, LE 30 NOVEMBRE 2022

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Emile-Marie Berthoumieu, 2022



Cette licence Creative Commons signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette oeuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'oeuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE:

M. Sylvain G. Cloutier, directeur de mémoire
Directeur du Département de génie électrique de l'ETS

M. Éric David, président du jury
Professeur titulaire en Génie Mécanique

M. Martin Bolduc, membre du jury
Professeur associé en Génie Électrique

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 27 SEPTEMBRE 2022

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

AVANT-PROPOS

Ce mémoire s'inscrit dans le cadre d'un projet subventionné par l'entreprise européenne ArianeGroup au sein de la chaire de recherche ArianeGroup sur les matériaux émergents dans le domaine de l'aéronautique et du spatial.

Ce mémoire vise l'obtention du diplôme de maîtrise en génie aérospatiale type recherche à l'ETS à l'occasion d'un accord de double diplôme avec l'école française ENSEIRB-MATMECA.

REMERCIEMENTS

La participation à un projet tel que la constitution d'un mémoire de recherche impose un grand nombre de défis personnels à relever. Par exemple d'un point de vue technique, il s'agit d'utiliser directement différents savoir-faires, outils, méthodes que l'on a acquis au fil de sa formation et qui s'expriment dans un contexte non scolaire pour la première fois. Le contexte professionnel amène son lot d'enjeux où l'attente de résultats n'est pas juste synonyme d'une note, qui sera oublié au fil du temps, dans un dossier scolaire. Il est souvent marqué par la confiance que les intervenants extérieurs ont placée en toi et cela implique que l'échec n'est pas envisageable. En outre, c'est la première fois, du moins pour moi, que je suis face à un projet à plein temps où je ne peux me reposer sur un collègue, dans un contexte de travail en groupe, et où rien ne peut venir compenser un échec. J'entends par là que dans un contexte académique lorsque l'on sous-performe dans un test ou dans un projet il y a dans l'immense majorité des cas des secondes chances voir plus encore, un facteur sur lequel on se repose, parfois trop. Toutefois, veuillez ne pas déformer mes propos, cette part professionnelle comporte de nombreux aspects positifs tant par la valorisation de nos travaux et même de notre personne (nous ne sommes alors plus juste un élément d'une promotion tiers) mais aussi la satisfaction immense dès lors que l'on se rend compte que ces nombreuses années de formation servent dans un contexte concret. En fait, comme tout aspect d'un projet de vie, c'est à nuancer. Je dirais même que les éléments négatifs les plus prégnants sont rapidement effacés par la variable la plus importante quand on est immergé dans un projet : le mental.

En effet, il est possible de simplifier l'équation des enjeux car, la formation solide que l'on a pu suivre avant de débiter un mémoire de recherche nous donne toutes les cartes en main pour que la probabilité d'échec soit minimale. Ainsi, seule notre motivation peut faire vaciller le navire qui mène à bon port. Tellement de questions se posent durant les mois et années de ce projet, du simple "vais-je réussir ?" à l'extrême "est-ce que ce métier est finalement fait pour moi ?". A travers toutes ces questions, souvent synonymes de nuits blanches, la finalisation des objectifs peut être mise en péril. Voilà une bien longue introduction pour débiter les vrais remerciements

VIII

car, pour ma part, ce sont de nombreux acteurs qui ont permis de balayer tous mes doutes en dépit des nombreux passages à vide et d'une pandémie qui nous a tous marqués.

Parmi ces acteurs que je souhaite remercier ma première pensée se dirige légitimement en vers mon Directeur, le professeur Sylvain G. Cloutier. Je pense à la confiance qu'il m'a porté dès notre rencontre. J'avais postulé pour un projet de mémoire au sein de son laboratoire, avec une certaine témérité, sans qu'il n'y ait d'offre officielle à pourvoir. Et j'espère ne pas me tromper mais il a su voir en ma personne un intérêt fort pour la science et m'a accepté dans son équipe. Un tel projet, qui est certainement un point de départ fort pour ma carrière, n'aurait jamais pu être possible sans cette grande opportunité que Sylvain m'a donnée et je ne le remercierai jamais assez pour cela.

Néanmoins, du côté québécois, Sylvain n'a pas été la seule et unique aide que j'ai pu recevoir. Loin de là. J'évoque par là l'ensemble des membres de l'équipe du laboratoire qui ont toujours était à l'écoute et ont été artisan de précieux conseil de vie mais aussi scientifique car leur domaine d'expertise, aussi éloigné soit elle de la mienne, on su à mainte reprise compléter les faiblesses que j'ai pu avoir. Je tiens à citer leur nom donc je m'excuse pour cette liste exhaustive, merci à Jaime, Alain, Abhiroop, Felipe, Paul, François-Xavier, Arjun, Ahmed, Yin, Aida, Fabrice, Shayan et Debika. Je tiens à faire une mention spécial à Alain qui a pris de nombreuses heures de son temps pour m'aider dans la fabrication d'échantillons alors que, venant d'une formation basée sur la théorie, je devais être une cause presque perdue.

D'autre part, malgré une distance d'un demi globe terrestre, un soutien moral indéfectible fut apporté par ma famille et mes proches que je me devais de remercier. Je ne pourrais pas tous les citer sans rallonger à outrance ce mémoire mais je tenais tout de même à citer une personne en particulier, mon père. Travaillant dans un domaine scientifique aussi, il est passé par les même étapes que moi et a su être à l'écoute lors des passages à vide que j'ai pu vivre. De plus, il a toujours était porteur de précieux conseils qui m'ont servis au quotidien. Il est claire que ce projet n'aurait pas pu aller si loin sans son soutien voir n'aurait peut être jamais vu le jour.

Enfin un dernier remerciement à mon ami de promotion Rémi Bourgeois, qui m'a aidé à neutraliser certaines incertitudes que j'ai pu avoir sur des parties théoriques et mathématiques.

Modélisation et simulation de l'impact de l'orientation de la structure microscopique d'un matériau métallique dans un processus de conduction thermique

Emile-Marie BERTHOUMIEU

RÉSUMÉ

Le phénomène de conduction thermique est un des phénomènes physiques marquant des domaines de l'aéronautique ou du spatial que ce soit durant la durée de vie des pièces d'un porteur que pendant leurs processus de fabrication/traitement. Majoritairement, ce phénomène est modélisé via une équation de diffusion isotrope. Cependant dans certains contextes particuliers, tel que dans le cas de pièces ayant subi un écrouissage, il est possible d'observer une élongation des grains caractérisant leur structure cristallographique ce qui induit une propriété d'anisotropie au système. Or, il a été prouvé que la frontière entre deux grains représente une barrière thermique. Cette caractéristique pose alors la question de l'impact de la microstructure sur le phénomène de conduction thermique. Ainsi ce projet développe un modèle multi-échelle innovant qui tient compte de l'orientation de la microstructure propre aux matériaux métalliques. Plus précisément, l'orientation granulaire, l'orientation atomique et la variabilité de la résistance thermique aux frontières en fonction des différences d'orientation atomique de part et d'autres de la barrière, ont été mises en place. Il a fallu alors tester et implémenter différentes méthodes numériques pour faire face aux caractères non-linéaire et anisotrope de notre modèle de diffusion. Ainsi, nous mettons en exergue les variations que peut subir le champs thermique lors d'un processus de conduction en fonction des différents contextes microstructuraux. C'est à travers des campagnes numériques, se basant sur des approches par différences finies, que nous mettons en évidence l'impact concret de la microstructure sur ce phénomène. De plus, les observations numériques ont montré que l'orientation granulaire est le paramètre qui domine l'impact de la microstructure. Enfin une campagne expérimentale est menée pour étayer les observations numériques. Elle présente un protocole solide pour mesurer l'impact de l'orientation granulaire sur la conductivité d'un matériau.

Mots-clés: Conduction thermique, microstructure, orientation, anisotropie, différences finies

Modeling and simulation of the impact of the microscopic structure's orientation in a thermal conduction process on a metallic material

Emile-Marie BERTHOUMIEU

ABSTRACT

The phenomenon of thermal conduction is one of the most important physical phenomena in the aerospace industry, both during the lifetime of a carrier part and during its manufacturing/treatment process. Mostly, this phenomenon is modeled via an isotropic diffusion equation. However, in some particular contexts, such as in the case of parts having undergone a work hardening, it is possible to observe an elongation of the grains characterizing their crystallographic structure which induces a property of anisotropy to the system. It has been proven that the boundary between two grains represents a thermal barrier. This characteristic raises the question of the impact of the microstructure on the thermal conduction phenomenon. This project develops an innovative multi-scale model that takes into account the orientation of the microstructure specific to metallic materials. More precisely, the granular orientation, the atomic orientation and the variability of the thermal resistance at the boundaries according to the differences of atomic orientation on both sides of the barrier, were implemented. It was then necessary to test and implement different numerical methods to cope with the nonlinear and anisotropic characters of our diffusion model. Thus, we highlight the variations that the thermal field can undergo during a conduction process depending on the different microstructural contexts. It is through numerical campaigns, based on finite difference approaches, that we highlight the concrete impact of the microstructure on this phenomenon. Moreover, numerical observations have shown that the granular orientation is the parameter that dominates the impact of the microstructure. Finally, an experimental campaign is conducted to support the numerical observations. It presents a robust protocol to measure the impact of the granular orientation on the conductivity of a material.

Keywords: Thermal conduction, microstructure, orientation, anisotropy, finite differences

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 MODÈLE ANISOTROPE DE LA CONDUCTION THERMIQUE POUR LES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES ALUMINIUM	9
1.1 Modèle générique de la conduction thermique	9
1.2 Vers un modèle micro-structuré pour la conduction	12
1.2.1 Modélisation de l'orientation des grains	13
1.2.2 Modélisation de l'orientation atomique	15
1.2.3 Modélisation des barrières thermiques : les joints de grain	16
1.2.4 Caractérisation des dernières variables	18
1.2.5 Équation finale	19
1.3 Commentaires sur le modèle multi-échelle défini	20
1.4 Conclusion	21
CHAPITRE 2 MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR L'ÉQUATION ANISOTROPE DE LA CONDUCTION THERMIQUE POUR LES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES	23
2.1 Choix du type d'approches	23
2.2 Mise en place des éléments classiques : maillage, méthode temporelle et conditions limites et initiales	25
2.3 Schéma symétrique en différence finie	26
2.3.1 Estimation des composantes du flux thermiques	27
2.3.2 Estimation de la divergence du flux thermique au point d'intérêt (i,j)	28
2.4 Schéma du second ordre en différence finie	29
2.4.1 Méthode d'Euler explicite alignée	30
2.4.2 Méthode d'Euler explicite alignée et interpolée	31
2.5 Étude de la précision des méthodes présentées	32
2.5.1 CFL de la méthode 1	33
2.5.2 CFL de la méthode 2	36
2.5.3 CFL de la méthode 3	41
2.6 Conclusion	41
CHAPITRE 3 MISE EN PLACE DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE ET DISCUSSION DES RÉSULTATS	43
3.1 Schémas isotrope et anisotrope de diffusion théoriques	43
3.1.1 Contexte isotrope	44
3.1.2 Contexte anisotrope	45
3.2 Étude de l'impact des caractéristiques structurales sur la conduction thermique pour les matériaux métalliques	47
3.3 Étude approfondie sur l'impact de l'orientation granulaire	50

3.4	Commentaires sur le programme développé pour le projet	54
3.5	Conclusion	56
CHAPITRE 4 CAMPAGNE EXPÉRIMENTALE		59
4.1	Présentation des matériaux et instruments utilisés	61
4.1.1	Matériaux	61
4.1.2	Instruments	61
4.2	Premier traitement sur la plaque d'aluminium 2024	63
4.3	Mesure de la taille des grains	64
4.3.1	Principes	64
4.3.2	Résultats et discussions	66
4.4	Mesure de la variation de la conductivité thermique en fonction de l'orientation granulaire	68
4.4.1	Pré-traitement des échantillons	68
4.4.2	Principes de mesure de la conductivité	69
4.4.3	Résultats et discussions	71
4.4.4	Nouvel échantillon	73
4.5	Conclusion	73
CONCLUSION		75
RECOMMANDATIONS		79
ANNEXE I INFORMATIONS SUPPLÉMENTAIRES SUR LE CHAPITRE 4		83
LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES		95

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 0.1	Propriétés physiques de différents métaux présents dans les domaines de l'aérospatiale et de l'aéronautique 5
Tableau 4.1	Tailles des grains selon la norme ASTM E112-12 en fonction de l'orientation de découpe où n représente le nombre granulométrique ASTM sur une échelle allant de 1, peu de grains, à 10, grand nombre de grains 67
Tableau 4.2	Tableau répertoriant les variables d'entrée pour la mesure de conductivité thermique et la conductivité finale des échantillons d'aluminium en fonction de l'orientation de découpe 72

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1	Représentation du repère globale et du repère propre au flux de chaleur 11
Figure 1.2	Microstructure du matériau avec les notions (A) de grains et de limites de grains ainsi que d'orientation (B) 12
Figure 1.3	Représentation du chemin parcouru pour traverser le même nombre de grains selon l'orientation (lignes vertes) 13
Figure 1.4	Représentation globale de l'orientation intra grain 15
Figure 1.5	Représentation du joint de grain, de la désorientation et du changement de densité entre le média 1 et 2 17
Figure 1.6	Représentation de $\alpha_{1 \rightarrow 2}$ sur l'intervalle $[0; \pi/4]^2$ 18
Figure 2.1	Schémas des conditions initiales (en haut) et limites (en bas) 26
Figure 2.2	Évaluation du flux thermique aux coordonnées $(i + 1/2, j + 1/2)$ 27
Figure 2.3	Évaluation de la divergence du flux thermique au point d'intérêt (i, j) 28
Figure 2.4	Schéma symétrique, la température T est définie par les indices entiers et le tenseur de diffusion par les demi-indices (points rouges) 28
Figure 2.5	Schéma représentant les points d'interpolation <i>up, down, left, right</i> 31
Figure 2.6	Schéma de l'équation (2.7) 34
Figure 2.7	Position de (i, j) pour $k = 1$ 35
Figure 2.8	Position de (i, j) pour $k = 2$ 35
Figure 2.9	Position de (i, j) pour $k = 3$ 35
Figure 2.10	Position de (i, j) pour $k = 4$ 36
Figure 2.11	Fonction $(x^2y^2 - 8(x^2 + y^2))$ constamment négative où $(x, y) \in [0, 1]^2$ 40
Figure 3.1	Courbe δT en fonction du temps pour le cas de la diffusion isotrope 45

Figure 3.2	Différence de température δT en fonction du temps sur 2s pour des cas anisotropes avec un ratio de 10 à gauche et 100 à droite	46
Figure 3.3	Différences de température δT , en fonction du temps sur 1s, entre un cas anisotrope mono-orienté, de diffusivité constante, et un cas où, à gauche, les orientations granulaire et atomique suivent une loi uniforme et où, à droite, seule l'orientation atomique suit une loi uniforme, l'orientation granulaire étant mono-orienté	48
Figure 3.4	Schéma d'un écrouissage montrant l'évolution de la forme des grains avant et après écrouissage	50
Figure 3.5	Schéma de la ligne d'observation	51
Figure 3.6	Divergence numériques entre le modèle de référence isotrope et le modèle de microstructure anisotrope sur 2.5s le long d'une ligne d'observation selon trois cartes d'orientation granulaires (en orange une carte mono-orienté à $0\ rad$, en vert une carte mono-orienté à $\pi/2\ rad$ et en violet une carte où l'orientation suit une loi uniforme dans l'intervalle $[0; \pi/2]$). Les graphiques a) et b) montrent respectivement les divergences à l'état initial et final. Le graphique c) met en exergue l'extremum que peut atteindre les différences entre modèles	52
Figure 4.1	Photo du microscope optique LEICA-DM-LM tirée de Spachoptics (2004)	62
Figure 4.2	Photo du montage des disques de Lee	62
Figure 4.3	schéma d'un échantillon type	63
Figure 4.4	Schéma des grains suivant l'orientation de découpe	63
Figure 4.5	Illustration du processus de mesure d'aire de grain sur la surface d'un échantillon après capture par microscope (photo A à gauche). La caractérisation de l'aire est orchestrée par le logiciel ImageJ (photo B à droite)	66
Figure 4.6	Schéma de l'échantillon final	68
Figure 4.7	Photos de l'évolution de l'échantillon	69

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

1D / 2D / 3D	Une, deux ou trois dimension(s)
ASTM	American Society for Testing and Materials
ATOM	Logiciel d'édition multiplateforme
CFL	Courant-Friedrich-Levy
EEA	Euler Explicit Aligned
EEI	Euler Explicit Interpolated
EES	Euler Explicit Symmetric
ENSEIRB-MATMECA	L'école nationale supérieure d'électronique, informatique, télécommunications, mathématique et mécanique de Bordeaux
ÉTS	École de technologie supérieure
FORTTRAN	(mathematical FORMula TRANslating system) Langage de programmation
IR	détecteur infrarouge
LAMSI	Laboratoire sur les alliages à mémoire et systèmes intelligents
LFA	Technique non-destructive du flash laser
LPME	Libre parcours moyen électronique
MATLAB	Langage de script émulé
UBUNTU	Système d'exploitation

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

a	Première lettre de l'alphabet [m]
A	Aire d'un grain [mm^2]
a_{M_k}	Condition CFL de la méthode numérique k
α	coefficient empirique
$\alpha_{1 \rightarrow 2}$	Probabilité de transmission
\vec{b}	Vecteur unitaire directionnel du flux thermique
b_1	Composante du vecteur unitaire directionnel du flux thermique selon \vec{x}
b_2	Composante du vecteur unitaire directionnel du flux thermique selon \vec{y}
β	Angle définissant la rotation entre le repère (\vec{x}, \vec{y}) globale et (\vec{s}, \vec{n}) du flux thermique [rad]
C	Chaleur spécifique du disque métallique de LEE [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
C_p	Chaleur spécifique [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
C_e	Chaleur spécifique électronique [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
C_k	Coefficient de la fonction d'interpolation bi-dimensionnelle d'ordre deux ($k \in \{1, 9\}$)
$\bar{\bar{D}}$	Tenseur de diffusion [$m^2.s^{-1}$]
D_{\parallel}	Diffusivité thermique selon \vec{s} [$m^2.s^{-1}$]
D_{\perp}	Diffusivité thermique selon \vec{n} [$m^2.s^{-1}$]
D_0	Diffusivité thermique d'un monocristal [$m^2.s^{-1}$]
d	Taille d'un grain [m]
d_{\parallel}	Taille d'un grain selon \vec{s} [m]
d_{\perp}	Taille d'un grain selon \vec{n} [m]
d_{\parallel}^0	Taille d'un grain selon \vec{x} [m]
d_{\perp}^0	Taille d'un grain selon \vec{y} [m]

$\Delta\theta$	Différence d'orientation atomique de part et d'autre du joint de grain [<i>rad</i>]
Δ	Pas d'espace définissant le maillage spatiale [<i>m</i>]
Δ^*	Sous-pas d'espace définissant le sous-maillage spatiale [<i>m</i>]
Δ_t	Pas de temps définissant le maillage temporelle [<i>s</i>]
<i>e</i>	Épaisseur de l'échantillon [<i>m</i>]
ε_F	Énergie de Fermi [<i>eV</i>]
<i>G</i>	Taille du grain selon la norme ASTM E112-12
<i>H</i>	Taux de transfert de chaleur à l'état stationnaire [<i>W</i>]
<i>h</i>	Hauteur du disque métallique de LEE [<i>m</i>]
<i>i</i>	Index de maillage selon \vec{x}
<i>j</i>	Index de maillage selon \vec{y}
κ_{alu}	Conductivité thermique de l'aluminium [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
κ_{epox}	Conductivité thermique de l'époxy [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
κ_{\parallel}	Conductivité thermique selon \vec{s} [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
κ_{\perp}	Conductivité thermique selon \vec{n} [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
κ_{sample}	Conductivité thermique de l'échantillon [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
κ_0	Conductivité thermique d'un monocristal [<i>W.m⁻¹.K⁻¹</i>]
λ_0	Libre parcours moyen électronique d'un monocristal [<i>m</i>]
<i>M</i>	Masse du disque métallique de LEE [<i>kg</i>]
\vec{n}	Seconde direction de l'espace dans le repère orienté selon \vec{q}
N_A	Grains par unité Surface [<i>No./mm²</i>]
<i>n</i>	Index de maillage temporelle
ρ	Masse volumique [<i>kg.m⁻³</i>]
\vec{q}	Flux thermique [<i>W.m²</i>]
<i>Q</i>	Chaleur rayonnée par seconde par partie exposé de l'échantillon [<i>W</i>]

R_K	Résistance de Kapitza ou Résistance thermique aux joints de grains [$m^2.K.W^{-1}$]
r	Rayon du disque métallique de LEE [m]
\vec{s}	Première direction de l'espace dans le repère orienté selon \vec{q}
S_{alu}	Surface de la section transversale de l'aluminium [m^2]
S_{epox}	Surface de la section transversale de l'époxy [m^2]
S_{sample}	Surface de la section transversale de l'échantillon [m^2]
ς	Ratio d'anisotropie
T	Température [K]
T_b	Température de bords [K]
T_0	Température au temps initiale [K]
t	Temps [s]
τ_0	Temps de relaxation d'un monocristal [s]
τ_{elec}	Temps de relaxation électron-électron d'un monocristal [s]
τ_{matt}	Temps de relaxation électron-réseau d'un monocristal [s]
θ_g	Orientation granulaire [rad]
θ_{intra}	Orientation de l'arrangement atomique (parfois réduit à orientation atomique) [rad]
v	Fonction d'interpolation bi-dimensionnelle d'ordre deux
v_F	Vélocité de Fermi [$m^2.s^{-1}$]
\vec{x}	Première direction de l'espace dans le repère globale
\vec{y}	Seconde direction de l'espace dans le repère globale
Z	Produit entre ρ et v_F [$kg.s^{-1}.m^{-1}$]
$\zeta_{1 \rightarrow 2}$	Coefficient de transmission

INTRODUCTION

Le monde de l'aérospatial ou de l'aéronautique a toujours cherché à repousser les limites des connaissances scientifiques et des innovations technologiques pour concevoir de nouveaux produits de plus en plus performants. Plusieurs axes de travail sont possibles en fonction des capacités de prise en compte des phénomènes physiques induits par l'interaction avec les milieux dans lesquels le lanceur ou l'aéronef va évoluer ou des connaissances propres aux matériaux utilisés. En effet, depuis une centaine d'année, l'historique concernant l'évolution des matériaux utilisés est très riche. En outre, les problèmes de fiabilité, de vieillissement, d'empreinte écologique, de coûts de maintenance, de recyclage sont en grande partie adressés par le développement et l'utilisation de matériaux aux propriétés de plus en plus spécifiques comme les matériaux d'alliages d'aluminium ou les composites. De l'âge de Bronze jusqu'aux semiconducteurs modernes, les technologies développées par l'Homme ont été limitées par les propriétés des matériaux à sa disposition. En conséquence, il a toujours cherché à améliorer les propriétés des matériaux à sa disposition en fonction de ses besoins technologiques. A titre d'exemple, lors des différentes phases de service (décollage, vol, atterrissage), les structures des aéronefs sont soumises à des contextes environnementaux très agressifs (foudre, humidité, variations thermiques, flammes, réaction chimique, etc...) sur les plans mécanique, électrique, chimique et/ou thermique. Il est donc décisif de disposer d'une grande connaissance des propriétés physico-chimiques des matériaux utilisés dans la conception des structures.

Dans cette optique, les méthodes de fabrication ainsi que les traitements appliqués aux matériaux se doivent d'être toujours plus performants afin d'accroître leurs longévités, leurs fiabilités et limiter leurs empreintes carbone liées au développement et à l'utilisation de l'aéronef. Pour atteindre de tels niveaux de performances, il est donc primordial de comprendre le plus précisément possible les conséquences du paramétrage des procédés de fabrication et/ou de traitements sur l'évolution des propriétés intrinsèques des matériaux ainsi que les phénomènes physiques auxquels peut être confronté le matériau tout au long de sa vie.

Concernant les propriétés spécifiques, certaines peuvent être plus ou moins importantes. Nous pouvons citer par exemple la conductivité électrique qui est une propriété centrale pour les matériaux utilisés dans la structure extérieure des avions. Le matériau doit avoir la capacité de conduire une charge électrique en cas de coup de foudre (cf. les travaux de Golding (2005)). De même, la dilatation thermique est également une propriété importante des matériaux à haute variation de température. Des matériaux à faible coefficient de dilatation thermique sont souvent nécessaires pour éviter des dégradations mécaniques excessifs pendant le chauffage et le refroidissement. Enfin, la conductivité thermique est une autre propriété pour les matériaux utilisés dans les applications à haute température telles que les écrans thermiques et les composants moteurs. Les matériaux de protection thermique nécessitent une faible conductivité thermique pour protéger la structure de la cellule d'un échauffement excessif par exemple.

Le phénomène de conduction thermique

Pour des raisons environnementales et économiques, le développement des aéronefs ou des lanceurs passe par une recherche de matériaux spécifiques à ces applications. Aujourd'hui, la tendance est de mettre en avant les propriétés multi-physiques des matériaux utilisés allant des alliages métalliques aux matériaux composites. Il s'agit par exemple d'intégrer une couche, thermiquement conductrice, au sein d'un matériau composite léger, non-intrusive et non-destructive pour améliorer le comportement thermique de ce dernier, tout en s'intégrant parfaitement dans un processus de fabrication économe.

Ainsi, l'industrie spatiale et aéronautique est confrontée à des problématiques thermiques comme le dégivrage des porteurs au sol ou des fuselages en vol. A l'opposé, des moteurs plus performants sont synonymes de moteurs montant toujours plus haut en température. Ainsi, la protection des pièces chaudes des moteurs d'avion est la condition *sine qua non* de leur fonctionnement durable. Sur certaines pièces du réacteur par exemple, il est nécessaire d'utiliser des alliages de faibles conductivités thermiques, en ayant recours à des alliages de titane (cf. tab. 0.1). L'enjeu est alors

de sélectionner les bons matériaux face aux différentes problématiques, tels que l'alliage de titane pour les milieux à haute température et les matériaux composites pour le dégivrage.

La compréhension des propriétés thermiques des matériaux permet donc de connaître les transferts thermiques dans les systèmes complexes et de prédire leurs comportements en vue d'une meilleure maîtrise des processus de fabrication par exemple. Parmi les trois types d'échanges thermiques connus, à savoir la conduction, la convection et le rayonnement, le phénomène de conduction thermique est celui qui est le plus étudié dans le cadre des procédés de fabrication. La conductivité thermique se produit par agitation moléculaire et par contact, et n'entraîne pas le mouvement de masse du solide lui-même (cf. les travaux de Jannot & Moyne (2012)).

La chaleur se déplace le long d'un gradient de température, d'une zone de température élevée et d'énergie moléculaire élevée à une zone de température inférieure et d'énergie moléculaire inférieure. Ce transfert se poursuivra jusqu'à ce que l'équilibre thermique soit atteint. La vitesse à laquelle la chaleur est transférée dépend de l'amplitude du gradient de température et des caractéristiques thermiques spécifiques du matériau. En pratique, l'efficacité thermique des matériaux dépend de leur conductivité thermique et de leur capacité à maintenir leurs caractéristiques thermiques sur une période de temps.

Dans son article Cormier & Guedou (2015), J-Y. Guedou indique que certaines pièces du moteur aéronautiques peuvent atteindre 1 100°C, de façon hétérogène en raison des inerties thermiques. Il apparaît que les gradients thermiques ainsi créés sont sources de contraintes thermiques, qui s'ajoutent algébriquement aux contraintes mécaniques. Un tel exemple montre bien que la maîtrise du phénomène de conduction thermique est primordiale que ce soit dans le contexte de la fabrication ou du suivi de l'évolution du matériau durant sa vie.

Aluminium et conductivité thermique

L'ensemble des informations de ce paragraphe et des valeurs du tableau 0.1 proviennent des sites suivants : AluminiumFrance (1994), AluQuébec (2017) et Matweb (2011).

La demande pour des produits à base d'aluminium est en croissance continue dans les domaines de l'aéronautique et du spatiale. A ce jour l'aluminium et ses alliages composent jusqu'à 80% du poids à vide d'un aéronef et peuvent former jusqu'à 90% des pièces formant les véhicules spatiaux. L'utilisation d'alliages d'aluminium réduit considérablement le poids de l'avion via leur densité spécifique faible (cf. tab.0.1), la densité spécifique étant de 2,7 g/cm³, soit environ un tiers de celle de l'acier (7-8 g/cm³) ou du cuivre (8,96 g/cm³), tout en ayant une résistance élevée comme l'acier ou le cuivre. En outre, ils présentent des avantages tant sur les plans mécanique, thermique et électrique que sur des aspects en lien avec les phénomènes de corrosion ou encore en termes d'endurance face aux phénomènes de fatigue.

La série 2xxx, alliages cuivre-aluminium et la série 7xxx, alliages aluminium-zinc sont les deux principales séries utilisées dans la fabrication de composants. Par exemple, l'alliage 7050 est un alliage d'aluminium de qualité supérieure qui présente une résistance à la corrosion et une durabilité bien supérieures à celles du 7075. Le 7050 conserve ses propriétés de résistance dans des sections plus larges, et a une meilleure résistance à la corrosion et aux fractures. Ces caractéristiques font de l'aluminium 7050 un choix supérieur pour les applications aérospatiales. De leurs côtés, les alliages de la série 2xxx sont utilisés dans la fabrication de pièces de l'aile inférieure et de la structure du fuselage de l'avion. Par exemple, l'aluminium 2024 peut-être utilisé lorsque des ratios de résistances élevées sont requis par rapport au poids. L'alliage d'aluminium 2024 T4 présente une excellente résistance à la fatigue, mais une faible soudabilité.

Tableau 0.1 Propriétés physiques de différents métaux présents dans les domaines de l'aérospatiale et de l'aéronautique

Matériaux	Conductivité thermique [$W.m^{-1}.K^{-1}$]	densité [$g.cm^{-3}$]
Aluminium 2024 T4	121	2.79
Aluminium 7050 T4	140	2.6-2.8
Titane Ti6Al4V	7.2	4.5
Acier	50	7-8
Cuivre	386	8.6

Travail réalisé

Face à une demande croissante, l'utilisation de l'aluminium est encore limitée dans son essor en raison de la difficulté de mise en forme. Par exemple, le travail par déformation plastique (forgeage, matriçage, estampage) est effectué entre 450 et 380 °C. Pendant le processus de formage, le transfert de chaleur interfacial entre la pièce et la matrice et en interne a une grande influence sur les variations de contrainte-déformation et l'évolution des produits formés et la durée de vie des produits. Dans un tel contexte, il est donc important de pouvoir comprendre le plus finement possible les paramètres qui régissent ces transferts de chaleur et qui conditionnent le phénomène de conduction thermique étant dans le contexte des métaux.

La conduction thermique est un phénomène à l'échelle macroscopique qui décrit un transfert thermique provoqué par un gradient spatio-temporel de température au sein d'un même milieu ou entre des milieux en contact. De proche en proche, les atomes cèdent une partie de leur énergie cinétique. La modélisation mathématique d'un tel phénomène, appelé loi de Fourier (cf. les travaux de baron Fourier (1822)), est bien connue depuis 1822 postulant que la densité de chaleur est proportionnelle au gradient de température. Cette dernière associée au bilan énergétique conduit à l'équation générale de la conduction de la chaleur dans un corps.

Cependant, bon nombre d'entreprises considèrent le phénomène de conduction thermique, induit par les procédés de fabrications/traitements ou rythmant la vie des matériaux utilisés par les constructeurs, comme un phénomène purement isotrope. C'est-à-dire faire l'hypothèse d'une propagation de la chaleur homogène dans toutes les directions spatiales revient à dire que le coefficient de conductivité thermique est le même suivant toutes les directions. Cependant, une telle hypothèse était-elle toujours valide sachant par exemple que les alliages, comme ceux d'aluminium, comportent des particularités sur le plan de leurs microstructures ce qui leur confèrent une géométrie de grain non-uniforme selon l'orientation spatiale. Pour rappel, un grain est pour un matériau solide représente un domaine de matière ayant la même structure qu'un monocristal. De même, on appelle joint de grains l'interface entre deux cristaux de même structure cristalline et de même composition, mais d'orientation différente. Il est reconnu par la communauté scientifique grâce aux travaux de Swartz & Pohl (1989) que les joints de grains représentent une barrière thermique. Ainsi l'hypothèse d'un modèle isotrope peut paraître incompatible avec des géométries de grains hétérogènes.

Ainsi, la question centrale à l'origine de notre projet et concernant le phénomène de conduction thermique dans le cas des matériaux métalliques est :

Le phénomène de conduction dépend-il de manière significative de grandeurs microscopiques propres au matériau utilisé et notamment est-il intrinsèquement décrit par un schéma anisotrope lié à la notion d'orientation de la structure microscopique ?

Pour répondre à cette question, notre manuscrit est décomposé comme suit.

Le **chapitre 2** est consacré à la proposition d'une nouvelle définition de l'équation aux dérivées partielles propres à la conduction thermique. Nous partons du postulat que les propriétés thermiques macroscopiques d'un matériau sont fortement dépendantes de celles microscopiques. Plus spécifiques, nous nous focalisons sur les notions d'orientations en lien avec la géométrie à l'échelle microscopique. Certains matériaux auront des valeurs de conductivité thermique

différentes, selon la direction du déplacement de la chaleur (ce sont des matériaux dits anisotropes). Dans ces cas, la chaleur se déplace plus facilement dans une certaine direction en raison de l'organisation spatiale de la microstructure du matériau. Après un bref état de l'art, nous développons notre propre modèle fondé sur les notions d'orientation des grains et d'orientation de la maille volumique impliquant les limites de grain. Sur le plan microscopique, les limites (frontières) de grains représentent autant de barrières thermiques qu'il est important de considérer.

Aujourd'hui, la compréhension d'un phénomène physique dans sa totalité est un problème omniprésent en science qui ne se limite plus à des études expérimentales suivies de déductions empiriques. Depuis quelques décennies, maintenant, la simulation numérique a su faire ses preuves et est aujourd'hui considérée comme un pilier de la réflexion scientifique. C'est justement le cas pour un processus de prototypage virtuel permettant de valider la faisabilité des pièces ou la cohérence du processus de fabrication notamment dans le domaine de l'aérospatial et de l'aéronautique (cf. les travaux de Leali, Vergnano, Pini, Pellicciari & Berselli (2016), Lee, Cheung & Li (2001) et Angster, Gowda & Jayaram (1996)). Grâce à la simulation des procédés, il est possible de comprendre l'incidence de chaque paramètre sur la qualité du résultat et permet ainsi de valider une conception optimale. Ainsi, la thématique de la simulation numérique se retrouve au coeur du **chapitre 3**. Nous abordons le problème de la simulation dans le contexte de la conduction thermique anisotrope. Pour ce faire, nous faisons un bref état de l'art des approches existantes et nous orientons notre schéma d'implémentation sur de potentielles approches en fonction du caractère anisotrope plus ou moins marqué que notre modèle peut exiger. Après la validation théorique de nos méthodes, nous considérons des variantes impliquant la variable d'orientation comme une variable aléatoire afin de prendre en compte de manière plus réaliste l'existence même de la notion d'orientation pour des grains à l'échelle microscopique. Une telle prise en compte engendre évidemment des problèmes de stabilité dans la simulation ce qui nous amène à considérer des schémas numériques plus complexes.

Bien que l'efficacité de l'étude par simulation en vue d'analyser tous les tenants et aboutissants d'un modèle ne soit plus à prouver, le modèle numérique ne peut pas être interprété sans une confrontation expérimentale, indispensable pour garantir d'éventuelles conclusions. En effet, malgré le fait que la simulation puisse présenter la pertinence d'un modèle via des résultats numériques d'une cohérence mathématique forte, une ou plusieurs campagnes expérimentales sont indispensables à la mise en place d'un modèle physique innovant. Le **chapitre 4** propose donc une campagne expérimentale ayant pour but de répondre à une problématique citée précédemment. En commençant par la présentation du protocole des campagnes expérimentales mises en place afin d'assurer la reproductibilité, ce chapitre discute des résultats expérimentaux obtenus en essayant, quand c'est possible, de les rapprocher du modèle du **chapitre 2**, ainsi que des résultats numériques du **chapitre 3**.

Enfin, le manuscrit se termine sur une conclusion synthétisant l'ensemble des observations afin d'apporter une réponse à la problématique principale du sujet. De plus, une partie importante est dédiée aux perspectives de ce travail préliminaire qui après avoir construit des bases solides d'une réflexion nouvelle, propose différents points d'attaques en vue de progresser dans ce domaine tant par de nouveaux aspects pour étayer le modèle que de nouvelles pistes de réflexions, afin de construire un modèle encore plus fin face à la réalité ou encore plus général en terme de matériaux (type de matériau/type de microstructure).

CHAPITRE 1

MODÈLE ANISOTROPE DE LA CONDUCTION THERMIQUE POUR LES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES ALUMINIUM

L'équation de la conduction thermique est impliquée dans de nombreuses applications en sciences physiques et dans le domaine de l'ingénierie car elle décrit les variations de température (ou de distribution de chaleur) dans une région donnée pendant un certain temps. Il est possible notamment de lire le rapport de Bao, Chen, Gu & Cao (2018) qui témoignent de l'importance de ce phénomène en microélectronique et matériaux thermoélectriques omniprésents dans l'aérospatiale. Comme vu précédemment, formaliser les échanges thermiques ont un intérêt fort dans le domaine des matériaux notamment dans le contexte de l'aéronautique et de l'aérospatiale. Disposer d'un modèle de propagation piloté par les paramètres propres au matériau est un objectif d'importance. Notre travail vise justement ce type de développement et ambitionne d'identifier les paramètres d'importance dans ce processus de transfert de chaleur et implicitement durant les processus de fabrication. Après avoir rappelé la définition de la conduction thermique notamment sous le prisme de l'anisotropie, nous proposons un nouveau développement fondé sur un formalisme multi-échelle intégrant des paramètres micro-structuraux propres au matériau.

1.1 Modèle générique de la conduction thermique

Le processus de conduction thermique dépend de quatre facteurs fondamentaux : le gradient de température, la section transversale du matériau, la longueur du trajet et les propriétés du matériau. Un gradient de température est une grandeur physique qui décrit dans quelle direction et à quelle vitesse la température change à un endroit spécifique. La chaleur va toujours de la source la plus chaude à la plus froide. Ce transfert se poursuit jusqu'à ce que la différence de température diminue et qu'un état connu sous le nom d'équilibre thermique se produise. Sur un plan général, sans énergie produite au sein même du matériau, la conduction thermique est régie par l'équation de transport de la température donnée comme suit, appelé loi de Fourier (cf. les

travaux de baron Fourier (1822)) :

$$\rho C_p \partial_t T + \text{div}(\vec{q}) = 0 \quad (1.1)$$

où ρ est la masse volumique du matériau, C_p est la capacité spécifique à pression constante, T est la température évoluant en temps et en espace, $\vec{q} = \bar{\bar{D}}(T) \vec{\nabla} T$ est le flux de chaleur et $\bar{\bar{D}}$ est la matrice de diffusivité thermique éventuellement dépendante de T .

Sur un plan purement mathématique, la conduction thermique est souvent référencée comme l'équation de diffusion qui est le cas parabolique de l'équation générale aux dérivées partielles du second ordre. En effet, l'équation de diffusion général peut représenter un grand nombre de phénomène physique. Il est possible de citer les travaux de Ferrence (2001) dans le médical ou encore de Kim & Galliers (2004) autour des systèmes internet. Néanmoins, ce sont les travaux de baron Fourier (1822) qui ont prouvé le lien entre conductivité thermique et phénomène de diffusion. La matrice de conductivité est appelée tenseur de diffusion et référence un processus de diffusion anisotrope. Dans le cadre d'une grille cartésienne rectangulaire, le vecteur unitaire directionnel représente le non-alignement du flux par rapport à la grille. En deux dimensions, le tenseur de diffusion est donné par la forme suivante :

1. Vecteur unitaire directionnel du flux thermique $\vec{b} = (b_1, b_2)^T = (\cos(\beta), \sin(\beta))^T$;
2. Matrice de rotation $R = \begin{pmatrix} b_1 & -b_2 \\ b_2 & b_1 \end{pmatrix}$;
3. Tenseur de diffusion $\bar{\bar{D}} = R \Sigma R^T$ avec $\Sigma = \text{diag}(D_{\parallel}, D_{\perp})$;

$$\bar{\bar{D}} = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{xy} & D_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{\parallel} \cos^2(\beta) + D_{\perp} \sin^2(\beta) & \frac{1}{2}(D_{\parallel} - D_{\perp}) \sin(2\beta) \\ \frac{1}{2}(D_{\parallel} - D_{\perp}) \sin(2\beta) & D_{\parallel} \sin^2(\beta) + D_{\perp} \cos^2(\beta) \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

où β est l'angle entre la grille cartésienne et le vecteur unitaire directionnel. Les composantes D_{\parallel} et D_{\perp} sont respectivement la composante perpendiculaire et parallèle de la diffusion selon la direction du vecteur unitaire \vec{b} . Le tenseur de diffusion est, par définition, défini positif $x^t \bar{\bar{D}} x > 0$ pour un vecteur x non-nul. Le taux d'anisotropie est donné par : $\varsigma = \frac{D_{\parallel}}{D_{\perp}}$.

Considérant le vecteur directionnel \vec{b} , nous définissons les systèmes de coordonnées cartésiennes (\vec{x}, \vec{y}) aligné sur le système global étudié et (\vec{s}, \vec{n}) aligné sur le flux de chaleur (cf. fig.1.1).

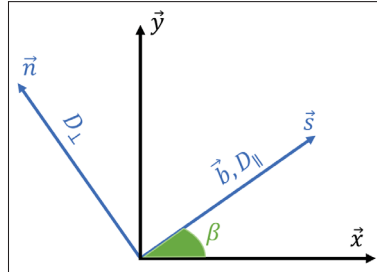


Figure 1.1 Représentation du repère globale et du repère propre au flux de chaleur

1.2 Vers un modèle micro-structuré pour la conduction

Récemment, dans le contexte de la modélisation physique macroscopique de nombreux travaux proposent une approche multi-échelle en connectant des caractéristiques micro-nanoscopiques à l'intérieur d'un modèle dédié au système macroscopique. Dans le cas des matériaux, par microstructure, nous entendons la prise en compte de différentes caractéristiques de la structure du métal ou l'alliage à l'échelle nanométrique comme la figure 1.2 le schématise. Il s'agit :

1. du grain, il définit une zone cristalline unique dont la taille et l'orientation résultent de la composition du matériau (alliage) et de la méthode de fabrication du matériau (par exemple, forgeage, coulage ou fabrication additive). La taille et l'orientation des grains sont directement liées aux propriétés mécaniques notamment ;
2. de la frontière entre deux grains, un « joint de grain » qui correspond à une barrière thermique et donc à une diminution de la conductivité électrique et thermique du matériau ;
3. de la micro-structure qui représente l'agencement atomique à l'intérieur d'un grain. Son orientation peut différer de l'orientation du grain dans lequel il est situé.

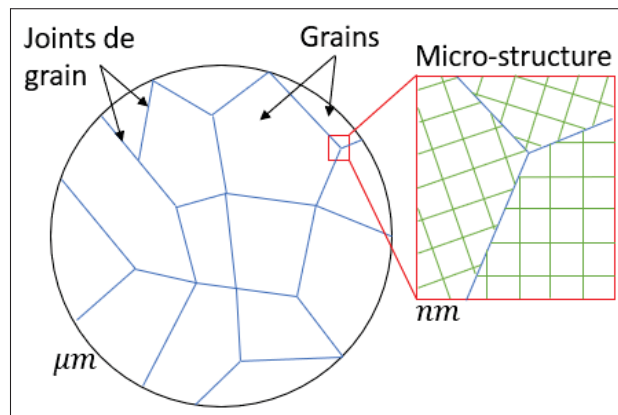


Figure 1.2 Microstructure du matériau avec les notions (A) de grains et de limites de grains ainsi que d'orientation (B)

Pour la simulation en fatigue, le défaut de structure à l'échelle nanométrique est considéré comme affectant la propagation d'une fissure à l'échelle macro (cf. les travaux de Singh, Mishra, Bhattacharya & Patil (2012)). L'orientation des grains a un impact direct sur les phénomènes

mécaniques (cf. les travaux de Quey, Driver & Dawson (2015)). Dans les travaux de Jin, Lee & Kwon (2008), les auteurs montrent dans le cas d'un modèle de conductivité l'influence du rapport entre l'épaisseur du système (caractéristique à l'échelle macro) et la taille des grains (caractéristique à l'échelle de la microstructure). Cependant, la caractérisation multi-échelle est encore confidentielle. Ce nouveau paradigme offre de réelles opportunités pour améliorer la pertinence des modèles de certains phénomènes physiques tels que la conductivité thermique.

Dans le but de répondre à la problématique, le modèle final doit tenir compte des trois caractéristiques intrinsèques au matériau : l'orientation granulaire, l'orientation de la microstructure et l'impact des joints entre grains en tant que barrière thermique.

1.2.1 Modélisation de l'orientation des grains

Un grain peut avoir une orientation et une taille variée. En le représentant schématiquement par un rectangle en deux dimensions (cf. fig.1.3), deux longueurs notées d_{\parallel} et d_{\perp} permettent de travailler implicitement sur la modélisation de l'orientation granulaire dans l'éq 1.1. A noter que le schéma a du sens vis-à-vis des domaines de l'aéronautique et du spatial, en effet, la majorité des pièces métalliques subissent un traitement d'écrouissage allongeant ainsi le grain dans le sens de l'écrouissage. Comme le montre la figure (1.3), si un certain flux de chaleur, le long de l'axe \vec{x} veut outrepasser une certaine quantité de grains, selon l'orientation, il ne parcourt pas la même distance (cf. la différence de longueur entre les segments verts a et b du schéma)

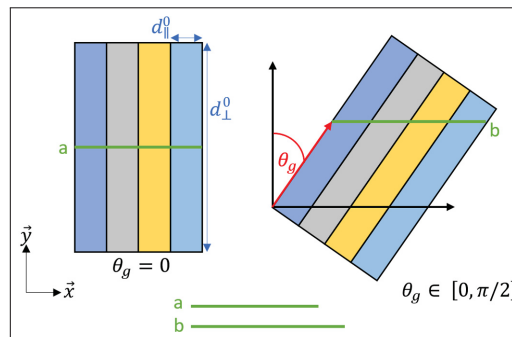


Figure 1.3 Représentation du chemin parcouru pour traverser le même nombre de grains selon l'orientation (lignes vertes)

Étant donné qu'un joint de grain est considéré comme une barrière thermique à l'intérieur du milieu, alors le transfert de température doit évoluer en fonction de l'orientation des grains. Dans l'article de Dong, Wen & Melnik (2014), ils montrent à partir d'un ouvrage de référence (rédigé par Nan & Birringer (1998)), Dong & al. présentent un modèle sur l'évolution du coefficient de conductivité κ du système afin de montrer l'importance des frontières et de la taille des grains sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \kappa_{\parallel} = \frac{\kappa_0 \left[1 + \frac{\lambda_0}{d_{\parallel}^{\alpha}} \right]}{1 + \frac{R_K \kappa_0}{d_{\parallel}} \left[1 + \frac{\lambda_0}{d_{\parallel}^{\alpha}} \right]} \\ \kappa_{\perp} = \frac{\kappa_0 \left[1 + \frac{\lambda_0}{d_{\perp}^{\alpha}} \right]}{1 + \frac{R_K \kappa_0}{d_{\perp}} \left[1 + \frac{\lambda_0}{d_{\perp}^{\alpha}} \right]} \end{array} \right. \quad (1.3)$$

où κ_0 et λ_0 sont respectivement la conductivité et le libre parcours moyen des électrons (LPME) dans un monocristal, d la taille du grain, α un coefficient empirique entre 1/2 et 3/4 et R_K la résistance dite de Kapitza à travers le joint de grain. Les différents indices qui sont définis pour la conductivité thermique κ (soient 0, \parallel , \perp) servent à différencier la conductivité selon trois cadres (soient respectivement le cadre isotrope, le cadre anisotrope dans le sens parallèle puis le cadre anisotrope dans le sens perpendiculaire où les notions de parallélisme et de perpendicularité sont définies selon le repère (\vec{s}, \vec{n}) schématisé dans la figure 1.1). Il est intéressant de noter qu'il semble y avoir un souci d'homogénéité. En effet, la division $\frac{\lambda_0}{d_{\parallel}^{\alpha}}$ devrait être sans unité mais la présence du coefficient empirique α l'en empêche. Cependant, il est important de souligner que l'affectation de la puissance α sur l'ensemble de la division, i.e. $(\frac{\lambda_0}{d_{\parallel}})^{\alpha}$, par soucis d'homogénéité n'impacte en rien les résultats futurs en lien avec notre problématique. De plus, Dong *et al.* (2014) présentent, à travers leur travaux, des résultats remarquables avec ce modèle. C'est pourquoi, la modélisation de ce mémoire se base sur le formalisme de Dong *et al.* (2014). Dès lors, la prise en compte de l'orientation granulaire passe par la définition de deux grandeurs en lien avec la taille de grain : d_{\parallel} et d_{\perp} via les relations trigonométriques suivantes :

$$\begin{cases} d_{\parallel}(\theta_g) = d_{\parallel}^0 \cos(\theta_g) + d_{\perp}^0 \sin(\theta_g) \\ d_{\perp}(\theta_g) = d_{\parallel}^0 \sin(\theta_g) + d_{\perp}^0 \cos(\theta_g) \end{cases} \quad (1.4)$$

où d_{\parallel}^0 et d_{\perp}^0 sont les dimensions du grain lorsqu'il est aligné sur le repère global (cf. schéma à gauche de la fig. (1.3)) et θ_g est l'angle définissant l'orientation du grain (cf. schéma de droite de la fig. (1.3)).

1.2.2 Modélisation de l'orientation atomique

L'agencement des atomes d'un solide peut se présenter de différentes manières liées à la nature du matériau. On peut par exemple cité les systèmes hexagonaux (Magnésium - cf. le site Maison (2008a)) ou rhomboédriques (Béryllium - cf. le site Maison (2008b)). Afin de fixer un contexte et d'être directement en lien avec les matériaux du monde de l'aéronautique et du spatial, le modèle de ce rapport considère le système cubique face centré comme étant le système de référence (cf. schéma de gauche de la fig. (1.4)). Dans ce cadre, tous les atomes sont équidistants (le long du repère (\vec{s}, \vec{n}) défini dans la figure 1.1) et s'organisent selon une variable d'orientation notée θ_{intra} caractérisant la direction de la structure par rapport au repère global (cf. schéma de droite de la fig. (1.4)).

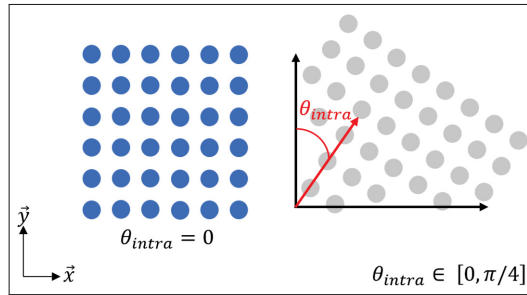


Figure 1.4 Représentation globale de l'orientation intra grain

À l'échelle macroscopique, si le système possède un point chaud, la chaleur est transférée tout autour de ce dernier, dans toutes les directions, comme la propagation d'une onde sur l'eau suite à la chute d'une goutte. Ainsi, à l'échelle microscopique, l'information thermique est

transmise d'un élément à son voisin le plus proche avant le reste de la masse. En suivant cette observation, il est légitime de considérer que le flux thermique évolue suivant l'orientation locale de la structure atomique. Or un tel vecteur directionnel a été défini plus haut sous la notation \vec{b} , il définit l'orientation atomique via la relation suivante :

$$\vec{b} = (b_1, b_2)^T = (\cos(\theta_{intra}), \sin(\theta_{intra}))^T \quad (1.5)$$

1.2.3 Modélisation des barrières thermiques : les joints de grain

La conductance thermique des interfaces métal-métal a été étudiée à plusieurs reprises (cf. les travaux de Swartz & Pohl (1989); Gundrum, Bryan C (2005); Saltonstall, Christopher B (2020)). Le point commun entre ces différents travaux tient à la définition de la résistance thermique à une interface, séparant les milieux 1 et 2, décrite comme suit :

$$\frac{1}{R_{K,1 \rightarrow 2}} = \frac{1}{4} \zeta_{1 \rightarrow 2} C_{e,1} v_{F,1} \quad (1.6)$$

où C_e est chaleur spécifique électronique, v_F est la vitesse de Fermi et $\zeta_{1 \rightarrow 2}$ est le coefficient de transmission, défini comme suit :

$$\zeta_{1 \rightarrow 2} = \frac{\rho(\varepsilon_{F,2}) v_{F,2}}{\rho(\varepsilon_{F,2}) v_{F,2} + \rho(\varepsilon_{F,1}) v_{F,1}} \quad (1.7)$$

Tout d'abord, si les supports 1 et 2 sont identiques, comme deux grains d'un même élément, il est cohérent de considérer que $\zeta_{1 \rightarrow 2}$ est égal à la valeur 0.5. Cependant, un parallèle peut être fait avec une étude de Rayleigh de 1879 Rayleigh (1879).

En effet, le scientifique s'est interrogé sur la propagation d'une onde le long d'une corde dont la densité change brusquement. Cet article fondateur révèle que, selon la brutalité de la modification, un certain pourcentage de l'onde est réfléchi. Ainsi, la désorientation (cf. fig.(1.5)), notée $\Delta\theta$,

peut-être vue comme une modification abrupte ce qui entraîne une modification du coefficient de transmission.

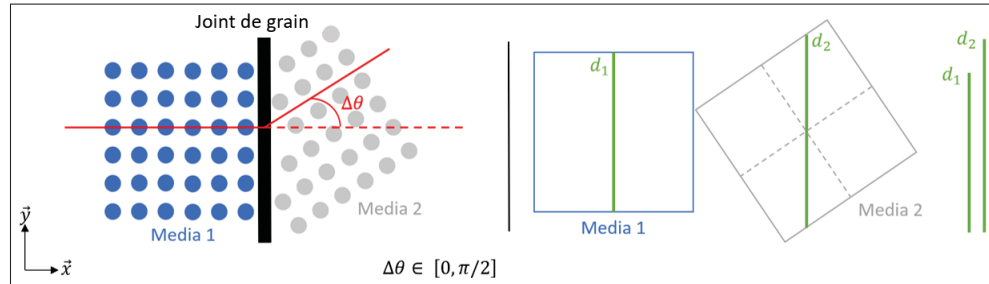


Figure 1.5 Représentation du joint de grain, de la désorientation et du changement de densité entre le média 1 et 2

En effet, la variation de la densité peut être représentée par la longueur d_1 et d_2 (voir fig.(1.5)) et par la notion de probabilité de transmission $\alpha_{1 \rightarrow 2}$ comme défini ci-dessous (cf. les travaux de Swartz & Pohl (1989)) :

$$\begin{aligned}
 \alpha_{1 \rightarrow 2} &= 4 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2} \\
 &= 4 \frac{d_1 d_2}{(d_1 + d_2)^2} \\
 &= 4 \frac{\cos(\theta_{intra,1}) \cos(\theta_{intra,2})}{(\cos(\theta_{intra,1}) + \cos(\theta_{intra,2}))^2}
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

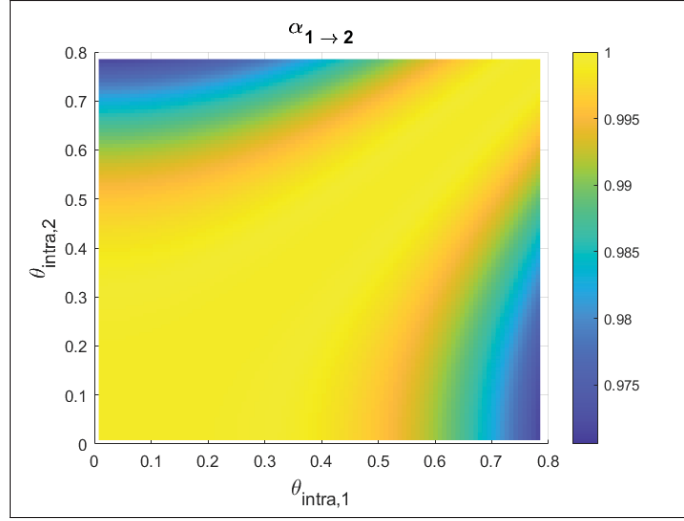


Figure 1.6 Représentation de $\alpha_{1 \rightarrow 2}$ sur l'intervalle $[0; \pi/4]^2$

où Z_i est le produit entre la densité et la vitesse de Fermi du média i et $\theta_{intra,i}$ est l'orientation atomique du média i .

Ainsi, le nouveau coefficient de transmission $\zeta_{1 \rightarrow 2}^{\Delta\theta}$ est donné par la relation suivante :

$$\zeta_{1 \rightarrow 2}^{\Delta\theta} = \alpha_{1 \rightarrow 2} \zeta_{1 \rightarrow 2} \quad (1.9)$$

Selon l'équation (1.9), le modèle complet proposé plus bas comporte trois notions d'orientation à l'échelle microscopique. Considérant ce modèle, quelques variables restent encore à définir.

1.2.4 Caractérisation des dernières variables

Parmi l'ensemble des variables qui interviennent dans le modèle de ce projet, la caractérisation du LPME reste le dernier aspect à considérer avant de pouvoir d'engager notre réflexion sur le thème de la simulation. Physiquement, cette caractéristique représente la distance moyenne que parcourt un électron (vecteur de chaleur) avant de rencontrer un obstacle (électron ou le réseau atomique) et ainsi transmettre une partie voire l'ensemble de son information thermique. Afin

de mettre en place une relation cohérente, la première étape consiste à considérer la formule connue de tous reliant la vitesse, la longueur et le temps mais, à l'échelle microscopique :

$$\lambda_0 = v_f \tau_0 \quad (1.10)$$

où τ_0 représente le temps de relaxation dans un monocristal. Pour l'étape suivante, il nous faut considérer la loi de Matthiessen (cf. les travaux de Hopkins & Duda (2006)), utilisée en considérant le système comme exempt de défaut :

$$\tau_0^{-1} = \tau_{elec}^{-1} + \tau_{latt}^{-1} \quad (1.11)$$

où τ_{elec} représente le temps de relaxation électron-électron et τ_{latt} le temps de relaxation électron-réseau. En considérant l'hypothèse que les températures des électrons et du réseau sont équivalentes, sur la base des travaux de Anisimov & Rethfeld (1997), les temps de relaxation des bons conducteurs sont définis comme suit :

$$\begin{cases} \tau_{elec}^{-1} = AT^2 & \approx 1.11.10^9 T^2 \\ \tau_{latt}^{-1} = BT & \approx 3.33.10^9 T \end{cases} \quad (1.12)$$

En concaténant les équations (1.10), (1.11) et (1.12), nous obtenons un LPME à environ $20nm$ à température ambiante, ce qui est cohérent avec les données que l'on peut trouver dans la littérature pour l'aluminium (cf. les travaux de Gall (2016)).

1.2.5 Équation finale

En rassemblant les éléments précédents et en se calquant sur un modèle de diffusion anisotrope qui a été détaillé en début de chapitre, l'équation différentielle finale prend alors la forme suivante :

$$\partial_t T - \text{div} \left[\begin{pmatrix} D_{\parallel} b_1^2 + D_{\perp} b_2^2 & (D_{\parallel} - D_{\perp}) b_1 b_2 \\ (D_{\parallel} - D_{\perp}) b_1 b_2 & D_{\parallel} b_2 + D_{\perp} b_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x T \\ \partial_y T \end{pmatrix} \right] = 0$$

avec

$$\begin{cases} D_{\parallel, \perp} = D_0 \frac{[1 + \Omega_{\parallel, \perp}]}{1 + R_K^{\Delta\theta} [1 + \Omega_{\parallel, \perp}]} \\ R_K^{\Delta\theta} = \frac{4\kappa_0}{\zeta_{1 \rightarrow 2}^{\Delta\theta} C_{e,1} v_F d_{\parallel, \perp}} \\ \Omega_{\parallel, \perp} = \frac{v_F (AT^2 + BT)^{-1}}{d_{\parallel, \perp}^{\alpha}} \\ \vec{b} = (\cos(\theta_{intra}), \sin(\theta_{intra}))^T \end{cases} \quad (1.13)$$

1.3 Commentaires sur le modèle multi-échelle défini

En considérant l'équation (1.13), nous pouvons noter que le taux d'anisotropie peut être exprimé de la manière suivante :

$$\varsigma = \frac{D_{\parallel}}{D_{\perp}} = \frac{1 + \Omega_{\parallel}}{1 + \Omega_{\perp}} \cdot \frac{1 + R_K^{\Delta\theta} [1 + \Omega_{\perp}]}{1 + R_K^{\Delta\theta} [1 + \Omega_{\parallel}]} = P1 \cdot P2 \quad (1.14)$$

où $P1$ et $P2$ représentent la fraction de gauche et de droite respectivement. D'après la littérature les valeurs de résistance de Kapitza dans le cadre d'interface métallique solide-solide sont de l'ordre de 10^{-8} jusqu'à $10^{-10} \text{ m}^2.K.W^{-1}$ (cf. les travaux de Saltonstall (2020); Cheaito, Hattar, Gaskins, Yadav, Duda, Beechem, Ihlefeld, Piekos, Baldwin, Misra et al. (2015); Hurley, Khafizov & Shinde (2011)). Ainsi, observant que le ratio d'anisotropie se décompose comme le produit de deux termes $P1$ et $P2$, dont $P2$ est très proche de 1, il est légitime de considérer que ς peut se ramener au terme $P1$. Une telle tendance nous montre que dans le contexte des

matériaux métalliques, nous ne pouvons avoir des valeurs d'anisotropies fortes étant donné que le PLME reste de l'ordre de grandeur des tailles de grains d_{\parallel} et d_{\perp} . Cependant, malgré le fait que l'anisotropie semble toujours proche de 1, des défis persistent. D'une part la dépendance thermique des variables $R_K^{\Delta\theta}$ et λ_0 rendent l'équation non-linéaire. D'autre part, dans un contexte où les orientations granulaires et atomiques doivent être vues comme des quantités aléatoires, car associées à un organisme physiquement plausible à l'échelle nanométrique, alors la carte des coefficients de diffusivité pourrait présenter une grande variance, on parlera alors de "chaos anisotrope".

Ces observations renforcent la certitude de devoir disposer de méthodes de simulation numérique stables face à des micro-variations locales et chaotiques et à des schémas non-linéaires de diffusion.

1.4 Conclusion

Ce chapitre présente les détails de la mise en place d'un modèle multi-échelle innovant visant à mettre en exergue l'impact de la microstructure d'un matériau métallique dans le cadre de l'étude d'un phénomène de conduction thermique. Nous nous sommes notamment focalisés sur la prise en compte de la structure atomique dans l'expression de l'équation de diffusion anisotrope sans déplacement de matière. Nous avons considéré, d'une part, des variables d'orientations relatives avec l'agencement de la structure cristalline, appelée grain, et, d'autre part, du principe de barrières thermiques relatives aux interfaces entre grains. Plus précisément, nous avons vu qu'en se reprochant de la structure intrinsèque du matériau étudié, l'orientation granulaire, mais également l'orientation de l'arrangement atomique à l'intérieur du grain, sont des grandeurs susceptibles de jouer un rôle dans la manière dont la chaleur est transmise dans le système. De plus, nous avons considéré les frontières entre les grains, également appelées joints de grains, connue pour se induire une barrière thermique.

La construction de notre modèle, et notamment sa cohérence, sont soutenues par une importante étude bibliographique ainsi que la volonté de détailler chaque étape de sa mise en place afin

qu'aucune part d'ombre ne soit admise. Au final, ce modèle se présente comme un excellent point de départ pour apporter des réponses à la problématique générale du conditionnement de la diffusion thermique dans les matériaux en aéronautique. Dans la continuité de notre étude, il nous faut maintenant parcourir les nombreuses configurations possibles en considérant les trois grandeurs en lien avec la microstructure vis-à-vis de cas réels afin de mesurer concrètement l'impact sur le phénomène de conduction thermique. Pour se faire, nous débutons par une étude par simulation. En effet, la simulation numérique se présente comme une solution idéale pour couvrir les nombreuses situations d'exploitation tout en permettant facilement la compréhension de l'impact respectif de chacune des variables en vue de les hiérarchiser éventuellement. Seulement, l'implémentation de la simulation d'une diffusion anisotrope et non-linéaire, à l'image de notre modèle, nécessite de considérer des méthodes numériques robustes. En outre, l'étude de plusieurs méthodes est essentielle afin de sélectionner celle qui représente le bon équilibre en complexité algorithmique et précision numérique. Le prochain chapitre est donc consacré à la présentation des méthodes considérées afin de répondre aux attentes décrites précédemment.

CHAPITRE 2

MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR L'ÉQUATION ANISOTROPE DE LA CONDUCTION THERMIQUE POUR LES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES

Aujourd'hui, la communauté scientifique s'accorde à reconnaître l'importance de la simulation numérique en sciences des matériaux poussées principalement par les fabricants de pièces de structure qui souhaitent optimiser leurs produits. Pour de nombreuses applications en physique, la simulation numérique vise à résoudre un système régi par une équation différentielle. Très souvent une telle équation n'a pas de solution analytique directe. Il est donc nécessaire de mettre en place des méthodes numériques pour la résoudre. Ces méthodes numériques nécessitent de transformer le problème continu en un problème discret en utilisant des méthodes de discrétisation spatiale et temporelle. Évidemment, faire le choix de la méthode numérique de résolution n'est pas sans conséquence car, le résultat obtenu sera toujours fonction de sources d'erreurs dues à la précision binaire utilisée, au type d'implémentation arithmétique ; et il peut être victime de problèmes éventuels de stabilité induits par l'approche elle-même. Si plusieurs familles de schémas numériques existent pour la résolution de ce type d'équation (différence finie, volume fini, élément fini), il est nécessaire de faire un choix d'approches considérant le caractère plus ou moins anisotrope, potentiellement probabiliste et non-linéaire du cas qui nous intéresse. Dans ce chapitre, nous présentons donc les schémas numériques que nous avons considérés. Nous étudions, quand c'est possible, la consistance et les limites des méthodes.

2.1 Choix du type d'approches

Parmi les trois familles d'approches numériques, de nombreux travaux dédiés sont disponibles notamment dans le contexte de la diffusion anisotrope (différences finies via van Es, Koren & de Blank (2014) et Hyman, Morel, Shashkov & Steinberg (2002) ; volumes finis via Manzini & Putti (2007) et van Es, Koren & de Blank (2016) ; éléments finis via Li & Huang (2010) et Guenneau & Amra (2013)). Pour notre projet, nous avons fait notre choix concernant la famille de méthodes en essayant de trouver un compromis entre réalisme, efficacité et complexité. Nous avons pris en compte le fait que la géométrie du système est rectangulaire à mailles

rectangulaires. Nous avons cherché une méthode nécessitant une mise en place rapide afin d'apporter des premières réponses à la problématique si possible dans un temps réduit. Le sujet nécessite en effet de s'impliquer sur d'autres aspects que la simulation tels que la modélisation et l'expérimentation physique. Comme nous n'étions pas non plus au fait de l'état de l'art et plus familiers avec certaines approches, tout cela nous a conduit à initier ce projet dans le contexte des approches à différences finies. Évidemment, nous n'avons pas ici la prétention d'avoir fait le choix optimal. A partir de notre étude initiale et en fonction des besoins, il y a sûrement à revisiter nos choix initiaux.

De même, un second choix est nécessaire concernant des deux sous-familles de méthodes à savoir explicite ou implicite. Comme vu dans le chapitre précédent, le caractère non-linéaire des facteurs de diffusivité augmente la difficulté relative à l'implémentation des méthodes implicites. Ainsi, certaines solutions implicites à des problèmes exprimés sous forme d'une équation différentielle non-linéaire sont présentes dans la littérature (cf. les travaux de Nicaise & Bekkouche (2019)), mais elles nécessitent de pouvoir être décrites par des systèmes dits quasi-linéaires, par exemple, ce qui semble difficile dans notre cas.

Finalement, malgré la complexité algorithmique souvent plus importante des méthodes explicites et la nécessité de respecter des conditions de stabilités inhérentes aux méthodes explicites (conditions que nous verrons à la fin de ce chapitre) nous nous sommes focalisés sur l'exploitation de trois méthodes explicites à différences finies, appliquées sur la divergence du flux. Basés sur les travaux de Günter, Yu, Krüger & Lackner (2005) puis ceux de van Es *et al.* (2014), nous nous sommes attachés à prendre en compte plusieurs méthodes ayant pour but de parer à la difficulté face aux caractères anisotropes et non-linéaires du contexte du projet. En effet, si l'on étudie l'état de l'art du domaine de la diffusion anisotrope approchée par des méthodes à différences finies, on note que cette dernière est au coeur de nombreuses applications physiques, notamment les écoulements en milieu poreux (cf. les travaux de Ashby, Bosl, Falgout, Smith, Thompson & Williams (1999)), la conduction thermique dans les plasmas de fusion (cf. les travaux de van Es *et al.* (2014)), les flux atmosphériques ou océaniques (cf. les travaux de Galperin, Sukoriansky & Dikovskaya (2010) et Tréguier (2002)) etc. Pour ces contextes, l'erreur

numérique vient du fait que la diffusion parallèle au champ directionnel peut polluer la diffusion perpendiculaire. La résolution numérique de problèmes physiques hautement anisotropes est une tâche difficile. Comme cela est présenté dans les travaux de van Es *et al.* (2014), plusieurs problèmes peuvent survenir tels que :

1. obtenir une convergence dépendante du taux d'anisotropie (cf. les travaux de Babuška & Suri (1992));
2. introduire des erreurs perpendiculaires à valeurs importantes (cf. les travaux de Umansky, Day & Rognlien (2005));
3. générer une perte de positivité près des gradients d'amplitude élevée (cf. les travaux de Sharma & Hammett (2007)).

Les trois méthodes adaptées au cas anisotrope sont désignées respectivement :

1. Euler explicite symétrique ;
2. Euler explicite alignée ;
3. Euler explicite alignée et interpolée.

2.2 Mise en place des éléments classiques : maillage, méthode temporelle et conditions limites et initiales

Tout d'abord, comme dit précédemment, la méthode d'Euler explicite (cf. eq. (2.1)) est utilisée. Deuxièmement, le système est pris à température ambiante à l'état initial puis la surface de gauche vient perturber cette stabilité thermique sous la forme d'un chauffage uniforme le long d'un bord (cf. eq. (2.2)). Le système est considéré en contact permanent avec l'air où la chaleur ne se transmet pas en considérant des parois adiabatiques ; ce qui correspond à prendre la forme analytique des conditions de Neumann (cf. eq. (2.2)).

Le système ne comporte pas de localisation particulière nécessitant une précision supplémentaire tout en ayant une géométrie rectangulaire. Ainsi un maillage uniforme cartésien est mis en place selon le référentiel global (cf. fig. (1.1)). Chaque point du maillage porte alors les index suivants : i pour la coordonnée selon \vec{x} , j pour la coordonnée selon \vec{y} et n pour la coordonnée

temporelle. A noter que le système est discrétisé via les paramètres Δ et Δ_t selon l'espace et le temps respectivement (valeur identique pour le pas d'espace selon \vec{x} ou \vec{y})

$$\partial_t T = \frac{T_{ij}^{n+1} - T_{ij}^n}{\Delta_t} \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} T_{left} = T_{1j}^n = T_b & \text{Chauffage uniforme} \quad \text{CL} \\ \partial_{outside} T = 0 & \text{Parois adiabatiques} \quad \text{CL} \\ T_{init} = T_{ij}^0 = T_0 & \text{Température ambiante} \quad \text{CI} \end{cases} \quad (2.2)$$

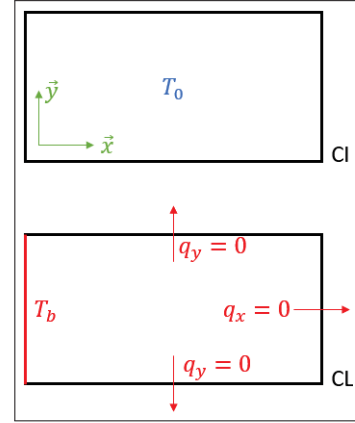


Figure 2.1 Schémas des conditions initiales (en haut) et limites (en bas)

Enfin pour éviter d'alourdir ce rapport avec un nombre élevé d'équations, seuls les principes des différentes méthodes sont présentés dans les paragraphes suivants. A ce stade de la réflexion, la simulation numérique globale prend la forme suivante, où M représente la méthode :

$$\begin{cases} T^{n+1} &= T^n - \Delta_t M(T^n) \\ M(T^n) &\approx \text{div}(\vec{q}^n) \end{cases} \quad (2.3)$$

2.3 Schéma symétrique en différence finie

Une première méthode est considérée dans ce projet et repose en un calcul en deux temps issue des travaux de Günter *et al.* (2005). D'une part, l'évaluation numérique des composantes parallèle et perpendiculaire du flux thermique $\vec{q} = (q_{\parallel}, q_{\perp})_{(\vec{x}, \vec{y})}^{transpose}$ est réalisée. Dans un second temps, l'utilisation de ces dernières dans le but d'estimer la divergence du flux est développée. Associée aux équations (1.13), (2.1), (2.2), la méthode permet de déterminer l'évolution temporelle du champ de température.

2.3.1 Estimation des composantes du flux thermiques

Dans un premier temps, les composantes parallèle et perpendiculaire du flux thermique sont évaluées en quatre points. En outre, considérons l'étude du point de maillage de coordonnées (i, j) , dans ce cas ces premiers calculs viennent déterminer une valeur numérique du flux thermique aux quatre points $(i \pm 1/2, j \pm 1/2)$ (cf. fig. 2.2). Pour chaque point, l'évaluation s'effectue de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} q_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{\parallel} \\ q_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{\perp} \end{pmatrix} = \bar{\bar{D}}_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x T \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \\ \partial_y T \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

où

$$\begin{cases} \partial_x T \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\Delta} (T_{i+1, j+1} + T_{i+1, j} - T_{i, j+1} - T_{i, j}) \\ \partial_y T \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\Delta} (T_{i+1, j+1} + T_{i, j+1} - T_{i+1, j} - T_{i, j}) \end{cases} \quad (2.5)$$

et

$$\bar{\bar{D}}_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} (\bar{\bar{D}}_{i+1, j+1} + \bar{\bar{D}}_{i-1, j+1} + \bar{\bar{D}}_{i+1, j-1} + \bar{\bar{D}}_{i-1, j-1}) \quad (2.6)$$

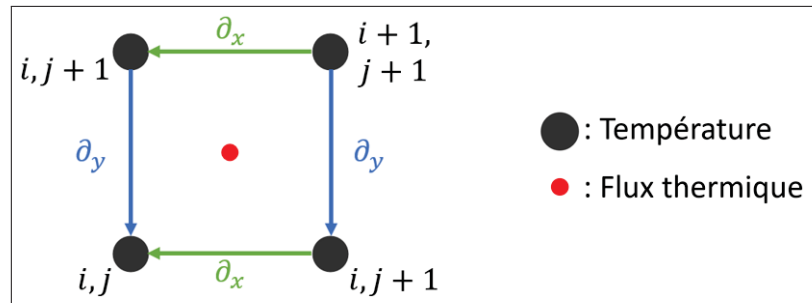


Figure 2.2 Évaluation du flux thermique aux coordonnées $(i + 1/2, j + 1/2)$

Le même raisonnement est appliqué aux trois autres points $\{(i - 1/2, j + 1/2); (i + 1/2, j - 1/2); (i - 1/2, j - 1/2)\}$.

2.3.2 Estimation de la divergence du flux thermique au point d'intérêt (i,j)

Dans un second temps, l'évaluation des flux thermiques entourant le point d'intérêt (i, j) permet de calculer numériquement la divergence du flux thermique en ce dernier (cf. fig. 2.3), selon la méthode suivante (cf. les travaux de Günter *et al.* (2005)) :

$$\begin{aligned} \text{div}(\vec{q}) = & \frac{1}{2\Delta} \left(q_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\parallel} + q_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\parallel} - q_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\parallel} - q_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\parallel} \right) \\ & + \frac{1}{2\Delta} \left(q_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\perp} + q_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{\perp} - q_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\perp} - q_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{\perp} \right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

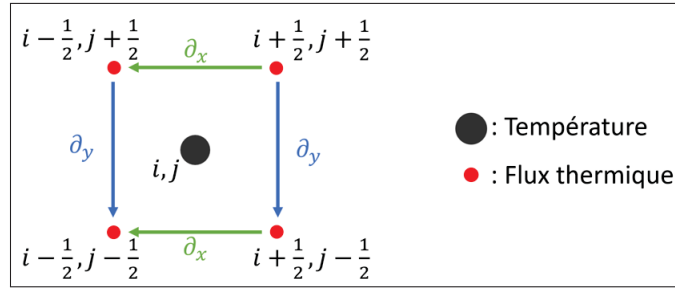


Figure 2.3 Évaluation de la divergence du flux thermique au point d'intérêt (i, j)

Pour résumer, voici un schéma illustrant la méthode au complet :

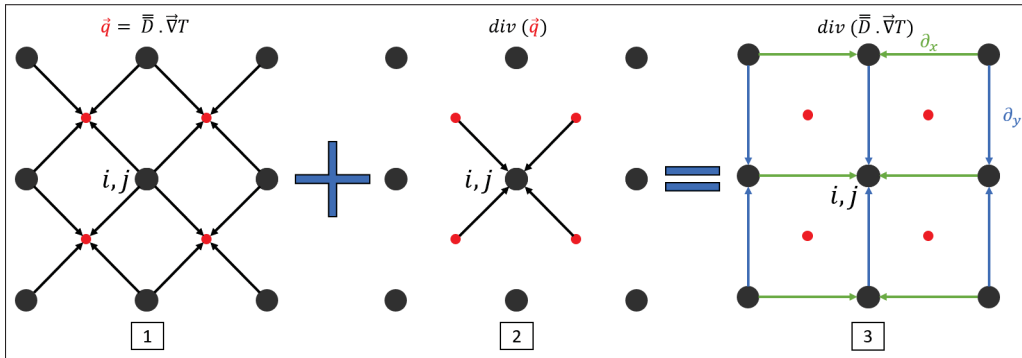


Figure 2.4 Schéma symétrique, la température T est définie par les indices entiers et le tenseur de diffusion par les demi-indices (points rouges)

2.4 Schéma du second ordre en différence finie

Les deux méthodes suivantes ont deux points majeurs en commun, basée sur les travaux de van Es *et al.* (2014). Tout d'abord les évaluations numériques se font selon le repère (\vec{s}, \vec{n}) (cf. fig. 1.1) suivant donc le flux de chaleur à l'instar de la méthode précédente qui suit le repère global (\vec{x}, \vec{y}) . D'autre part, une fonction d'interpolation bi-dimensionnelle d'ordre deux est utilisée, elle est définie comme suit :

$$v(x, y) = c_1 x^2 y^2 + c_2 x^2 y + c_3 x y^2 + c_4 x^2 + c_5 y^2 + c_6 x y + c_7 x + c_8 y + c_9 \quad (2.8)$$

où $v(x, y)$ peut autant représenter la température T que des éléments de diffusivité ou même encore les composantes du vecteur directionnel du flux de chaleur. Suivant la valeur physique estimée, les coefficients c_i sont définis selon les valeurs numériques au point de maillage d'intérêt et à ses proches voisins de la manière suivante :

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{4\Delta^4} (4v_{ij} - 2(v_{ij-1} + v_{ij+1} + v_{i-1j} + v_{i+1j}) + v_{i+1j+1} + v_{i+1j-1} + v_{i-1j+1} + v_{i-1j-1}) \\ c_2 &= \frac{1}{4\Delta^3} (2(v_{ij-1} - v_{ij+1}) + v_{i+1j+1} + v_{i-1j+1} - v_{i+1j-1} - v_{i-1j-1}) \\ c_3 &= \frac{1}{4\Delta^3} (2(v_{i-1j} - v_{i+1j}) + v_{i+1j+1} + v_{i+1j-1} - v_{i-1j+1} - v_{i-1j-1}) \\ c_4 &= \frac{1}{8\Delta^2} (-4v_{ij} + 2(v_{i-1j} + v_{i+1j} - v_{ij-1} - v_{ij+1}) + v_{i+1j+1} + v_{i+1j-1} + v_{i-1j+1} + v_{i-1j-1}) \\ c_5 &= \frac{1}{8\Delta^2} (-4v_{ij} + 2(v_{ij-1} + v_{ij+1} - v_{i-1j} - v_{i+1j}) + v_{i+1j+1} + v_{i+1j-1} + v_{i-1j+1} + v_{i-1j-1}) \\ c_6 &= \frac{1}{4\Delta^2} (v_{i+1j+1} - v_{i-1j+1} - v_{i+1j-1} + v_{i-1j-1}) \\ c_7 &= \frac{1}{8\Delta} (2(v_{i+1j} - v_{i-1j}) + v_{i+1j+1} - v_{i+1j-1} - v_{i-1j+1} - v_{i-1j-1}) \\ c_8 &= \frac{1}{8\Delta} (2(v_{ij+1} - v_{ij-1}) + v_{i+1j+1} + v_{i-1j+1} - v_{i+1j-1} - v_{i-1j-1}) \\ c_9 &= v_{ij} \end{aligned} \quad (2.9)$$

2.4.1 Méthode d'Euler explicite alignée

Le changement de repère permet de travailler sur la notion de divergence du flux de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot (\vec{D} \cdot \vec{\nabla} T) &= \vec{\nabla} \cdot \left((D_{\parallel} - D_{\perp}) \vec{b} \cdot \vec{\nabla} T \vec{b} \right) + \vec{\nabla} \cdot (D_{\perp} \vec{\nabla} T) \\
 &= A_1 + A_2 + A_3 + A_4 \\
 &= -(D_{\parallel} - D_{\perp}) F_1 \partial_n T + (D_{\parallel} - D_{\perp}) F_2 \partial_s T + D_{\parallel} \partial_s T + D_{\perp} \partial_n T + \partial_s D_{\parallel} \partial_s T + \partial_n D_{\perp} \partial_n T \\
 \text{où} \quad F_1 &= -b_1 \partial_s b_2 + b_2 \partial_s b_1 \quad F_2 = -b_2 \partial_n b_1 + b_1 \partial_n b_2
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

avec

$$\begin{aligned}
 A_1 &\approx \frac{-1}{4\Delta^{*2}} \left[(D_{\parallel} - D_{\perp}) (-b_2(b_{1_r} - b_{1_l}) + b_1(b_{2_r} - b_{2_l})) (T_u - T_d) \right] \\
 A_2 &\approx \frac{1}{4\Delta^{*2}} \left[(D_{\parallel} - D_{\perp}) (-b_2(b_{1_u} - b_{1_d}) + b_1(b_{2_u} - b_{2_d})) (T_r - T_l) \right] \\
 A_3 &\approx \frac{1}{\Delta^{*2}} \left[D_{\parallel} (T_r - 2T_c + T_l) + D_{\perp} (T_u - 2T_c + T_d) \right] \\
 A_4 &\approx \frac{1}{4\Delta^{*2}} \left[(D_{\parallel_r} - D_{\parallel_l}) \cdot (T_r - T_l) + (D_{\perp_u} - D_{\perp_d}) \cdot (T_u - T_d) \right]
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Chaque dérivée spatiale est alors définie via des points alignés sur le repère (\vec{s}, \vec{n}) avec un sous-pas d'espace, noté Δ^* (cf. fig. 2.5), et dont les coordonnées sont les suivantes :

$$\begin{cases} (x_r, y_r) = \Delta^*(b_1, b_2) & (x_l, y_l) = -\Delta^*(b_1, b_2) \\ (x_u, y_u) = \Delta^*(-b_2, b_1) & (x_d, y_d) = -\Delta^*(-b_2, b_1) \end{cases} \tag{2.12}$$

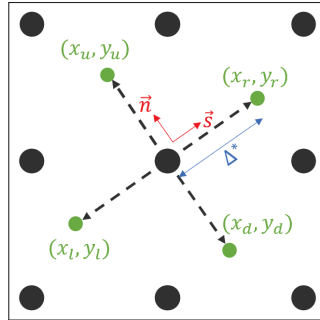


Figure 2.5 Schéma représentant les points d'interpolation *up*, *down*, *left*, *right*

où, rappel, b_1 et b_2 sont les composantes de \vec{b} , le vecteur directeur du flux thermique. En outre, chaque valeur aux points *up*, *down*, *left*, *right* est calculée via l'équation (2.8) en utilisant les coordonnées définies via l'équation (2.12) et en adaptant les coefficients c_i selon la valeur physique estimée.

2.4.2 Méthode d'Euler explicite alignée et interpolée

Sur les mêmes bases que la méthode précédente, la première étape est aussi une réécriture de la divergence du flux qui est alors directement évaluée selon la fonction d'interpolation (cf. eq. (2.8)) comme suit :

$$\begin{aligned}
 -div(\vec{q}) &= D_{\parallel} v_{ss}^T + D_{\perp} v_{nm}^T + v_s^{D_{\parallel}} v_s^T + v_n^{D_{\perp}} v_n^T + (D_{\parallel} - D_{\perp})(S v_s^T - N v_n^T) \\
 &= B_4 + B_3 + B_{12}
 \end{aligned}
 \tag{2.13}$$

où

$$\begin{aligned}
B_{12} &= D_{\parallel} \left[c_7^T \left(2b_1 c_7^{b_1} + b_1 c_8^{b_2} + b_2 c_8^{b_1} \right) + c_8^T \left(2b_2 c_8^{b_2} + b_2 c_7^{b_1} + b_1 c_7^{b_2} \right) \right] \\
&\quad + D_{\perp} \left[c_7^T \left(2b_2 c_7^{b_2} - b_1 c_8^{b_2} - b_2 c_8^{b_1} \right) + c_8^T \left(2b_1 c_8^{b_1} - b_2 c_7^{b_1} - b_1 c_7^{b_2} \right) \right] \\
B_3 &= 2D_{\parallel} \left(c_4^T b_1^2 + c_5^T b_2^2 + c_6^T b_1 b_2 \right) + 2D_{\perp} \left(c_4^T b_2^2 + c_5^T b_1^2 - c_6^T b_1 b_2 \right) \\
B_4 &= \left(c_7^T b_1 + c_8^T b_2 \right) \left(c_7^{D_{\parallel}} b_1 + c_8^{D_{\parallel}} b_2 \right) + \left(-c_7^T b_2 + c_8^T b_1 \right) \left(-c_7^{D_{\perp}} b_2 + c_8^{D_{\perp}} b_1 \right)
\end{aligned} \tag{2.14}$$

L'intérêt principal de cette méthode, d'après les travaux de Günter *et al.* (2005), est d'être aussi précise que la méthode précédente, tout en étant moins coûteuse en termes de calculs, car il n'y a pas de points intermédiaires à évaluer (absence des points *up*, *down*, *left*, *right*).

2.5 Étude de la précision des méthodes présentées

Comme il a été énoncé en introduction, la mise en place d'une méthode explicite implique qu'une condition de stabilité doit être respectée à chaque itération durant tout le long de la simulation. Ce paragraphe propose de mettre en exergue la condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL) de chaque méthode. En effet, les travaux de Lewy, Friedrichs & Courant (1928) ont permis de définir cette condition, pour une référence en anglais les travaux de ? définissent bien ce qu'est une CFL. Cette condition sera par la suite vérifiée pour toutes les simulations réalisées.

Pour rappel, un schéma numérique est dit convergent, si pour une limite à valeur infinitésimale de la discrétisation, la borne sur l'erreur de discrétisation devient également infinitésimale. Dans ces conditions, la solution numérique converge ou se rapproche de la solution analytique. Cette idée est formellement présentée par l'équivalence du théorème de Lax, à l'origine de la formalisation de la CFL, qui stipule que si une méthode numérique est cohérente et stable, alors elle est convergente (cf. les travaux de Lewy *et al.* (1928)).

Tout d'abord, considérons l'équation (2.3) sous la forme suivante :

$$T_{ij}^{n+1} = (1 - a_M)T_{ij}^n + b_M T_{i+1j}^n + c_M T_{ij+1}^n + d_M T_{i-1j}^n + e_M T_{ij-1}^n + f_M T_{i+1j+1}^n + g_M T_{i+1j-1}^n + h_M T_{i-1j+1}^n + k_M T_{i-1j-1}^n \quad (2.15)$$

Pour atteindre la stabilité d'une méthode explicite, il faut que chaque coefficient face aux points du maillage soit positifs. Tout l'enjeu est alors autour du premier terme. Ainsi, il faut que $1 - a_M > 0 \Leftrightarrow a_M < 1$ où M fait référence à la méthode, noté alors a_{M1}, a_{M2} et a_{M3} dans l'ordre de présentation des méthodes. Pour simplifier la lecture du rapport voici leurs expressions :

$$a_{M1} = \frac{\Delta_t}{4\Delta^2} \left[(D_{11}^2 + 2D_{12}^2 + D_{22}^2) + (D_{11}^1 - 2D_{12}^1 + D_{22}^1) + (D_{11}^4 - 2D_{12}^4 + D_{22}^4) (D_{11}^3 + 2D_{12}^3 + D_{22}^3) \right] \quad (2.16)$$

$$a_{M2} = \frac{-\Delta_t}{8\Delta^2} (D_{\parallel} + D_{\perp}) (b_1^2 b_2^2 - 8(b_1^2 + b_2^2)) \quad (2.17)$$

$$a_{M3} = \frac{\Delta_t}{\Delta^2} (b_1^2 + b_2^2) (D_{\parallel} + D_{\perp}) \quad (2.18)$$

Toutes les étapes amenant aux équations ci-dessus vont être détaillées dans les paragraphes suivants. Pour les paragraphes 2.5.1, 2.5.2 et 2.5.3 chaque variable pourvue de l'index a_M à la puissance signifie que sa valeur est restreint aux éléments en produit avec T_{ij} . Par exemple si $C_1^T = \frac{1}{4\Delta^4} (4T_{ij} - 2(T_{ij-1} + T_{ij+1} + T_{i-1j} + T_{i+1j}) + T_{i+1j+1} + T_{i+1j-1} + T_{i-1j+1} + T_{i-1j-1})$ alors $C_1^{T, a_M} = \frac{T_{ij}}{\Delta^4}$. De la même manière $C_2^{T, a_M} = 0$ car le terme T_{ij} n'apparaît pas dans l'équation définissant C_2^T .

2.5.1 CFL de la méthode 1

Cette méthode peut se définir de la manière suivante :

$$T_{ij}^{n+1} = T_{ij}^n - \frac{\Delta_t}{2\Delta} \left[q_{\underline{2}}^{\parallel} + q_{\underline{4}}^{\parallel} - q_{\underline{1}}^{\parallel} - q_{\underline{3}}^{\parallel} + q_{\underline{2}}^{\perp} + q_{\underline{1}}^{\perp} - q_{\underline{4}}^{\perp} - q_{\underline{3}}^{\perp} \right] \quad (2.19)$$

où

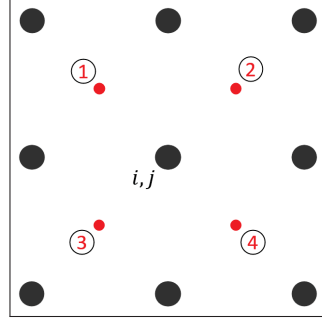


Figure 2.6 Schéma de l'équation (2.7)

Ainsi à partir de l'équation (2.15) et de celle ci-dessus :

$$a_{M_1} = \frac{-\Delta_t}{2\Delta} \left[q_{\underline{2}}^{\parallel, a_M} + q_{\underline{4}}^{\parallel, a_M} - q_{\underline{1}}^{\parallel, a_M} - q_{\underline{3}}^{\parallel, a_M} + q_{\underline{2}}^{\perp, a_M} + q_{\underline{1}}^{\perp, a_M} - q_{\underline{4}}^{\perp, a_M} - q_{\underline{3}}^{\perp, a_M} \right] \quad (2.20)$$

or d'après l'équation 2.4,

$$\vec{q}_{\underline{k}}^{a_M} = \begin{pmatrix} q_{\underline{k}}^{\parallel, a_M} \\ q_{\underline{k}}^{\perp, a_M} \end{pmatrix} = \bar{\bar{D}}_{\underline{k}} \cdot \begin{pmatrix} \partial_x T \Big|_{\underline{k}}^{a_M} \\ \partial_y T \Big|_{\underline{k}}^{a_M} \end{pmatrix} \quad \text{où } \underline{k} \in \llbracket 1 ; 4 \rrbracket \quad (2.21)$$

De plus d'après l'équation 2.5,

$$\left(\partial_{x,y} T \Big|_{\underline{k}}^{a_M} \right) T_{ij} = \frac{\pm T_{ij}}{2\Delta} \quad (2.22)$$

Implicitement, c'est la position du (i, j) qui va déterminer le signe, il faut donc porter une intention particulière afin de ne pas faire d'erreur de signe. Ainsi définissons les signes pour chaque cas.

$k=1$

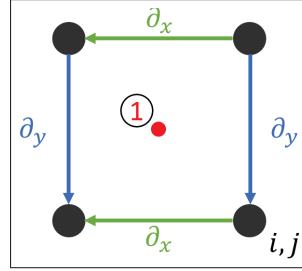


Figure 2.7 Position de (i, j) pour $k = 1$

$$\begin{pmatrix} q_1^{\parallel} \\ q_1^{\perp} \end{pmatrix}_{a_M} = \frac{1}{2\Delta} \begin{pmatrix} D_{11}^1 & D_{12}^1 \\ D_{12}^1 & D_{22}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{ij} \\ -T_{ij} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

$k=2$

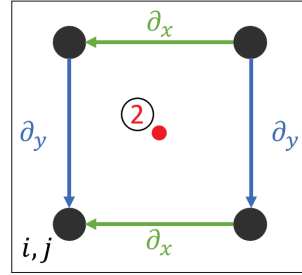


Figure 2.8 Position de (i, j) pour $k = 2$

$$\begin{pmatrix} q_2^{\parallel} \\ q_2^{\perp} \end{pmatrix}_{a_M} = \frac{1}{2\Delta} \begin{pmatrix} D_{11}^2 & D_{12}^2 \\ D_{12}^2 & D_{22}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -T_{ij} \\ -T_{ij} \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

$k=3$

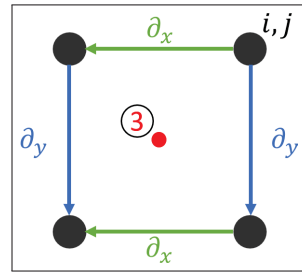
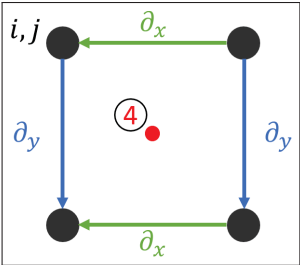


Figure 2.9 Position de (i, j) pour $k = 3$

$$\begin{pmatrix} q_3^{\parallel} \\ q_3^{\perp} \end{pmatrix}_{a_M} = \frac{1}{2\Delta} \begin{pmatrix} D_{11}^3 & D_{12}^3 \\ D_{12}^3 & D_{22}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{ij} \\ T_{ij} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

$k=4$



$$\begin{pmatrix} q_4^{\parallel} \\ q_4^{\perp} \end{pmatrix}_{a_M} = \frac{1}{2\Delta} \begin{pmatrix} D_{11}^4 & D_{12}^4 \\ D_{12}^4 & D_{22}^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -T_{ij} \\ T_{ij} \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Figure 2.10 Position
de (i, j) pour $k = 4$

Au final en combinant tous les éléments précédents alors,

$$a_{M_1} = \frac{-\Delta_t}{4\Delta^2} \begin{bmatrix} -D_{11}^2 - D_{12}^2 - D_{11}^4 + D_{12}^4 - D_{11}^1 + D_{12}^1 - D_{11}^3 - D_{12}^3 \\ -D_{12}^2 - D_{22}^2 + D_{12}^1 - D_{22}^1 + D_{12}^4 - D_{22}^4 - D_{12}^3 - D_{22}^3 \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

Après simplification :

$$a_{M_1} = \frac{\Delta_t}{4\Delta^2} \left[(D_{11}^2 + 2D_{12}^2 + D_{22}^2) + (D_{11}^1 - 2D_{12}^1 + D_{22}^1) + (D_{11}^4 - 2D_{12}^4 + D_{22}^4) (D_{11}^3 + 2D_{12}^3 + D_{22}^3) \right] \quad (2.28)$$

2.5.2 CFL de la méthode 2

Rappel : $\partial T = -\vec{\nabla} \cdot (\vec{D} \cdot \vec{\nabla} T)$ où $\vec{\nabla} \cdot (\vec{D} \cdot \vec{\nabla} T) = A_1 + A_2 + A_3 + A_4$. Ainsi il est trivial de constater que :

$$a_{M_2} = -\Delta_t \left(A_1^{a_{M_2}} + A_2^{a_{M_2}} + A_3^{a_{M_2}} + A_4^{a_{M_2}} \right) \quad (2.29)$$

D'autre part, cette méthode va faire intervenir la fonction d'interpolation (2.8). Il faut d'abord réfléchir à quelle partie de cette fonction fait intervenir le coefficient T_{ij} . En se basant sur leurs

définitions (cf. eq. (2.9)) il est possible de définir $v^{a_M,T}(x, y)$ de la manière suivante :

$$v^{a_M,T}(x, y) = c_1^{a_M,T} x^2 y^2 + c_4^{a_M,T} x^2 + c_5^{a_M,T} y^2 + c_9^{a_M,T} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} c_1^{a_M,T} &= 1/(4\Delta^4) \\ c_2^{a_M,T} &= 0 \\ c_3^{a_M,T} &= 0 \\ c_4^{a_M,T} &= -1/(2\Delta^2) \\ c_5^{a_M,T} &= -1/(2\Delta^2) \\ c_6^{a_M,T} &= 0 \\ c_7^{a_M,T} &= 0 \\ c_8^{a_M,T} &= 0 \\ c_9^{a_M,T} &= 1 \end{aligned} \quad \text{où} \quad (2.31)$$

L'étape suivante est alors de déterminer les différents $A_k^{a_{M_2}}$ en se basant sur l'équation (2.11). Sachant qu'il est évident de remarquer que seules les valeurs de T_k aux coordonnées $\{r, u, l, d\}$ vont faire intervenir T_{ij} . Enfin, avant de rentrer dans le vif des calculs il est utile de relever que, via l'équation (2.30) nous avons :

$$T^{a_M}(x_k, y_k) = c_1^{a_M} x_k^2 y_k^2 + c_4^{a_M} x_k^2 + c_5^{a_M} y_k^2 + c_9^{a_M} \quad \text{où } k = \{r, u, l, d\} \quad (2.32)$$

A_1

D'après l'équation (2.11) :

$$A_1^{a_{M_2}} = -\frac{D_{\parallel} - D_{\perp}}{4\Delta^*} \left[-b_1(b_{2_r} - b_{2_l}) + b_2(b_{1_r} - b_{1_l}) \right] \left(T_u^{a_M} - T_d^{a_M} \right) \quad (2.33)$$

où

$$T_u^{a_M} - T_d^{a_M} = c_1^{a_M} (x_u^2 y_u^2 - x_d^2 y_d^2) + c_4^{a_M} (x_u^2 - x_d^2) + c_5^{a_M} (y_u^2 - y_d^2) + c_9^{a_M} - c_9^{a_M} \quad (2.34)$$

Or d'après (2.12) :

$$\begin{cases} x_u^2 y_u^2 - x_d^2 y_d^2 &= b_2^2 b_1^2 \Delta^{*4} - b_2^2 b_1^2 \Delta^{*4} = 0 \\ x_u^2 - x_d^2 &= b_2^2 \Delta^{*2} - b_2^2 \Delta^{*2} = 0 \\ y_u^2 - y_d^2 &= b_1^2 \Delta^{*2} - b_1^2 \Delta^{*2} = 0 \end{cases} \quad (2.35)$$

Au final,

$$A_1^{a_{M_2}} = 0 \quad (2.36)$$

A_2

D'après l'équation (2.11) et suivant le même raisonnement que A_1 ,

$$A_2^{a_{M_2}} = 0 \quad (2.37)$$

A_3

D'après l'équation (2.11),

$$A_3^{a_{M_2}} = -\frac{1}{\Delta^*} \left[D_{\parallel} \left(T_r^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_l^{a_M} \right) + D_{\perp} \left(T_u^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_d^{a_M} \right) \right] \quad (2.38)$$

où

$$\begin{cases} T_u^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_d^{a_M} = c_1^{a_M} (x_u^2 y_u^2 + x_d^2 y_d^2) + c_4^{a_M} (x_u^2 + x_d^2) + c_5^{a_M} (y_u^2 + y_d^2) + 2.c_9^{a_M} - 2.c_9^{a_M} \\ T_r^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_l^{a_M} = c_1^{a_M} (x_r^2 y_r^2 + x_l^2 y_l^2) + c_4^{a_M} (x_r^2 + x_l^2) + c_5^{a_M} (y_r^2 + y_l^2) \end{cases} \quad (2.39)$$

Or d'après (2.12) :

$$\begin{cases} x_u^2 y_u^2 + x_d^2 y_d^2 &= 2b_2^2 b_1^2 \Delta^{*4} \\ x_u^2 + x_d^2 &= 2b_2^2 \Delta^{*2} \\ y_u^2 + y_d^2 &= 2b_1^2 \Delta^{*2} \\ x_r^2 y_r^2 + x_l^2 y_l^2 &= 2b_2^2 b_1^2 \Delta^{*4} \\ x_r^2 + x_l^2 &= 2b_2^2 \Delta^{*2} \\ y_r^2 + y_l^2 &= 2b_1^2 \Delta^{*2} \end{cases} \quad (2.40)$$

Ainsi si l'on considère $\Delta^* = \Delta/2$ (valeur prise lors de l'implémentation de cette méthode et prise ici pour simplifier les notations) et que l'on considère les signes de l'équation 2.30,

$$\begin{cases} T_u^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_d^{a_M} = \left[\frac{b_1^2 b_2^2}{32} - \frac{b_1^2 + b_2^2}{4} \right] \\ T_r^{a_M} - 2T_c^{a_M} + T_l^{a_M} = \left[\frac{b_1^2 b_2^2}{32} - \frac{b_1^2 + b_2^2}{4} \right] \end{cases} \quad (2.41)$$

A noter que cette fonction est constamment du signe négatif (cf. fig. 2.11). Au final,

$$A_3^{a_{M_2}} = \frac{1}{8\Delta^2} (D_{\parallel} + D_{\perp}) \left(b_1^2 b_2^2 - 8(b_1^2 + b_2^2) \right) \quad (2.42)$$

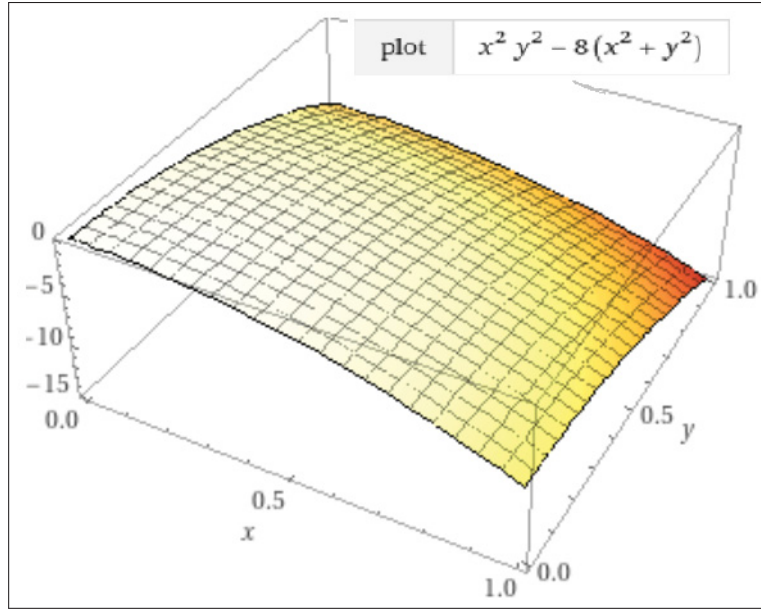


Figure 2.11 Fonction $(x^2 y^2 - 8(x^2 + y^2))$ constamment négative où $(x, y) \in [0, 1]^2$

A_4

D'après l'équation (2.11) et suivant le même raisonnement que A_1 ,

$$A_4^{a_{M_2}} = 0 \quad (2.43)$$

En rassemblant les équations (2.36), (2.37), (2.42), (2.43) et (2.29) et en faisant attention au signe, nous obtenons :

$$a_{M_2} = -\Delta_t A_3^{a_{M_2}} = \frac{-\Delta_t}{8\Delta^2} (D_{\parallel} + D_{\perp}) \left(b_1^2 b_2^2 - 8(b_1^2 + b_2^2) \right) \quad (2.44)$$

2.5.3 CFL de la méthode 3

Avec le même raisonnement que pour la méthode 2, il est trivial de constater que :

$$a_{M_2} = -\Delta_t \left(B_{12}^{a_{M_3}} + B_3^{a_{M_3}} + B_4^{a_{M_3}} \right) \quad (2.45)$$

Or, d'après l'équation (2.31) seul les coefficients c_1 , c_4 , c_5 et c_9 font intervenir le coefficient T_{ij} . Ainsi $B_{12}^{a_M} = B_4^{a_M} = 0$ et $B_3^{a_M}$ vaut :

$$B_3^{a_M} = 2(D_{\parallel} + D_{\perp})(c_4^{a_M} b_1^2 + c_5^{a_M} b_2^2) = \frac{-1}{\Delta^2}(D_{\parallel} + D_{\perp})(b_1^2 + b_2^2) \quad (2.46)$$

Au final, en faisant attention au signe une nouvelle fois,

$$a_{M_3} = \frac{\Delta_t}{\Delta^2}(D_{\parallel} + D_{\perp})(b_1^2 + b_2^2) \quad (2.47)$$

Cette dernière démonstration conclut alors la partie sur les méthodes numériques.

2.6 Conclusion

Après avoir mis en place un modèle multi-échelle rigoureux, ce chapitre présente en détails la mise en place de différentes méthodes numériques robustes afin de simuler une équation de diffusion anisotrope et non-linéaire. Une fois l'approche par différences finies sélectionnées, pour des raisons de compatibilité, d'efficacité et de complexité (algorithmiquement parlant mais aussi du point de vue de sa mise en place), plusieurs méthodes ont été retenues suite à une étude bibliographique approfondie. En effet, une étude par simulation nécessite toujours la considération de plusieurs méthodes où varie la balance entre complexité et précision afin d'obtenir les résultats les plus optimaux possibles. De plus, dans notre cas, les méthodes se doivent d'être robustes face à une anisotropie marquée mais surtout capable de fonctionner malgré le caractère non-linéaire de notre modèle.

Dans ce but trois méthodes explicites ont été retenues, explicites en opposition aux méthodes implicites qui ne peuvent faire face à la non-linéarité. Pour chacune d'entre elle, un rapport précis de leur fonctionnement est présenté pour appuyer leur légitimité face à des modèles de diffusion. En revanche, malgré un appui littéraire fort et un suivi analytique claire des différentes étapes de calcul de ces méthodes, un dernier aspect visant la justification du choix devait être considéré afin de présenter la méthodologie numérique le plus rigoureusement possible. En effet, traiter une simulation via des méthodes explicites implique que des conditions de stabilité, autrement appelées conditions de Courant-Friedrich-Levy (CFL), sont à respecter. Ainsi, ce chapitre se conclut sur la démonstration des conditions CFL propres à chacune des méthodes.

Au final, après avoir mis en place un contexte numérique solide, nous pouvons maintenant nous pencher sur l'exploitation des simulations. D'une part, des test extrêmes afin de vérifier le caractère robuste et la fiabilité de nos méthodes sont établis. D'autre part, des campagnes numériques plus réaliste afin d'apporter des réponses concrètes à notre problématique sont menées.

CHAPITRE 3

MISE EN PLACE DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE ET DISCUSSION DES RÉSULTATS

Afin de rendre compte de nos résultats concernant la simulation numérique du processus de conduction thermique pour les matériaux métalliques tels que les alliages ou composites à base d'aluminium, nous consacrons cette partie du rapport à la présentation de certains de nos résultats. Dans un premier temps, nous allons présenter les résultats de simulation dans le cadre stricte du modèle mathématique de l'équation de diffusion. L'objectif est d'observer le potentiel des schémas numériques à limiter la propagation d'erreur dans le cas anisotrope. En outre, les valeurs de ratios d'anisotropie considérées peuvent ne pas représenter des cas physiquement plausibles. Dans un second temps, nous nous intéressons à la simulation de la conduction thermique en tenant compte du modèle physique associé présenté dans le chapitre 2. En effet, nous y intégrons notamment des contextes propres à l'application. Considérant le cadre des matériaux, il est notamment intéressant de pouvoir simuler des contextes où le matériau a subi des transformations influençant sa microstructure (forgeage, matriçage, estampage, etc.). Pour complexifier notre modèle, nous y intégrons notamment une dimension aléatoire. Il s'agit de considérer l'orientation comme un champ aléatoire régi par un modèle de distribution plus ou moins piquée. Ainsi est pris en compte un modèle Gaussien avec comme extrema, allant du modèle uniforme au cas déterministe (auss appelé cas "mono-orienté"). Nous montrons notamment qu'introduire ce contexte aléatoire n'est pas sans conséquence sur l'intérêt d'avoir étudié des méthodes numériques fiables à d'éventuel contexte anisotropie et non-linéaire.

3.1 Schémas isotrope et anisotrope de diffusion théoriques

L'objectif de ce paragraphe est de tester la capacité des méthodes de simulation numérique étudiées à rendre compte de l'équation de diffusion équation (1.1) dans des contextes anisotropes et non-linéaires plus ou moins marqués. Pour se faire, nous considérons le cas simple où l'on chauffe un matériau de manière homogène sur tout un côté comme le montre la figure (2.1) du chapitre précédent. La valeur de chauffe au bord est de $780K$. Nous considérons une géométrie

rectangulaire simple et un maillage cartésien uniforme à deux dimensions spatiales. Une maille à deux dimensions est alors un parallélepède rectangle de dimension $(\Delta_x \times \Delta_y)$ selon les directions (\vec{x}, \vec{y}) .

Le problème spatio-temporel impose une discrétisation de la solution numérique à chaque intersection du maillage. Ainsi, chaque point de la solution numérique est indexé via les 3 même indices que durant le chapitre précédent (i, j, n) . En outre : $T(x, y, t) = T(i.\Delta_x, j.\Delta_y, n.\Delta_t) \approx T_{ij}^n$ où $(i, j, n) \in \llbracket 0; N_x \rrbracket \times \llbracket 0; N_y \rrbracket \times \llbracket 0; N_t \rrbracket$. Si le système est de longueur L_x selon \vec{x} , de largeur L_y selon \vec{y} et que le temps final de la simulation est t_f alors on définit les notations suivantes : $(N_x + 2).\Delta_x = L_x$, $(N_y + 2).\Delta_y = L_y$ et $N_t.\Delta_t = t_f$.

Dans ce contexte, nous avons trois méthodes à étudier en fonction de différentes configurations. Il s'agit des méthodes, détaillées dans le chapitre précédent et basées sur les travaux de Günter *et al.* (2005) et van Es *et al.* (2014) :

1. Euler Explicit Symmetric (EES);
2. Euler Explicit Aligned (EEA);
3. Euler Explicit Interpolated (EEI).

Afin de tester la tenue des méthodes face à des configurations différentes d'anisotropie, nous observons pendant 2 secondes l'évolution au cours du temps de la différence entre la valeur maximum du champ de température et sa valeur minimale que nous appelons δT exprimée en Kelvin. Enfin, durant l'ensemble des simulations de cette partie, nous utilisons $\Delta_x = \Delta_y = \Delta$.

3.1.1 Contexte isotrope

Notre référence dans ce paragraphe est le cas isotrope qui est présenté à la figure (3.1) où le facteur de diffusivité est fixé $100.10^{-6} m^2.s^{-1}$ afin de représenter un bon conducteur. D'après la courbe, on peut observer que comme la température se diffuse des points chauds vers les points plus froids, la différence (max-min) décroît obligatoirement. Pendant la première partie, le δT stagne car le transfert de chaleur n'a pas atteint le bord opposé du matériau. Une fois atteint,

la diffusion fait son oeuvre et le δT décroît mais de manière non-linéaire car plus le gradient de température diminue plus la température augmente. Sur le plan purement numérique, nous remarquons que les trois méthodes, EES, EEA et EEI offrent des résultats identiques comme le montre la figure (3.1). Un tel résultat attendu est donc cohérent et conforte la rationalité de nos méthodes, ce qui nous amène maintenant à traiter le cas anisotrope.

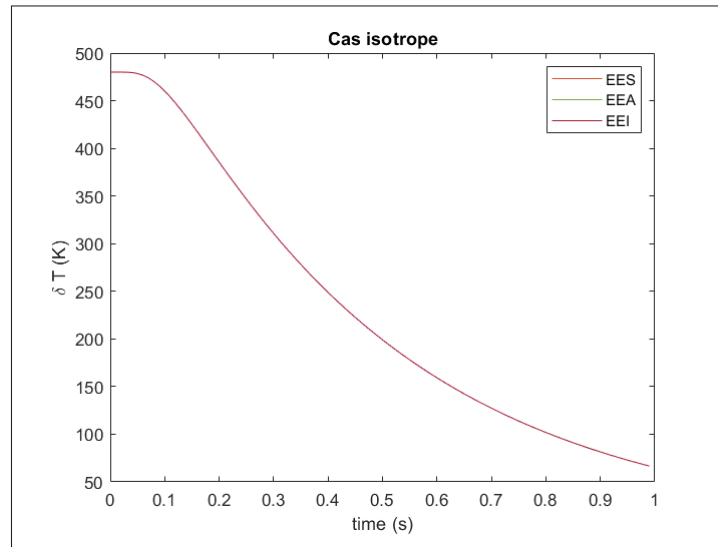


Figure 3.1 Courbe δT en fonction du temps pour le cas de la diffusion isotrope

3.1.2 Contexte anisotrope

Pour ce contexte, nous considérons plusieurs valeurs pour l'orientation (autrement dit plusieurs valeurs de \vec{b}) et de rapport d'anisotropie. Nous avons sélectionné les configurations suivantes :

1. pour l'angle entre le couple (\vec{x}, \vec{y}) , $\beta = [0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}]$ que nous allons appeler respectivement les cas (a,b,c) ;
2. pour le rapport d'anisotropie, $\varsigma = [10, 10^2]$ que nous allons appeler respectivement les cas (1 et 2). Où $D_{\perp} = 1.10^{-6} m^2.s^{-1}$ et $D_{\parallel} = \{10; 100\} 10^{-6} m^2.s^{-1}$.

Comme premier commentaire, la figure (3.2) montre clairement l'impact de l'anisotropie sur les résultats. En effet, les courbes qui possèdent le profil "le plus décroissant" sont toutes pour le

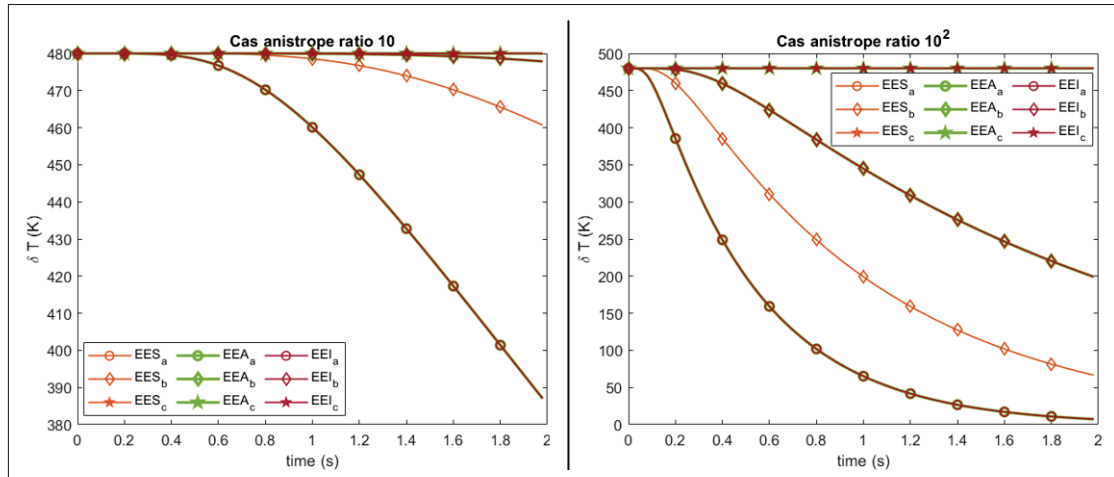


Figure 3.2 Différence de température δT en fonction du temps sur 2s pour des cas anisotropes avec un ratio de 10 à gauche et 100 à droite

"cas a" qui correspond au contexte qui facilite le processus de diffusion "parallèle" supérieur à la diffusion "perpendiculaire". A l'opposé, les courbes qui semblent "bloquées à 480°K" s'expliquent car, après deux secondes, le front thermique pour une position y donnée dans le plan matériau et qui est la plus éloignée de la zone chauffée passe de 480.0°K à $t=0s$ à 480.005°K à $t=2s$ ($\delta T = 0.005K$) dans le cas de l'orientation du "cas c". Cette orientation est celle qui ralentit le plus le processus de transfert de la chaleur. Ces deux premières observations étayent le fait que nos méthodes prennent bien en compte le ratio d'anisotropie (piloté par D_{\parallel} et D_{\perp}) et la direction du flux thermique (pilotée par b_1 et b_2). Autre observation, la variation du profil décroissant entre les cas 1 et 2 où le facteur de diffusivité D_{\parallel} passe de 10 à 10² montre bien que sa valeur est prise en compte et impacte la "vitesse de propagation de la chaleur" dans le système.

Sur le plan, maintenant, de la comparaison des schémas numériques, ces courbes nous montrent également des comportements différents. Nous pouvons particulièrement nous focaliser sur la figure dédiée au cas 2. Nous voyons en effet que pour le cas b (format losange) la méthode EES diffère des méthodes EEA et EEI (confondues) alors qu'il s'agit de la même configuration expérimentale. Cette différence s'accroît en outre avec l'augmentation du ratio d'anisotropie. Compte tenu des paramètres expérimentaux, nous voyons bien que le schéma numérique EES fondée sur un simple voisinage symétrique pour l'approximation de la dérivée de la température

sans une adaptation numérique locale pour prendre en compte les variations du flux n'est pas en mesure de suivre correctement le profil attendu. Ensuite, nous notons également que les deux méthodes EEA et EEI dites respectivement alignée et interpolée donnent des profils quasi-identiques (superposés dans les figures) et en font donc deux méthodes fiables pour notre étude.

Tenant compte de ces résultats, dans le reste du manuscrit, nous n'utiliserons que la méthode EEI qui est stable, convergente et d'une complexité plus faible que la méthode EEA.

3.2 Étude de l'impact des caractéristiques structurales sur la conduction thermique pour les matériaux métalliques

Pour ce contexte, nous considérons deux études de cas réalistes physiquement où est comparé un cas doublement déterministe, c'est à dire que l'orientation des grains est fixée à 0 tout comme l'orientation des atomes, à 0, avec deux contextes stochastiques. Nous avons sélectionné les configurations suivantes :

1. étude A : comparaison du cas déterministe avec un cas doublement uniforme en distribution, c'est à dire que l'orientation du grain affiliée à chaque point du maillage est tirée selon une loi uniforme (entre $[0; \frac{\pi}{2}]$) tout comme l'orientation des atomes (entre $[0; \frac{\pi}{4}]$);
2. étude Indus : comparaison du cas déterministe avec un cas uniforme pour l'orientation des atomes et déterministe pour l'orientation du grain (fixée à 0).

Il est important de noter que les valeurs δT représente ici les différences de température entre deux simulations menés à partir de deux contextes d'orientations (donc différent du δT du chapitre précédent qui représentais les écarts de température au sein d'une seul et unique simulation).

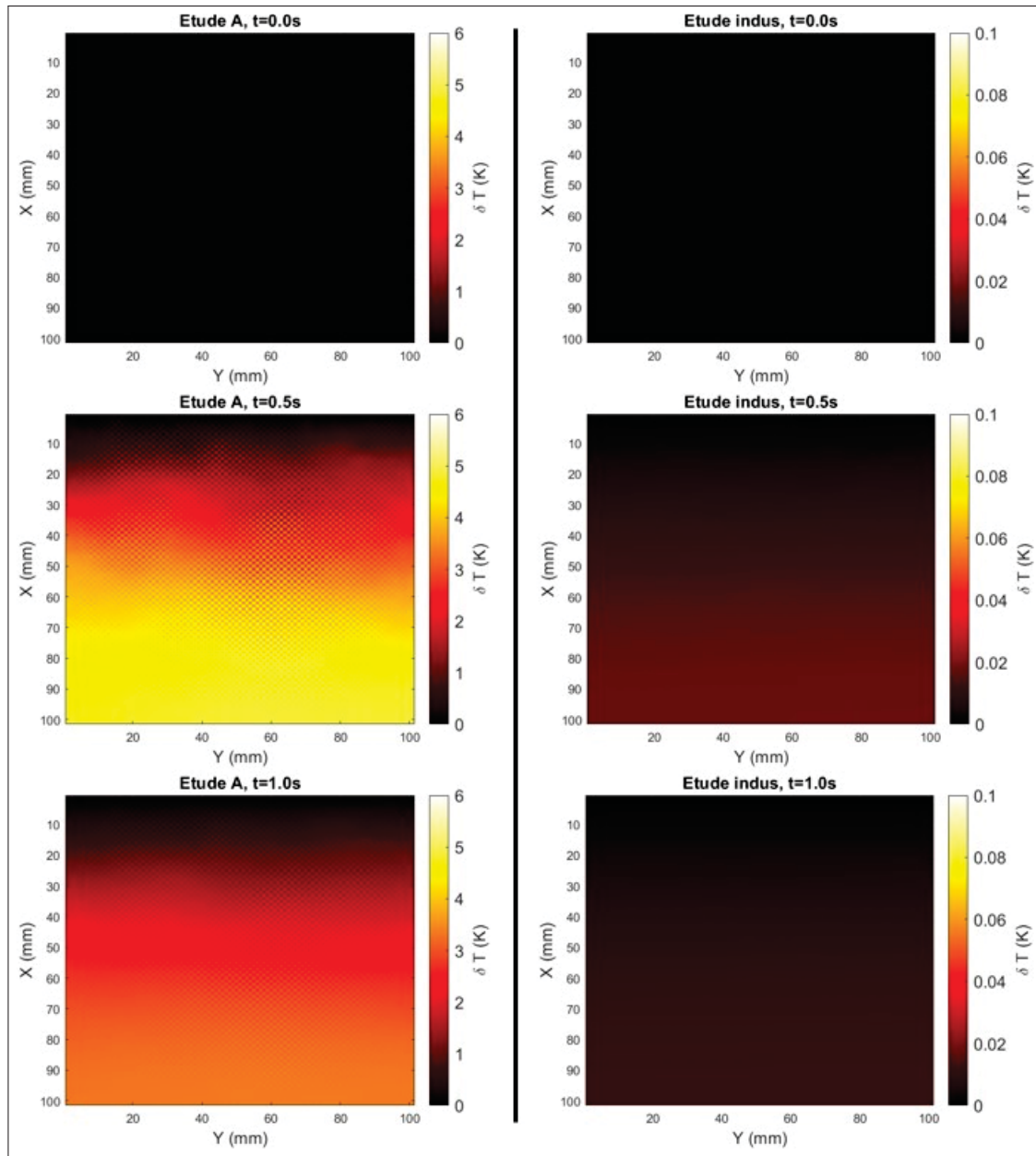


Figure 3.3 Différences de température δT , en fonction du temps sur 1s, entre un cas anisotrope mono-orienté, de diffusivité constante, et un cas où, à gauche, les orientations granulaire et atomique suivent une loi uniforme et où, à droite, seule l'orientation atomique suit une loi uniforme, l'orientation granulaire étant mono-orienté

Une première analyse concerne l'étude A. Il s'agit de l'évaluation des différences des champs de température entre le cas mono-orienté et le cas le plus chaotique possible, c'est à dire que chaque

point du maillage est associé à un couple d'orientations granulaire et atomique tiré selon des lois uniformes dans leurs champs respectifs. Partant d'une différence nulle à l'état initial, ce qui est logique étant donné que les deux simulations sont définies par un contexte identique, nous observons une progression positive des valeurs numériques entre les deux cas. Notamment dans la zone la plus éloignée (en bas) de la zone de chauffage (en haut) où des différences d'environ $6K$ apparaissent au bout de $0.5s$ de simulation. La présence de tels écarts suggère le fait que la structure intrinsèque au matériau joue un rôle dans le phénomène de conduction thermique. En outre, suivant la carte des orientations du système la chaleur va plus ou moins se propager et donc le système est impacté par la structure interne du matériau. A noter que si l'on pousse la simulation plus longtemps, voir les résultats à $t = 1.0s$ en bas à gauche de la figure (3.3), les différences s'amenuisent au fur et à mesure que le système converge vers son état d'équilibre, c'est à dire l'instant où le média étudié atteint la valeur de $780K$ sur tout le champ spatial.

Cependant, bien que l'étude A soit réaliste physiquement elle ne prend pas en compte une caractéristique typique des pièces d'aluminium, ou d'alliages d'aluminium, présents sur les aéronefs ou les lanceurs spatiaux. En effet, durant la fabrication de la majorité des pièces de structure, les pièces subissent un écrouissage qui a plusieurs buts tels que l'augmentation de la résistance mécanique, la diminution de l'épaisseur des pièces, etc. Un tel processus a pour conséquence l'allongement des grains, donnant cette forme rectangulaire en 2D exploitée dans notre modèle, mais avec une orientation déterministe dans le sens de l'écrouissage (voir fig.(3.4)).

Ainsi, une question, plus axée sur un contexte industriel, se pose : est-ce que lors du processus de fabrication l'orientation atomique doit être prise en compte et est-ce qu'une certaine carte d'orientation aurait un avantage suivant les attentes du matériau ?

C'est dans ce but que l'étude "Indus" a été mise en place. L'impact de l'orientation granulaire a été nullifiée et seul l'impact de l'orientation atomique est mise en exergue. Il est trivial d'observer que les différences de températures sont moins importantes voir négligeables. Ainsi, cette dernière analyse montre que non, la réflexion de l'orientation des atomes n'est pas à prendre en

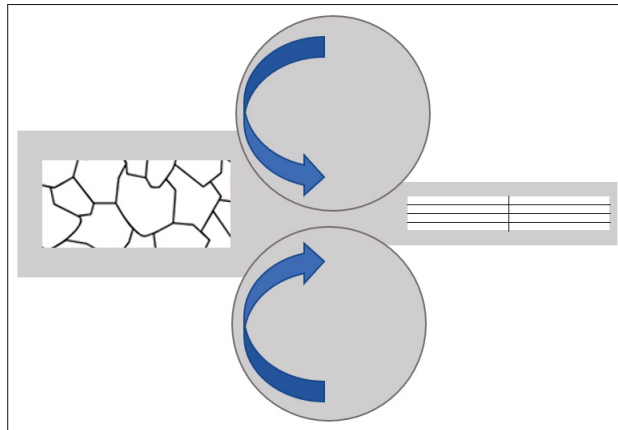


Figure 3.4 Schéma d'un écoulement montrant l'évolution de la forme des grains avant et après écoulement

compte lors du processus de fabrication en vue d'améliorer ses performances vis à vis de la conduction thermique.

3.3 Étude approfondie sur l'impact de l'orientation granulaire

En partant des conclusions apportées par les paragraphes précédents, il est clair que la méthode EEI est assez robuste pour rester stable face à une anisotropie marquée (sous respect de la condition CFL) et ses résultats numériques mettent en valeur le caractère dominant de l'orientation granulaire vis-à-vis des paramètres de microstructure présent dans ce projet. Ainsi ce dernier paragraphe a pour but de mettre en exergue les extremums numériques que peut atteindre notre modèle face au modèle de référence isotrope en faisant varier uniquement cette caractéristique.

Pour ce faire une un ensemble de quatre simulations est lancé selon des configurations bien précises. La majorité des paramètres d'entrées sont communs aux différents tests afin de bien mettre en valeur les divergences créées par plusieurs schémas d'orientation granulaire distinctes. Ainsi, les simulations représentent 2.5s de phénomène de conduction avec les mêmes conditions limites et initiales décrits en figure 2.1. Cependant contrairement à la précédente campagne numérique "indus", les divergences sont représentées sur une ligne d'observation schématisé

dans la figure 3.5. Pour tous les tests suivant le modèle anisotrope de ce projet, l'orientation atomique est définie selon une carte mono-orienté de $0rad$ pour que son impact suivant les test ne soit pas présent. De toute façon le paragraphe précédent montre bien que cette variable n'impacte pas les résultats voir est négligeable vis-à-vis de l'impact granulaire.

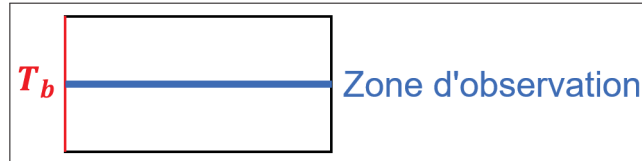


Figure 3.5 Schéma de la ligne d'observation

Outre le cadre isotrope, les trois autres simulations sont pourvues de la carte d'orientation granulaire suivante :

1. un système mono-orienté, avec une orientation granulaire fixé à $0 rad$. La divergence numérique entre cette configuration et le modèle de référence est représenté en orange sous la légende "0 rad" dans la figure 3.6;
2. un système mono-orienté, avec une orientation granulaire fixé à $\pi/2 rad$. La divergence numérique entre cette configuration et le modèle de référence est représenté en vert sous la légende "pi/2 rad" dans la figure 3.6;
3. un système uniforme, où l'orientation granulaire de chaque point du maillage est tirée aléatoirement dans l'intervalle physique de référence soit $[0; \pi/2] rad$. La divergence numérique entre cette configuration et le modèle de référence est représenté en violet sous la légende "uniforme" dans la figure 3.6.

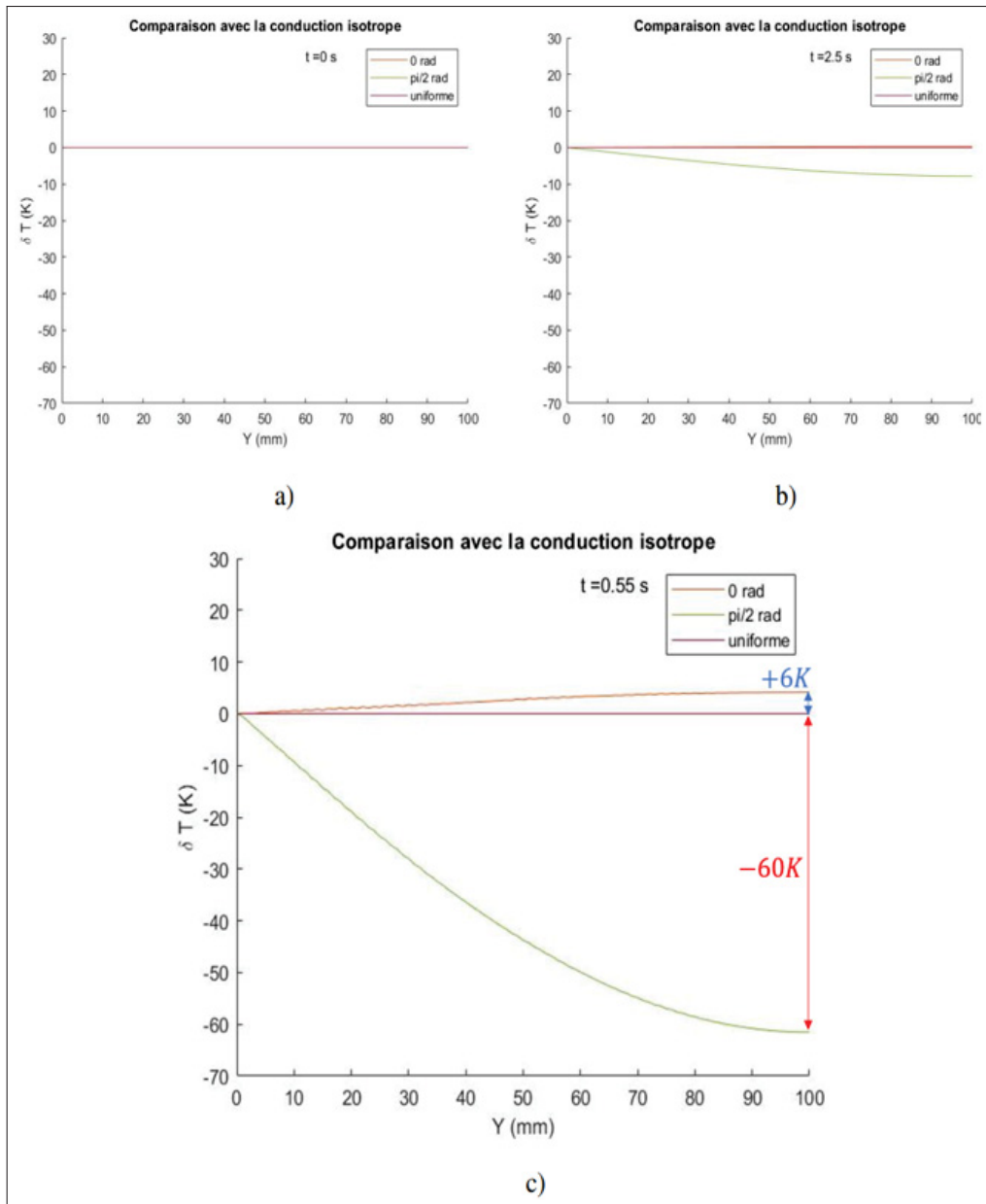


Figure 3.6 Divergence numérique entre le modèle de référence isotrope et le modèle de microstructure anisotrope sur 2.5s le long d'une ligne d'observation selon trois cartes d'orientation granulaires (en orange une carte mono-orienté à 0 rad, en vert une carte mono-orienté à $\pi/2$ rad et en violet une carte où l'orientation suit une loi uniforme dans l'intervalle $[0; \pi/2]$). Les graphiques a) et b) montrent respectivement les divergences à l'état initial et final. Le graphique c) met en exergue l'extremum que peut atteindre les différences entre modèles

Plusieurs observations et discussions peuvent être extraites de cette dernière campagne numérique. Tout d'abord, bien que ce soit trivial, aucune différence est présente à l'état initial et après un pic de divergence intermédiaire (cf. fig. c de la figure 3.6) tout semble retomber. Cela s'explique par le fait que toutes les simulations sont proches de l'état d'équilibre où tout le système s'élève à la température de chauffe du bord gauche ($780K$).

Secondement, la courbe violette, représentant les divergences entre le modèle isotrope et notre modèle dans un contexte d'orientation granulaire uniforme, semble être nulle en tout temps (à noter qu'elle garde cette allure du temps initial au temps final). En réalité, les divergences sont tellement faibles qu'elles n'apparaissent pas visuellement sur la courbe. En effet, appliquer un contexte aléatoire le long de notre zone d'observation nullifie l'impact de notre modèle. Cette caractéristique est rationnelle car si dans certains contextes (comme nous le décrirons plus bas) le flux de chaleur à tendance à être accéléré et dans d'autre ralenti alors en tirant, selon une loi uniforme, l'orientation de chaque grain les éléments qui favorisent la transmission de la chaleur sont directement balancés avec ceux qui minimisent la transmission et donc sur une centaine de grain considérés (comme c'est le cas ici) l'impact du modèle est annulé. De plus, il est légitime de dire que le rapprochement entre le modèle de référence et notre modèle dans un cas uniforme étaye le réalisme physique de notre modèle. Implicitement, face à notre modèle, il est possible d'interpréter le cas isotrope comme étant un cas spécifique de notre modèle où l'ensemble des variables de la microstructure suivent des lois uniformes sur leur intervalle physique respectif ramenant leurs impact respectifs à zéro.

Troisièmement, les signes des divergences apportent des éléments remarquables à cette étude. En effet, le choix d'une différence non absolu entre notre modèle et le modèle isotrope (dans le sens suivant) a été fait. Ainsi, si les différences sont négatives cela signifie que la chaleur est plus faible, autrement dit que la transmission de chaleur est ralentie par rapport au modèle "classique". Dans le cas inverse, donc positif, on peut alors parler d'accélération. Point d'autant plus étayé par le fait qu'au temps final (cf. fig. b de la figure 3.6) le cas négatif (soit ralenti) n'a pas encore atteint l'état d'équilibre là où le cas accéléré lui l'a atteint (l'ensemble des différences numériques est retombé à zéro témoignant de l'état équilibre dans le cas isotrope

comme anisotrope). Maintenant analysons quelles configurations ralentissent ou accélèrent le flux de chaleur. La courbe négative verte représente une orientation globale à $\pi/2 \text{ rad}$. D'après la manière dont a été implémenté le système, c'est une configuration où l'on maximise la rencontre avec des joints de grains le long de notre ligne d'observation. A l'inverse, la courbe positive orange, qui représente une orientation globale à 0 rad est les cas où l'on minimise le nombre de frontière de grains le long de la zone d'observation. Il est alors possible de conclure, avec un appui numérique, que les joints de grains jouent un rôle de modérateur face à la propagation de la chaleur. Mais aussi que vis-à-vis de la conduction isotrope il peut y avoir des configurations, comme celle de la courbe orange, où la chaleur va avoir tendance à s'investir plus facilement dans le matériau.

Enfin, un dernier regard peut être porté sur les valeurs numériques présent dans la figure 3.6. En effet, la problématique principale est d'évaluer la dépendance du phénomène de conduction thermique face à la microstructure. Cette dernière campagne permet de mettre en exergue un impact non négligeable, étayant au passage les observations équivalentes de la campagne précédente, mais surtout d'évaluer les extremums de cet impact. Ainsi, à l'apogée des divergences, soit à $t = 0.55s$, il est possible de mesurer des différences numériques allant jusqu'à $60K$ environ. Dès lors, il est légitime de considérer que l'impact de la microstructure n'est plus un facteur négligeable du modèle de conduction thermique dans un contexte scientifique. En revanche, dans un contexte industriel, sans l'avis d'un expert industriel, il est difficile d'avancer si de telle valeur mérite une considération dans les processus de réflexions internes aux entreprises.

3.4 Commentaires sur le programme développé pour le projet

Avant de terminer ce chapitre sur l'étude numérique portée dans ce projet, quelques rapides commentaires sur le programme développé sont apportés.

Le programme au complet se décompose en deux grandes parties. Une première étape est implémentée dans le langage FORTRAN 90 à travers l'environnement ATOM, une seconde partie implémenté via MATLAB est décrit plus bas. Donc, la première implémentation est dédiée

au dur des calculs numériques utilisant, entre autres, les méthodes du chapitre deux et laisse une grande variété de possibilités quant aux paramètres d'entrées. En effet, une interface basique avec un terminal UBUNTU est mise en place afin de demander à l'utilisateur les variables d'entrées dans l'ordre suivant :

- I. Le type de matériaux (Al pur ou Al 2024 dans la base de données).
- II. Le type de chauffage (chauffage uniforme ou par un laser gaussien ou uniforme). Pour un chauffage uniforme, la température de bord est demandée.
- III. Quels impacts de l'orientation l'utilisateur souhaite intégrer dans la simulation. C'est-à-dire que le programme demande tout d'abord si l'on veut avoir la microstructure présente ou non. Si oui via quelle variable ? En outre, il y a trois grands axes de présence de la microstructure dans le modèle (orientation granulaire, orientation de l'arrangement atomique et résistance thermique) et le programme laisse le choix sur la présence ou non de ces derniers dans la simulation.
- IV. Le type de méthode (EES, EEA ou EEI).
- V. La dimension spatiale de la simulation (cas 1D est simulé sous un modèle obsolète et le cas 3D fait partie des perspectives du projet).
- VI. Selon la dimension, le ou les différentes tailles, en mètre, du système sont demandées.
- VII. La durée des phénomènes simulés, dans le sens "Combien de temps réel souhaite-on simuler ?". On ne parle pas ici du temps relatif au temps de calcul de la simulation.
- VIII. Selon le temps entré, le programme indique combien d'itération seront nécessaires afin d'atteindre le temps final (le pas de temps est fixé en interne du programme et en fonction des CFL du chapitre deux). Dès lors, l'utilisateur a le choix du pourcentage d'itération qu'il souhaite sauvegarder. Sachant que l'état initial est toujours sauvegardé. L'ensemble des sauvegardes est transporté ensuite dans un dossier au nom des différents paramètres précédents.
- IX. Si l'orientation granulaire est prise en compte alors l'utilisateur doit choisir la loi de répartition de l'orientation sur le système (déterministe, gaussien ou uniforme). Dans le

cas déterministe la valeur globale est demandée. Dans le cas gaussien, la moyenne et l'écartype sont demandés.

- X. Si l'orientation atomique est prise en compte alors l'utilisateur doit choisir la loi de répartition de l'orientation sur le système (déterministe, gaussien ou uniforme). Dans le cas déterministe la valeur globale est demandée. Dans le cas gaussien, la moyenne et l'écartype sont demandés.
- XI. Le programme se lance alors avec une phrase qui indique à quelle sauvegarde nous sommes sur le total des sauvegardes qui vont être effectuées.

Une fois l'ensemble de la simulation terminée la partie orientée traitement de données débute. C'est à travers le langage MATLAB (qui a son propre environnement) que plusieurs codes sont implémentés suivant les résultats que l'on souhaite mettre en exergue (cf. les autres paragraphes du chapitre 3). L'idée commune à chaque code est la suivante : la première partie renvoie l'évaluation numérique du champ de température aux itérations d'intérêts, selon le choix de l'utilisateur comme expliqué plus haut. Chaque sauvegarde est sous la forme d'un tableau de valeurs représentant l'état thermique du système à un temps donné. Pour le paragraphe 3.1, Le programme MATLAB confronte le champ thermique de différentes méthodes (cas isotrope) et/ou à différentes orientations (cas anisotrope) à un temps similaire. Pour le reste des résultats, la création de vidéos, de l'évolution de la température de l'état initiale jusqu'au temps final, est implémenté dans laquelle les différences numériques entre deux cas sont graphiquement représentées (soit sur l'ensemble du système, soit sur une ligne d'intérêt) au lieu d'imprimer uniquement l'état actuel d'un système comme dans le paragraphe 3.1. Ainsi, dès le paragraphe 3.2, les résultats affichés sont des extraits de ces vidéos.

3.5 Conclusion

Après avoir mis en place un modèle multi-échelle rigoureux ainsi que trois méthodes numériques viables face aux problématiques qu'apporte un tel modèle, ce chapitre présente successivement

plusieurs campagnes numériques afin de récolter un maximum d'éléments en vue de construire une réponse concrète à notre problématique.

Une première campagne vise à tester la validité des méthodes dans le cas isotrope mais surtout dans des contextes à fortes anisotropies. Après l'analyse des résultats, la méthode notée EEI, pour "Eule Explicit Interpolated" qui est la dernière méthode présentée dans le chapitre précédent, apparaît comme le parfait équilibre entre robustesse/précision et complexité algorithmique. Ainsi, c'est cette méthode numérique qui est considérée dans les campagnes ultérieures.

Le but de la deuxième campagne est double. D'une part, il s'agit d'apporter des premiers éléments de réponse à la problématique en s'inscrivant dans un contexte plus proche de la réalité (en opposition au caractère plus académique de la première campagne numérique) en faisant varier les différents paramètres en lien avec la microstructure, sans prioriser l'un par rapport à l'autre. D'autre part, après la considération des différents contextes, nous essayons d'identifier s'il y a un caractère ou un groupe de caractères dominants. A ce stade, des divergences allant jusqu'à $6K$ sont observées sous l'influence unique des paramètres microstructuraux. En outre, cela encourage l'hypothèse que la microstructure joue un rôle non négligeable dans un phénomène de conduction thermique. Néanmoins, l'intérêt principal de cette campagne est surtout la mise en valeur de l'ascendant flagrant de l'impact de l'orientation granulaire dans les résultats. Ainsi, c'est sur ce dernier que la dernière campagne numérique est menée.

En effet, la troisième et dernière campagne vise, à travers un focus sur l'orientation granulaire, à déterminer le maximum que peut atteindre les divergences numériques suivant deux contextes de microstructure différents. Ainsi plusieurs contextes sont imaginés allant de microstructure mono-orientée à une microstructure où chaque grain est pourvue d'une orientation aléatoire. Au final, les résultats montrent des différences allant jusqu'à $60K$ par rapport au modèle isotrope de référence et jusqu'à $66K$ d'écart entre deux contextes de microstructure suivant notre modèle. Ces dernières analyses permettent d'affirmer l'existence d'un impact marqué de la microstructure sur le phénomène de conduction thermique.

L'ensemble de ces résultats nécessitent tout de même certaines nuances. En effet, la réflexion se porte uniquement sur l'aluminium et les métaux de manière générale. Nous ne sommes pas donc en mesure d'étendre ces conclusions à d'autres types de matériaux sans prendre en compte les spécificités. De plus, la balance entre négligeable ou non négligeable dépend également du contexte industriel. Cela implique la prise en compte du point de vue d'un expert industriel ce qui nous n'avons pas pu mener. Enfin, bien que les résultats numériques soient relativement convainquant et réalistes, l'appui d'une campagne expérimentale, visant à étayer les hypothèses induites par ce chapitre, est une nécessité. C'est donc sur ce point que se porte le prochain et dernier chapitre.

CHAPITRE 4

CAMPAGNE EXPÉRIMENTALE

La proposition d'un nouveau modèle physique doit être consolidée par un maximum de preuves et ce même si sa mise en place repose sur de nombreuses lois reconnues et validées par la communauté scientifique. La simulation numérique peut jouer un rôle déterminant dans ce processus de rigueur mais ne se présente pas comme une preuve absolue. En effet, depuis sa création, l'étude numérique s'est largement démocratisée au sein des réflexions scientifiques jusqu'à contrebalancer le besoin expérimental nécessaire à la construction d'un nouveau modèle. On entend par là que, régulièrement, le but des campagnes expérimentales a évolué. Il ne se représente plus obligatoirement une preuve au premier plan, indispensable et en grande quantité, mais peut parfois être relayé à un statut secondaire servant d'appui aux résultats numériques. Ce qui a notamment permis de drastiquement réduire la quantité nécessaire d'expériences (sans être dispensable). Cela est d'autant plus vrai aujourd'hui où les recherches de l'infiniment petit ou de l'infiniment lointain sont omniprésentes et poussent les limites actuelles humaines, dans la réalisation de campagne expérimentale, dans leur dernier retranchement. Cependant, on ne peut s'exempter de l'apport d'une ou plusieurs campagnes lors de la construction d'un nouveau modèle si l'on souhaite que le modèle soit rigoureux et valide scientifiquement.

Ainsi ce rapport se termine par un dernier chapitre consacré à la mise en place d'une campagne expérimentale sobre, afin de consolider les observations numériques précédemment décrites. La difficulté principale, à laquelle notre sujet fait face, est que les paramètres de microstructure sont des variables à basses échelles et donc difficiles à manier dans des situations réelles. On peut notamment discuter autour de la résistance thermique et des challenges que représentent des mesures de résistances à l'interface. Des challenges décuplés dès lors que l'on souhaite mesurer sa variabilité en fonction de l'arrangement atomique de part et d'autre du joint de grains, comme présenté dans notre modèle. Cependant, de telle mesures, aussi complexes soient-elles, représente un sujet d'étude à part entière et, n'est donc pas abordé dans ce projet. Considérons maintenant un autre paramètre de notre modèle, l'arrangement atomique et son orientation. Ce

dernier est autant de défis que le précédent. En effet, manipuler l'orientation de l'arrangement atomique est un sujet d'étude complexe. On peut citer les travaux de Park, Suzuki, Kurosawa, Miyao & Sadoh (2012) mais, la mise en place de procédure rigoureuse dans ce domaine reste très sommaire. De plus, les résultats numériques de cette étude, laissent entendre que cette variable n'impacte que très légèrement la conduction thermique. Ainsi il est légitime de considérer qu'une campagne expérimentale à ce sujet n'est pas la priorité. Au final, après avoir exclu les deux paramètres précédents, le regard se tourne légitimement vers l'orientation granulaire. En effet, elle représente la balance optimale entre difficulté de mesure et intérêt, d'après son échelle de grandeur plus accessible et les résultats numériques observés. Ainsi, elle apparaît comme la candidate idéale pour la construction d'une première preuve expérimentale.

Ce chapitre est rapporté en deux parties complémentaires et a surtout nécessité le soutien extérieure de plusieurs experts internes à l'ETS, que ce dernier paragraphe propose de remercier avant d'entrer dans le vif de la procédure expérimentale. Outre le paragraphe mettant en exergue les détails du matériau et des appareils utilisés, une première partie est dédiée à la mise en place d'un processus de mesure de la taille des grains des échantillons étudiés. Ce Processus n'aurait jamais pu être mis en place sans la supervision et l'expertise de Madame Neda Mohammadian, associée et assistante de recherche du laboratoire LAMSI à l'ETS, avec qui j'ai été mis en contact par la bienveillance du professeur et chercheur Vladimir Brailovski, responsable du laboratoire LAMSI. Une seconde partie, plus tumultueuse, a pour but de construire une expérience mesurant la conductivité thermique d'un métal en faisant varier l'orientation granulaire. Le défi principal est la mise en place d'échantillons optimaux pour l'instrument de mesure disponible dans notre laboratoire. Ces échantillons n'auraient jamais vu le jour sans la patience et l'ingéniosité de mon collègue maîtrisant Alain Picard, mais aussi la bienveillance du technicien du département mécanique Anthony Remington qui a accepté plusieurs de nos requêtes dans des délais courts. Enfin, l'ensemble de ce chapitre doit aussi son existence au directeur Sylvain G. Cloutier, dont les conseils ont été le point de départ dans l'élaboration de cette campagne expérimentale.

4.1 Présentation des matériaux et instruments utilisés

4.1.1 Matériaux

Pour le projet, nous avons orienté principalement notre réflexion concernant l'expérimentation dans le contexte des métaux et plus spécifiquement sur l'aluminium et son alliage 2024. Entre des échantillons d'aluminium pur ou alliés, compte-tenu du temps dont nous disposons et des différents pré-traitements nécessaires, notre choix s'est porté sur les mesures de tailles de grains de la conductivité thermique. Nous avons sélectionné une plaque d'aluminium 2024 de dimension 6" x 6" et d'épaisseur 1 1/4" vendue à l'état T3 par la compagnie *McMaster-Carr®*. Cette plaque a donc subi une trempe, suivie d'un durcissement par écrouissage, puis une maturation. L'ensemble des détails est présenté en annexe (cf. annexe I).

Enfin, de l'époxy a été utilisé dans la construction d'échantillons pour les mesures de conduction thermique de notre alliage. L'époxy, du nom de *deep pour, casting and art resin*, est produit par l'entreprise *Magic Resin* et a comme particularité d'être transparente, mais surtout d'avoir une épaisseur maximale de 2 pouces. Cette dernière caractéristique est idéale pour travailler en toute liberté sur la fabrication d'échantillons, tout en ayant un temps de solidification, d'environ 2 jours, plus court que certaines autres résines.

4.1.2 Instruments

Un appareil de mesure est utilisé dans chacune des deux parties, à savoir la taille des grains et la conductivité. Pour la caractérisation de la taille des grains, après avoir préparé les échantillons, un microscope optique est utilisé afin de prendre des photos de la surface de l'échantillon (cf. fig. 4.1). Ce microscope est pourvu d'un grossissement fois 100 ce qui permet d'observer parfaitement la forme et les dimensions des grains en surface en accord avec la norme ASTM, qui sera évoquée plus tard.



Figure 4.1 Photo du microscope optique LEICA-DM-LM tirée de Spachoptics (2004)

Pour déterminer la conductivité thermique, un instrument de mesure, se basant sur la théorie des disques de Lee, est utilisé. Depuis sa création à la fin du $XIX^{\text{ième}}$ siècle par Lees & Chorlton (1896), cette méthode de mesure est fortement présente dans la littérature (cf. les travaux de Sombatsompop & Wood (1997) et Philip & Fagbenle (2014)). L'appareil se présente de la manière suivante :

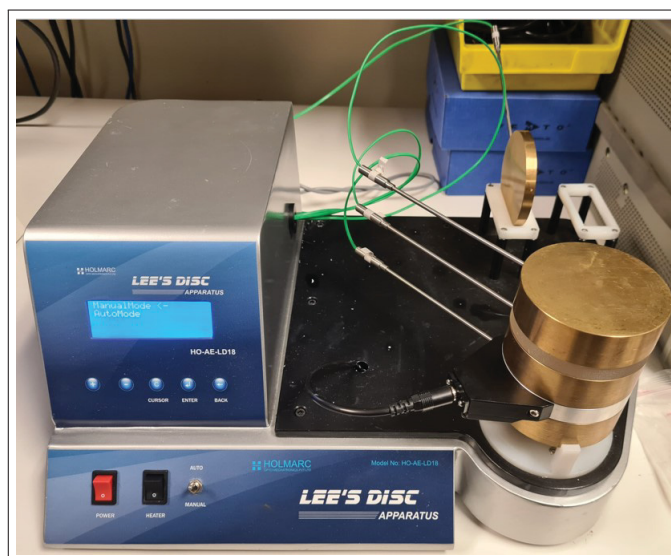


Figure 4.2 Photo du montage des disques de Lee

4.2 Premier traitement sur la plaque d'aluminium 2024

Le but de cette campagne est d'observer la variation de conduction thermique suivant l'orientation des grains. Dans ce but, plusieurs pavés d'aluminium sont extraits de la plaque principale selon une découpe orientée. En effet la plaque, ayant subi un écrouissage de 15% (cf. annexe I), ses grains sont alors caractérisés par une elongation dans le sens de l'aplatissement (cf. fig. 3.4). Ainsi, une découpe orientée va permettre de mettre en exergue plusieurs orientations de grain. Au final, treize échantillons sont extraits, quatre à 0° , quatre à 90° et cinq à 45° dont les dimensions sont décrites dans les schémas suivants :

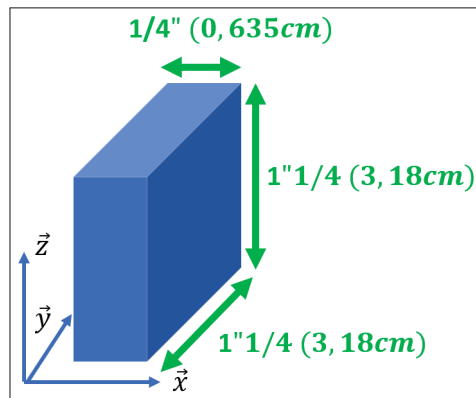


Figure 4.3 schéma d'un échantillon type

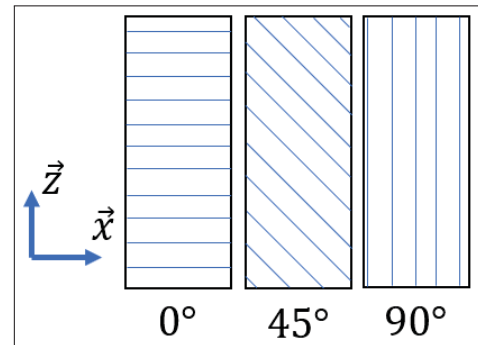


Figure 4.4 Schéma des grains suivant l'orientation de découpe

Les découpes orientées sont effectuées en deux temps. D'une part, via une scie à ruban manuelle en vue de faire une découpe "grossière" des parties intéressantes. Puis, à l'aide d'une fraiseuse numérique, les échantillons sont finalisés. Une fois les découpes faites, un échantillon de chaque famille d'orientation (0° , 45° et 90°) est réservé à la mesure de la taille des grains en vue de vérifier que l'orientation des découpes a bien affectée la microstructure. D'autre part, le reste des échantillons servira à la mesure de conductivité thermique en vue de montrer une évolution de la conductivité en fonction de l'orientation des grains.

dernier rinçage à l'éthanol est effectué avant un séchage complet à l'air chaud. Ce processus est similaire à tous les matériaux mais la "recette" de la solution acide diffère selon le produit que l'on souhaite étudier.

La révélation des joints de grains dans les alliages d'aluminium peut être difficile, en particulier pour certains alliages, notamment selon les conditions des traitements thermique. En règle générale, les systèmes alliés à faible teneur en alliage nécessitent une anodisation pour révéler la structure du grain avec une lumière à polarisation croisée (cf. la norme ASTM). Heureusement, ce n'est pas notre cas, en effet au-delà d'environ 6% d'éléments d'alliage, l'anodisation n'est pas nécessaire. Pour les nuances plus fortement alliées, la littérature développe plusieurs possibilités d'attaque à l'acide remarquable, avec succès, via le réactif de Keller, le réactif de Graft-Sargent, l'acide phosphorique aqueux à 10% (50C) ou un mélange de 2g de $NaOH$, 5g de NaF et 93ml d'eau (cf. la norme ASTM). Dans notre cas, le réactif de Keller est utilisé, c'est un choix justifié par l'expérience de Madame Neda Mohammadian mais surtout par le fait que ce dernier reste le plus utilisé par la communauté scientifique.

Microscope et ImageJ par Rasband (1997)

Pour mesurer la taille moyenne des grains, il faut obtenir, avec l'aide du microscope, différents plans de la surface. Le grossissement est primordial et doit être tel qu'il y ait assez de grains pour pouvoir effectuer une moyenne correcte, tout en évitant qu'il n'y en ait pas trop pour ne pas que les formules tirées de la norme ASTM soient altérées. L'intervalle prescrit par la littérature est que la base de données doit être composée d'environ 40 à 60 grains "majeurs". On entend par le qualificatif "majeur" des grains de tailles correctes, car certains grains peuvent avoir des tailles très inférieures à la moyenne issue du phénomène complexe de solidification (cf. les travaux de Kurz & Fisher (1984)).

Une fois la capture effectuée, la photo est transférée sur le logiciel ImageJ qui détecte les grains et détermine leurs aires en μm^2 . Une illustration est présente ci-dessous. A noter que l'ensemble des photos de surface est présenté en annexe (cf. annexe I). De plus l'annexe donne les tests

de grossissement sur un échantillon, afin de s'assurer que le grossissement fois 100 est le plus adapté.

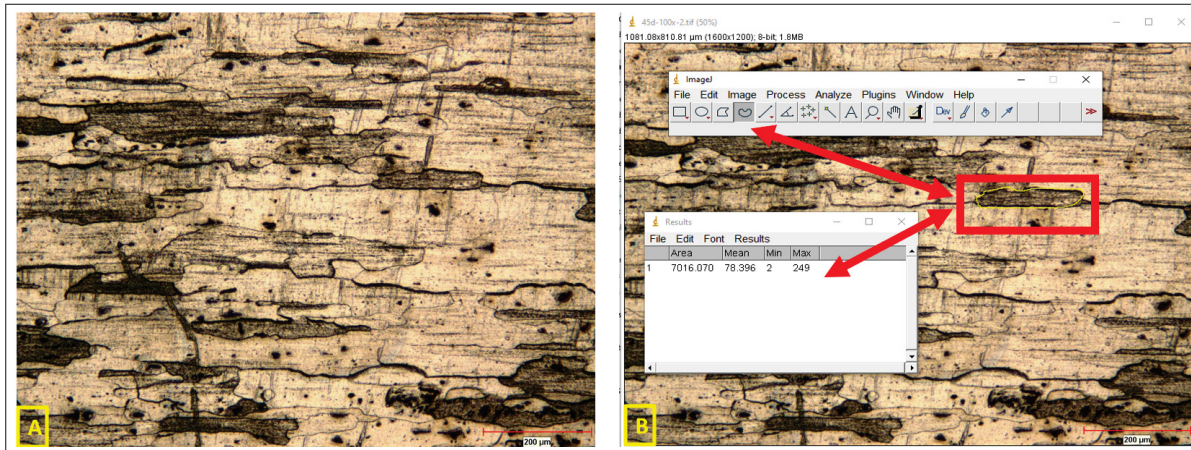


Figure 4.5 Illustration du processus de mesure d'aire de grain sur la surface d'un échantillon après capture par microscope (photo A à gauche). La caractérisation de l'aire est orchestrée par le logiciel ImageJ (photo B à droite)

Pour obtenir des résultats rigoureux, outre les mesures décrites plus haut, il faut capturer différentes zones de la surface. Ainsi pour chaque échantillon le calcul de la taille des grains a été effectué sur trois zones choisies aléatoirement. L'ensemble des données brutes est présenté sous forme de trois tableaux (un par famille d'échantillon) en annexe (cf. annexe I).

4.3.2 Résultats et discussions

L'ensemble des mesures d'aire de grains rassemblé en annexe sert de base pour calculer la taille des grains d'un échantillon selon la méthode planimétrique de la norme ASTM E112-12 (cf. ASTM (2014)). En vue de notre contexte (matériau, grossissement sélectionné, etc ...), la formule suivante est utilisée :

$$G = 3.321928 \log_{10}(N_A) - 2.954 \quad (4.1)$$

où G est la taille du grain selon la norme ASTM, $N_A = 1/A$ où A est l'aire d'un grain (attention, si l'on utilise cette formule, A doit être exprimée en mm^2). L'ensemble des conclusions est rapporté dans le tableau suivant :

Tableau 4.1 Tailles des grains selon la norme ASTM E112-12 en fonction de l'orientation de découpe où n représente le nombre granulométrique ASTM sur une échelle allant de 1, peu de grains, à 10, grand nombre de grains

Échantillon 0°			
Moyenne de l'aire des grains $10^{-2}.(mm^2)$	2.53	1.78	2.53
Taille des grains G (n)	2.35	2.86	2.35
G moyen	2.52		
Échantillon 45°			
Moyenne de l'aire des grains $10^{-2}(mm^2)$	1.56	1.29	0.92
Taille des grains G (n)	3.05	3.33	3.80
G moyen	3.39		
Échantillon 90°			
Moyenne de l'aire des grains $10^{-2}(mm^2)$	0.69	0.61	0.84
Taille des grains G (n)	4.23	4.41	3.95
G moyen	4.19		

Le point important ici est que, selon un sens de l'espace, il est clair que l'orientation de la découpe a permis de mettre en exergue différents contextes de microstructure et donc de tailles de grain. Ainsi lors des mesures de conductivité thermique (cf. seconde partie de cette campagne expérimentale) si une variation est observée, en fonction de l'orientation de la découpe, il sera alors possible d'affirmer que l'orientation granulaire impacte la conduction. En effet, sachant que chaque échantillon est issu de la même plaque, ces échantillons s'inscrivent tous dans un contexte physique similaire et, le seul paramètre qui les différencie est la découpe et donc implicitement l'orientation des grains dans le sens l'épaisseur.

4.4 Mesure de la variation de la conductivité thermique en fonction de l'orientation granulaire

4.4.1 Pré-traitement des échantillons

L'instrument de mesure utilisé impose à l'échantillon trois caractéristiques à respecter. Dans un premier temps, l'échantillon doit être de forme cylindrique avec une épaisseur supérieure à 1mm tout en étant faible face au diamètre qui, lui, doit être proche de 76mm . Deuxièmement, cet appareil est spécialisé dans les mesures de faible conducteur ce qui n'est pas le cas de l'échantillon de l'aluminium et ses alliages. Dernièrement, la surface de contact entre les différents disques de l'appareil et l'échantillon doit être la plus lisse possible. Ainsi pour respecter ce cahier des charges plusieurs étapes ont dû être mises en place.

La représentation finale de l'échantillon est schématisée ci-dessous avec comme point de départ un pavé d'aluminium dont les dimensions sont décrites dans la figure 4.3.

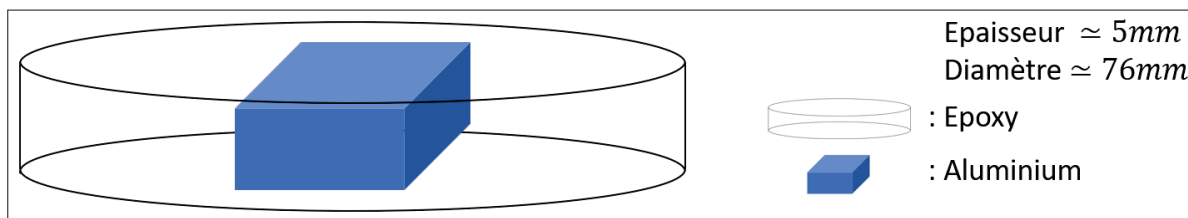


Figure 4.6 Schéma de l'échantillon final

Pour ce faire, le pavé d'aluminium est plongé dans une matrice d'époxy en vue de réduire la conductivité globale. Un passage à vide a été effectué afin d'éviter l'emprisonnement de bulles dans la matrice, ce qui aurait faussé les résultats de mesure. Une fois la pièce solidifiée, une découpe en deux temps est faite pour obtenir les dimensions imposées par le cahier des charges. Il a été utilisé, d'une part un tour numérique (tour à métal automatisé) en vue de réduire le diamètre et, d'autre part une fraiseuse pour amincir le disque. Enfin un polissage de surface est effectué, jusqu'à l'utilisation d'une feuille de taille "800 grains" de carbure de silicium,

suivant les mêmes procédures décrites précédemment. Voici quelques photos de l'évolution de l'échantillon :

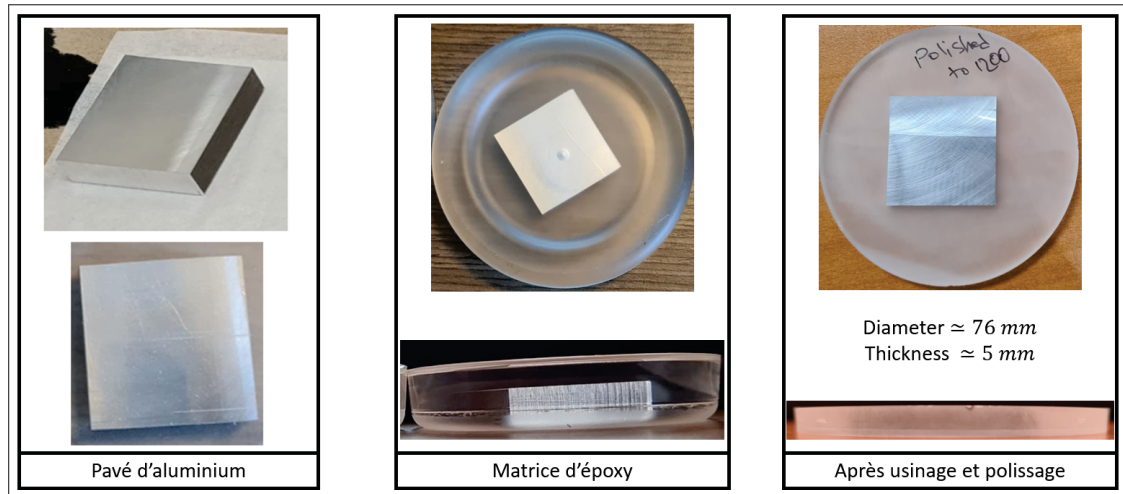


Figure 4.7 Photos de l'évolution de l'échantillon

Ces trois étapes ont permis successivement de respecter chaque point du cahier des charges cités plus haut et donc, la construction d'échantillons optimaux à nos objectifs de mesure. A noter que seule la conductivité de l'aluminium, dans le sens de l'épaisseur, a de l'intérêt. Ainsi un échantillon composé uniquement d'époxy est fabriqué pour pouvoir extraire la conductivité de l'aluminium des mesures. La présence de l'époxy réduit la conductivité globale du système. Cependant, il se peut que ce ne soit pas assez pour atteindre une conductivité mesurable par notre instrument. En effet, ce dernier ne fournit aucune valeur seuil pour la mesure et seuls des tests pourront nous permettre de déterminer si cet ajout d'époxy a suffi pour rentrer dans la zone d'utilisation de l'instrument.

4.4.2 Principes de mesure de la conductivité

Cette partie propose d'expliquer la théorie sur laquelle l'instrument de mesure se base. Selon la loi de Fourier sur le transfert de chaleur, le flux de chaleur par conduction se produit dans le sens de la diminution de la température, car une température plus élevée est associée à une énergie moléculaire plus importante. Cela s'exprime par l'équation suivante :

$$H = \frac{\kappa S_{sample}(T_2 - T_3)}{e} \quad (4.2)$$

où H est le taux de transfert de chaleur à l'état stationnaire, κ la conductivité thermique de l'échantillon, S_{sample} est la surface de la section transversale et $T_2 - T_3$ est la différence de température à travers l'épaisseur e de l'échantillon, en supposant que la perte de chaleur par les côtés des échantillons soit négligeable. Pour que la perte de chaleur par les côtés soit minimale, l'échantillon est conditionné sous la forme d'un disque mince avec une section transversale plus grande que celle exposée sur le bord. Le fait de garder x petit signifie également que l'appareil atteint un état stable plus rapidement.

En régime permanent, la chaleur conduite à travers l'échantillon d'essai, par seconde, sera égale à la chaleur rayonnée, par seconde, par la partie exposée du disque métallique.

$$Q = Mc \frac{dT}{dt} \frac{(r + 2h)}{2(r + h)} \quad (4.3)$$

où M est masse du disque métallique, C est la chaleur spécifique du disque métallique, h est la hauteur du disque métallique et r son rayon et enfin $\frac{dT}{dt}$ représente le taux de refroidissement à la température T_3 .

A l'état d'équilibre, $H = Q$ ce qui, après simplification, nous ramène à l'équation suivante :

$$\kappa = \frac{Mc \frac{dT}{dt}}{\pi r^2 (T_2 - T_3)} \frac{e(r + 2h)}{2(r + h)} \quad (4.4)$$

Cependant, les échantillons principaux sont pourvus de deux matériaux. Ainsi, pour extraire la conductivité uniquement de l'aluminium, deux points vont être utilisés pour palier ce problème. Tout d'abord, les travaux de Singh & Chaturvedi (2016) ont redémontré que la conductivité thermique de deux systèmes en parallèle est égale à la somme des deux conductivités. Ainsi, dans notre cas, la conductivité d'un échantillon composé de deux matériaux en parallèle est

égale à la somme des deux, dont leurs surfaces respectives S_{epox} et S_{alu} permettent de définir la proportion de chacun dans la conductivité globale κ_{sample} :

$$\kappa_{sample} = \frac{S_{alu}}{S_{sample}} \kappa_{alu} + \frac{S_{epox}}{S_{sample}} \kappa_{epox} \quad (4.5)$$

Soit,

$$\kappa_{alu} = \frac{S_{sample}}{S_{alu}} \left(\kappa_{sample} - \frac{S_{epox}}{S_{sample}} \kappa_{epox} \right) \quad (4.6)$$

Si l'époxy permet de réduire suffisamment la conductivité pour l'instrument, alors nous pourrions apporter des réponses supplémentaires à la problématique de ce projet. A contrario, il faudra alors envisager un autre instrument de mesure, tout en apportant quelques discussions autour des résultats attendus par manque de temps.

4.4.3 Résultats et discussions

L'ensemble des variables d'entrée, pour la mesure de conductivité thermique et la conductivité finale des échantillons d'aluminium en fonction de l'orientation de découpe, est présenté dans le tableau 4.2 ci-dessous.

D'après le site Matweb (2011) (se basant sur les livres de Bauccio et al. (1993); Committee et al. (1992); Holt (1996)) les valeurs attendues devraient être proches de $121 W m^{-1} K^{-1}$ car notre alliage est à l'état T351. Cet état renvoie au traitement qu'a subi la plaque avant son achat, soit un traitement thermique de solution, traitement à froid (écrouissage) puis un vieillissement naturel.

Malheureusement, les mesures renvoient toutes à des valeurs de conductivité proche de l'unité, ce qui est physiquement très peu probable. Nous pouvons donc conclure que cette méthode de mesure n'a pas permis d'accéder à des valeurs cohérentes. Il faut donc trouver une alternative.

Tableau 4.2 Tableau répertoriant les variables d'entrée pour la mesure de conductivité thermique et la conductivité finale des échantillons d'aluminium en fonction de l'orientation de découpe

Échantillon d'époxy			
Épaisseur (<i>mm</i>)	9.044	Diamètre (<i>mm</i>)	77
T_1 ($^{\circ}C$)	37.3	T_2 ($^{\circ}C$)	36.7
T_3 ($^{\circ}C$)	32.5	T_4 ($^{\circ}C$)	24.3
Temps de mesure	4h47min		
Conductivité ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	0.349		
Échantillon 0°			
Épaisseur (<i>mm</i>)	5.015	Diamètre (<i>mm</i>)	77
S_{epox}/S_{sample}	0.79	S_{alu}/S_{sample}	0.21
T_1 ($^{\circ}C$)	36.4	T_2 ($^{\circ}C$)	35.6
T_3 ($^{\circ}C$)	34.8	T_4 ($^{\circ}C$)	24.2
Temps de mesure	4h46min		
Conductivité mesurée ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	1.228		
Conductivité aluminium ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	4.535		
Échantillon 45°			
Épaisseur (<i>mm</i>)	4.968	Diamètre (<i>mm</i>)	77
S_{epox}/S_{sample}	0.79	S_{alu}/S_{sample}	0.21
T_1 ($^{\circ}C$)	36.4	T_2 ($^{\circ}C$)	35.8
T_3 ($^{\circ}C$)	34.8	T_4 ($^{\circ}C$)	24.2
Temps de mesure	4H46min		
Conductivité mesurée ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	1.071		
Conductivité aluminium ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	3.787		
Échantillon 90°			
Épaisseur (<i>mm</i>)	5.008	Diamètre (<i>mm</i>)	77
S_{epox}/S_{sample}	0.79	S_{alu}/S_{sample}	0.21
T_1 ($^{\circ}C$)	36.3	T_2 ($^{\circ}C$)	35.5
T_3 ($^{\circ}C$)	34.6	T_4 ($^{\circ}C$)	24.1
Temps de mesure	4h46min		
Conductivité mesurée ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	1.080		
Conductivité aluminium ($W\dot{m}^{-1}\dot{K}^{-1}$)	3.830		

Néanmoins la conductivité de l'aluminium calculé diminue de 15% entre l'échantillon à 0° et celui à 90° ce qui pointe dans la direction de nos hypothèses. Malgré le fait que les valeurs soient questionnable, on semble observer une diminution de la conduction en parallèle de la

diminution de la taille des grains, décroissance qui est sujet à un plafonnement vers les 45° ce qui peut expliquer la proximité entre les deux dernière valeurs.

4.4.4 Nouvel échantillon

Une question se pose alors, est-il possible de créer les échantillons adéquats ? En effet, le poids (en termes de moyenne pondérée) de l'aluminium est trop important sur nos échantillons (21%). Il faut donc théoriquement le réduire afin de pouvoir atteindre des mesures finales proches de $120 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Reprenons notre équation (4.6) en notant p_{alu} le poids de l'aluminium et p_{epox} celui de l'époxy. Si l'on considère que $\kappa_{sample} = 1 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, $\kappa_{sample} = 120 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ et $\kappa_{epox} = .0349 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ alors nous obtenons le système suivant (à gauche), résolu à droite :

$$\begin{cases} 1 = 120p_{alu} + 0.349p_{epox} \\ 1 = p_{alu} + p_{epox} \end{cases} \quad p_{alu} = 0.006 = 0.6\% \quad (4.7)$$

Ainsi, si l'on souhaite adapter notre échantillon, il faudrait que l'aluminium représente moins de 0.6% de la surface pour que l'instrument des disques de Lee fonctionne de manière optimale, soit un carré de côté d'environ 5 mm. Outre la difficulté de fabriquer un tel échantillon, on peut se questionner sur l'impact que va représenter notre pavé d'aluminium sur ce nouveau type d'échantillon. Il sera certainement négligeable. Finalement il est préférable de se tourner vers un tout nouveau protocole de mesure.

4.5 Conclusion

La mise en place d'un nouveau modèle d'un phénomène physique connu par l'ajout de variables inédites nécessite une justification rigoureuse. Cette dernière peut prendre la forme de campagne de simulations numériques complexes, comme nous avons pu le voir dans les chapitres précédents. Cependant, il n'est pas possible de se priver d'une campagne expérimentale associée. En effet, chaque modèle innovant a besoin de son lot de mesures issues d'expérimentations réelles pour prouver la pertinence physique du modèle proposé. C'est dans ce but qu'une campagne

expérimentale a été menée dans ce projet. Après avoir débattu et conclu que le paramètre d'orientation granulaire représente la balance optimale entre complexité de mise en oeuvre et intérêt expérimental pour valider le modèle, un protocole a été mis en place. De nombreux défis se sont présentés autour des sujets de fabrication d'échantillons optimaux, de mesures de taille de grains pour vérifier que l'orientation granulaire a bien été prise en compte. Après de nombreuses réflexions, avec mon collègue Alain Picard et l'aide d'experts comme Anthony Remington et Neda Mohammadian, l'expérience a pu être menée utilisant l'appareil des disques de Lee.

Malheureusement cette campagne a fait face aux limites de mesure intrinsèques à l'instrument fondé sur la théorie des disques de Lee. En effet, les mesures finales relevées pour nos échantillons d'aluminium ne sont pas être cohérentes physiquement. La littérature rapporte des valeurs de conductivité thermique proches de $120 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et nos mesures renvoient à des niveaux de conductivités de l'ordre de l'unité. Néanmoins, une campagne expérimentale reste souvent incertaine jusqu'au moment des mesures et, un projet scientifique est régulièrement confronté aux aléas expérimentaux. Il est donc nécessaire, si le projet se poursuit de se tourner vers un tout nouveau protocole.

CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Ces dernières années, l'émergence rapide des modèles dits multi-échelles, proposant de rassembler dans une même représentation des caractéristiques macroscopiques et microscopiques, démontre de l'intérêt grandissant de la communauté scientifique pour développer une compréhension plus globale des phénomènes physiques. Que ce soit dans la perspective d'une meilleure connaissance purement scientifique ou, par intérêt industriel dans le but d'optimiser le processus de production vis-à-vis de critères socio-économiques, l'intégration multi-échelle offre de nouvelles perspectives qui semblent prometteuses.

C'est dans ce contexte que s'inscrit le modèle multi-échelles proposé dans ce rapport, dont l'objet est la conduction thermique dans le contexte particulier des matériaux métalliques ayant subi un écrouissage. Notamment, il s'agit d'étudier l'impact de propriétés telles que les orientations structurales à l'échelle microscopique sur les champs de température spatio-temporels à l'échelle macroscopique. Vis-à-vis du contexte posé, le travail présenté apporte des éléments de réponse et apporte aussi son lot de réflexions autour de la conception des matériaux métalliques dans les domaines de l'aéronautique et du spatial. En effet, le modèle repose sur de nombreuses hypothèses liées aux contextes des métaux. Notamment, le modèle s'appuie sur la définition de grandeurs à l'échelle atomique comme le LPME et le temps de relaxation. Le modèle proposé tient également compte de la forme des grains et de son évolution notamment lorsque le matériau est conditionné en phase de fabrication des pièces des aéronefs. Finalement, le modèle développé exploite la grande majorité des paramètres de microstructure intrinsèques au matériau, à travers une équation différentielle non linéaire de diffusion anisotrope. Découlant d'une solide étude bibliographique, le modèle présenté est complet mais également synonyme de difficulté d'implémentation non-négligeable. Comme nous avons pu le voir, un tel modèle implique en effet pour sa simulation de prendre en compte des méthodes numériques robustes face à un contexte fortement non-linéaire et anisotrope.

Ainsi, les caractères anisotrope et non-linéaire du modèle nous ont conduits à considérer plusieurs méthodes numériques, dotées d'une précision croissante. Cela afin de s'adapter au mieux au potentiel "chaos anisotrope", induit par les cas extrêmes où l'orientation granulaire et/ou l'orientation atomique sont toutes les deux considérées comme des grandeurs aléatoires. Nous avons notamment étudié l'équilibre entre fiabilité et complexité algorithmique de chaque méthode. Ainsi, la méthode EEI (Euler Explicit Interpolated) s'avère être la meilleure option des différentes méthodes étudiées dans ce mémoire.

Tout cela a permis de mettre en place des campagnes numériques avancées afin d'apporter des réponses à la problématique posée en introduction. Nous montrons notamment que, finalement, parmi les différents paramètres définissant la microstructure modélisée seul l'orientation des grains possède un impact concret. On peut notamment remarquer que, dans les tests présentés dans ce rapport, des divergences thermiques allant jusqu'à 66 K ont été observées. Par ailleurs, nous avons montré que l'évolution du champ de température, qui varie d'une carte à l'autre, est directement liée à la présence de barrières thermiques, les joints de grains, et à leur nombre rencontré par le champ de température lors de sa propagation dans le matériau. C'est à travers cette observation qu'il est possible d'affirmer que la microstructure peut avoir son importance dans le phénomène de conduction thermique si, tout du moins, le matériau présente des caractéristiques qui dépendent de l'espace. En effet, dans notre contexte, c'est la forme anisotrope des grains (rectangulaire en 2D) qui crée ces différences macroscopiques.

Cependant des observations réelles, à travers des expériences, sont nécessaires afin de valider les conclusions présentées plus haut. C'est dans ce but qu'une campagne expérimentale se basant sur la théorie des disques de Lee a été menée. Cependant, malgré une volonté forte de construire des échantillons optimaux, les mesures de conductivité thermique en fonction de l'orientation granulaire obtenues ne semblent pas valides physiquement. Une sensibilité a bien été observée, se traduisant par une tendance décroissante intéressante en fonction de l'augmentation du

nombre de barrières thermiques rencontrées dans le sens de la mesure mais dans une gamme de valeur non-réaliste. Néanmoins, les campagnes expérimentales sont régulièrement associées à de nombreux échecs. Le point important est que, dans notre cas, il n'altère en rien nos conclusions précédentes. Ainsi, le chapitre expérimental se conclut sur la proposition d'un nouveau protocole qui a déjà présenté, des résultats remarquables dans la littérature (et dans notre gamme de conductivité thermique). Cette méthode, basée sur l'appareil LFA 457 MicroFlash®, sera menée à la suite de ce projet, en vue de produire un article scientifique.

Pour conclure, ce projet représente une première approche sur un domaine de réflexion inexploré par la communauté scientifique (en témoigne l'absence de littérature en lien direct avec la conduction thermique et les notions d'orientation de microstructure). Ainsi, outre les nombreuses conclusions remarquables, il existe de nombreuses perspectives que la seconde partie de cette section propose de présenter.

RECOMMANDATIONS

Perspectives sur le modèle

Si le phénomène de conduction présente un caractère fortement anisotrope alors, dans ce contexte, il peut être déterminant pour certaines applications. Une première perspective intéressante serait d'étendre cette réflexion aux matériaux composites ou aux matériaux semi-conducteurs pour lesquels les variables citées précédemment se distribuent différemment. De tels contextes pourraient sûrement tirer parti de l'anisotropie du phénomène de conduction, afin de mieux réguler les transferts de chaleur. De plus, la forme des grains peut également fortement varier, d'un matériau à l'autre, mais surtout d'un traitement à un autre, ce qui devrait également ouvrir sur de nouvelles perspectives. Il serait notamment intéressant de regarder si d'autres contextes (différents d'une élongation des grains) existent. Enfin, la réflexion des phénomènes au bords n'est que peu abordée. Si l'on pouvait intégrer les phénomènes de perte de chaleur aux extrémités dans le modèle cela donnerait lieu à des observations numériques encore plus réalistes et faciliterait aussi la mise en place d'expériences.

Perspectives sur les méthodes numériques

Il existe théoriquement une infinité de méthodes numériques. Ainsi d'autres approches peuvent être envisagées, selon les besoins, sur le plan de la précision et de la complexité. D'une part, vis-à-vis de l'approximation de la dérivée temporelle, la mise en place de méthodes d'ordre plus élevé (Runge kunta 2, Runge kunta 4, etc.) pourrait être envisagée. D'autre part, comme il a été dit plusieurs fois dans le rapport, les méthodes explicites nécessitent de vérifier certaines contraintes pour assurer leur stabilité. Notamment, il est important de contraindre le choix du pas d'échantillonnage spatial, si l'on souhaite simuler un phénomène à temps long, de plusieurs secondes, ou à l'inverse, le pas d'échantillonnage en temps si l'on souhaite simuler un important champ spatial ou avoir une précision spatiale très fine. Pour résoudre cela, des

méthodes dites "implicites", inconditionnellement stables, pourraient permettre de mettre en place des simulations avec une plus grande précision. Cependant, allier une équation non-linéaire avec une méthode implicite est un défi scientifique à part entière. On peut notamment citer les récents travaux de Bekkouche (2018) bien que la mise en place de telle méthode nécessite d'ajouter de nouvelles hypothèses et il faudra être attentif à leurs compatibilité avec notre modèle. Néanmoins, si de telles méthodes sont envisageables, nous pourrions envisager de simuler des cas où les mailles sont de l'ordre de grandeur de la taille des grains. Enfin, concernant les méthodes de simulation, il serait intéressant de comparer notre démarche à des approches de type éléments finis, toujours dans le but d'étayer nos résultats mais aussi d'en extraire une simulation la plus optimale vis-à-vis de la modélisation proposée.

Perspectives sur les campagnes numériques

De nombreux résultats ont été présentés dans ce projet. Maintenant, l'interprétation de ces résultats, autour de l'importance de la microstructure sur le profil thermique, dépend fortement de l'attente. Si le but est d'être le plus proche de la réalité possible, alors toute mise en lumière de comportement différent est importante. La réponse sur l'impact est alors sans conteste affirmative. A contrario, si le but est l'optimisation des procédés industriels alors il faut alors établir, à partir de quelles valeurs "seuil", les différences de températures ont un impact sur un processus de fabrication et/ou de processus de traitement des pièces. De telles valeurs "seuil" sont du ressort de l'industriel mais il est sûr que pousser la réflexion de ce projet avec la collaboration d'un expert industriel pourra améliorer la portée de nos conclusions. Une dernière perspective est la prise en compte d'un système de chauffe différent comme, par exemple, via un laser (avec différents profils d'intensité). Les relations laser-matière sont omniprésentes dans les traitements aéronautiques ainsi que spatiaux. Ainsi, savoir si les différences sont plus ou moins importantes dans ce contexte sera un axe d'étude sûrement d'intérêt pour les entreprises qui évoluent dans de tels domaines.

Perspectives sur les campagnes expérimentales

Tout d'abord, la mesure de conductivité thermique a toujours a toujours suscité un grand intérêt de la communauté. On peut notamment citer les travaux de Touloukian, Powell, Ho & Klemens (1970) qui regroupent l'ensemble des techniques développées à cette période. Evidemment, l'évolution scientifique a permis l'émergence d'une nouvelle méthode qui semble plebiscitée par la communauté scientifique. Il s'agit d'une méthode exploitant un système laser flash proposé par l'appareil LFA 457 MicroFlash® (lien présent dans la bibliographie : Netzsch (2006)). D'après le manuel de cet appareil, des mesures de conductivité thermique peuvent être effectuées entre $0.1 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $2000 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ encadrant avec certitude la conductivité de notre échantillon et même de notre pavé d'aluminium seul. Pour preuves, il a déjà été utilisé comme moyen de mesures dans plusieurs articles rédigés par Min, Blumm & Lindemann (2007), Shepard, Blumm & Lindemann (2006) et Danilova-Tretiak, Nikolaeva, Yeuseyeva & Tanaeva (2017). Dans ces articles, il y fait mention de mesures allant de $25 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ à $120 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ce qui correspond à l'ordre de grandeur attendu dans notre contexte. En complément et malgré la difficulté, la mise en place d'un protocoles visant à étudier d'autres paramètres de la microstructure serait sûrement pertinente. En dépit des simulations numériques qui tendent à montrer un impact négligeable, une expérience qui prouve que l'orientation atomique et/ou que la différence d'orientation, de part et autres de la frontière de grains, n'impacte que très peu la conductivité permettrait de consolider les conclusions actuelles. D'autre part, bien que le modèle se concentre sur un contexte précis, il est intrigant de connaître le comportement que d'autres matériaux auraient face à ces problématiques (pas seulement d'autres métaux mais aussi d'autre types tels que les composites ou les semiconducteurs).

ANNEXE I

INFORMATIONS SUPPLÉMENTAIRES SUR LE CHAPITRE 4

1. Détails supplémentaires sur La plaque d'aluminium 2024

Cette partie développe l'ensemble des détails concernant la plaque d'aluminium 2024 fournie par la compagnie de production *McMaster-Carr®*. Du fait de la taille excessive du tableau, il est donné dans le rapport à la page suivante.

2. Détails supplémentaire sur La résine d'époxy

1. Épaisseur de coulée : Résine époxy de qualité supérieure pour coulée profonde. Versez jusqu'à 2" à la fois pour une libération optimale des bulles.
2. Temps de durcissement : \approx 2.5 jours.
3. Utilisation : Moulage. Notre résine de coulée est un polymère transparent à 100% de solides, à deux composants. Faible viscosité.
4. Sécurité : Résine époxy sûre, sans odeur et à faible teneur en COV pour tout type de travaux.
5. Conformité : Approuvée par l'Agence canadienne d'inspection des aliments.
6. Exigences : Répond aux exigences de la FDA et de l'USDA.
7. Rapport de mélange en volume : 2A/1B
8. Résistance : Ce produit est résistant aux rayures, à l'eau et ne présentera pas de rougissement ni de transpiration dans des conditions de forte humidité.

3. Compléments photos des surfaces de grains

Deux pages sont dédiées aux différentes photos capturées au microscope optique. Le premier groupe représente l'ensemble des surfaces étudiées (3 surfaces par échantillon) avec un grossissement à 100. Le second groupe représente les tests de grossissement sur l'échantillon de la famille zéro degré.

4. Données brutes complémentaires de l'aire des grains présents sur les captures du microscope

A la suite des photos des surfaces, trois tableaux sont présentés. Chacun regroupe l'ensemble des données brutes liées à une famille d'échantillons.

5. Preuves des paramètres d'entrées pour le calcul de la conductivité thermique

Différents paramètres d'entrée pour le calcul de la conductivité thermique représentent des points clefs du cahier des charges et impacte directement la formule de conductivité thermique (cf. eq. (4.4)). Ainsi cette section propose une succession de preuves de ces dernières sous formes :

1. de photos extraites de l'instrument des disques de Lee. Pour les températures T_1 à T_4 , pour le temps de mesure et bien sur la conductivité finale ;
2. de photos extraites de l'instrument des mesures de type pied à coulisse. Pour l'épaisseur de l'échantillon ;
3. de photos extraites de calculs géométriques à partir du tracer de deux médiatrices (le pied à coulisse n'étant pas optimal pour des calculs de diamètre) pour le diamètre de l'échantillon.

Enfin, connaissant le diamètre D de l'échantillon et le coté c du pavé d'aluminium, les rapports de surface sont calculés via les équations suivantes :

$$\frac{S_{alu}}{S_{sample}} = \frac{4c^2}{\pi D^2} \quad \left| \quad \frac{S_{epox}}{S_{sample}} = \frac{4 \left(\frac{\pi D^2}{4} - c^2 \right)}{\pi D^2} \quad (\text{A I-1})$$

Tableau-A I-1 Informations complémentaire sur la plaque d'aluminium 2024

Matériau	Aluminium 2024
Forme	Plaques et barres
Type de forme	Plaques
Épaisseur	11/4"
Tolérance d'épaisseur	[−0.039; 0.039]"
Note de tolérance	Standard
Largeur	6"
Tolérance sur la largeur	[−1/16; 1/16]"
Longueur	6"
Tolérance sur la longueur	[−1/16; 1/16]"
Limite d'élasticité	41 000 <i>psi</i>
Fabrication	Laminage à froid
État	T351
Traitement thermique	Trempé
Dureté	Brinell 120
Note de Dureté	Moyenne
Traitable thermiquement	Oui
Certificat	Numéro de lot traçable
Apparence	Lisse
Plage de température	[−320; 300]° <i>F</i>
Spécifications Met	ASTM B209
Propriétés de performance de l'aluminium	Facile à usiner
Tolérance de planéité	Non évalué
Allongement	15%
Composition de la matière	
Aluminium	90.75 – 94.7%
Chrome	0 – 0.1%
Cuivre	3.8 – 4.9%
Fer	0 – 0.5%
Magnésium	1.2 – 1.8%
Manganèse	0.3 – 0.9%
Silicium	0 – 0.5%
Titane	0 – 0.15%
Zinc	0 – 0.25%
Autres	0 – 0.15%
RoHS	Conformité RoHS 3 (2015/863/EU)
REACH	Conformité REACH (EC 1907/2006) (25/06/2020, 209 SVHC)
DFARS	Métaux Spéciaux COTS-Exempté
Pays d'origine	États-Unis
USMCA Qualifying	Non
Annexe B	760612.3015
ECCN	EAR99



Figure-A I-1 Photos capturées au microscope optique représentant les surfaces étudiées avec un grossissement à 100 (échelle similaire pour chaque capture)

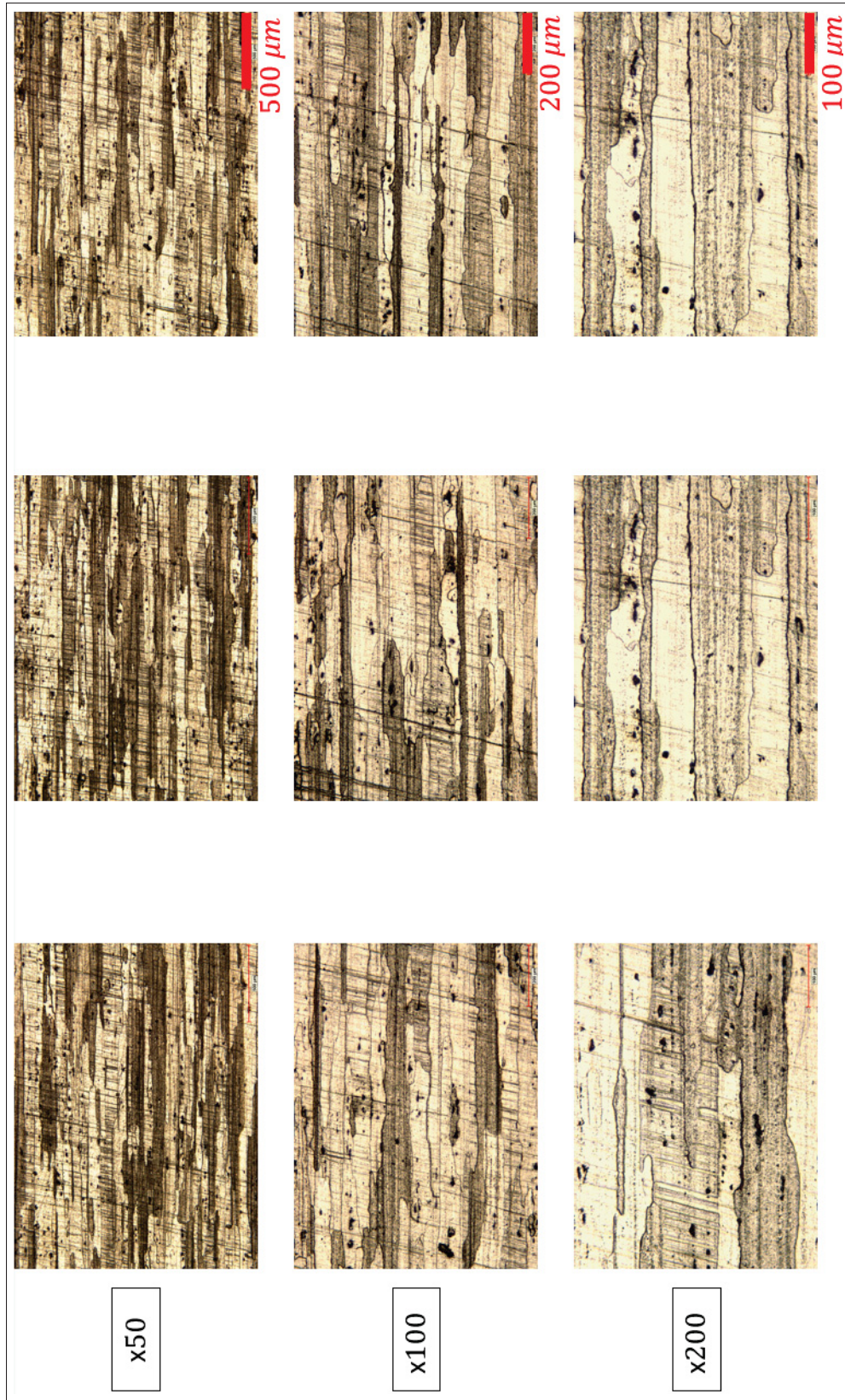


Figure-A I-2 Photos capturées au microscope optique représentant les focus étudiés avec un grossissement variant de 50 à 200 sur l'échantillon 0° (échelle similaire pour chaque grossissement)

Tableau-A I-2 Données brutes complémentaires sur les mesures d'aire de grains sur l'échantillon 0°

	0° – 100x – 1	0° – 100x – 2	0° – 100x – 3
Grain n°	Aire [μm^2]		
1	18711,111	8308,889	15576
2	24085,778	5430,667	5462,222
3	6284,889	10100,444	43882,222
4	20750,222	1749,333	37355,556
5	38086,222	8229,333	27412
6	21651,111	1286,222	10070,667
7	2653,778	2144,889	18146,667
8	18977,778	2933,333	23457,778
9	31348,444	10715,556	2969,778
10	21649,333	25328,444	7138,222
11	21649,333	42993,333	79996,444
12	7710,222	13704,889	8610,222
13	6949,333	7181,333	10080
14	69403,111	62417,778	7227,111
15	36401,333	17785,333	25839,556
16	6161,333	29548	26703,556
17	4488,889	14410,667	10644,444
18	25081,778	5176,889	13498,667
19	41220	29067,111	15018,667
20	2396	10416,444	11004,889
21	38205,778	42863,556	33524
22	8302,667	5823,111	4047,556
23	74816,889	55552,444	13556,889
24	59120	15422,667	2881,333
25	34323,111	716	52971,556
26	15409,333	3922,222	34631,111
27	1020	8640,889	1787,111
28	50992	4496,444	5908,889
29		5159,111	30592,444
30		3127,556	50449,778
31		25934,667	81499,556
32		52269,333	5594,222
33		6039,556	18781,333
34		24567,111	93637,778
35		45000	2338,222
36		3444	77074,667
37		5522,667	
38		34792,444	
39		28557,778	
40		35003,111	
41		27837,333	
42		2094,222	

Tableau-A I-3 Données brutes complémentaires sur les mesures d'aire des grains sur l'échantillon 45° (partie 1)

Grain n°	0° – 100x – 1	0° – 100x – 2	0° – 100x – 3
	Aire [μm^2]		
1	8463,652	36627,1	4700,689
2	32336,726	25378,47	958,515
3	13676,245	10526,388	2659,34
4	8457,346	30641,435	5355,164
5	7462,391	5616,326	13023,738
6	21651,111	1286,222	10070,667
7	23432,123	7142,075	5196,613
8	2987,569	22258,035	43348,948
9	834,609	3620,343	11603,081
10	5758,941	10598,064	1980,091
11	40884,605	2537,893	17011,396
12	9632,916	3432,706	15032,656
13	29244,212	2851,991	1889,104
14	7553,824	34954,803	9030,674
15	5782,812	69254,474	3601,189
16	10039,636	8115,413	49386,965
17	10803,982	6029,492	34405,207
18	1189,082	2868,426	4948,426
19	8949,194	947,316	0
20	1680,029	17317,385	13321,922
21	4578,867	31683,711	2230,981
22	52951,986	51428,05	7510,923
23	2744,347	51528,488	37129,409
24	17340,33	32404,127	2152,606
25	2653,815	10047,023	1541,822
26	17306,549	10044,284	4246,656
27	2864,156	10111,852	4016,936
28	11807,945	13668,28	15587,136
29	13287,992	2270,362	6290,708
30	7914,152	14771,731	3412,008
31	21365,643	3451,881	7176,704
32	33648,32	0,457	7043,827
33	7532,655	22198,229	18658,169
34	9910,819	10520,909	17861,808
35	84000,54	8532,688	35281,294
36	1182,326	1356,83	3817,396
37	17331,772	9934,259	2548,984
38	27696,604	4094,686	5386,694
39	57625,89	6573,229	3757,488
40	8790,649	13367,878	22631,863
41	5505,81	1608,382	1539,57
42	26881,362	10625	464,844
43	43473,561	3388,879	760,326
44	4275,741	4045,836	2476,915
45	9705,432	19173,667	5238,953
46	1940,816	14252,191	330,616
47	2022,791	685,72	8339,264
48	29792,361	1395,179	1485,519
49	20026,574	1324,416	5793,883
50	8867,219	967,86	1386,874

Tableau-A I-4 Données brutes complémentaires sur les mesures d'aire des grains sur l'échantillon 45° (partie 2)

Grain n°	0° – 100x – 1	0° – 100x – 2	0° – 100x – 3
	Aire [μm^2]		
51	10655,797	20325,055	65667,312
52	7786,235	2931,885	2056,664
53	15522,926	11575,511	2056,664
54		3612,126	2539,976
55		4699,598	11095,446
56		5327,337	41885,05
57		16867,239	606,279
58		9673,119	2397,64
59		9542,093	6046,124
60			15732,174
61			6773,118
62			1905,32
63			4249,809
64			753,119
65			5447,953
66			1131,03
67			22063,421
68			7448,764
69			38429,35
70			25710,554
71			5024,999
72			15013,738
73			6138,913
74			4428,179
75			699,518
76			1468,402
77			1602,18
78			1685,51
79			20159,903
80			13450,745
81			1076,528
82			1117,968
83			11028,332
84			2468,357
85			2544,03
86			11800,82
87			16240,71
88			6160,533
89			5260,123
90			1983,694
91			3418,765
92			26850,142
93			2212,963
94			1827,395
95			890,5
96			2363,857
97			902,212
98			5497,5
99			2012,972

Tableau-A I-5 Données brutes complémentaires sur les mesures d'aire de grains sur l'échantillon 90° (partie 1)

Grain n°	0° – 100x – 1	0° – 100x – 2	0° – 100x – 3
	Aire [μm^2]		
1	10024,323	6851,695	5007,883
2	4451,601	5114,884	6941,579
3	1136,886	5828,63	1350,84
4	1626,954	4168,259	6208,729
5	3267,871	4224,701	2613,846
6	2524,211	4866,895	4769,605
7	12619,702	3565,619	769,335
8	14914,643	5128,661	3516,959
9	3378,226	2602,107	1758,93
10	2201,252	986,178	16287,104
11	3547,138	3357,629	4019,188
12	3218,323	5185,103	4785,37
13	13793,523	1191,947	9652,268
14	20412,594	3588,285	7694,698
15	10587,811	3388,294	7060,943
16	900,41	22531,443	3623,711
17	3621,008	3581,174	9151,84
18	4216,477	13544,287	22684,564
19	9268,501	7390,783	28432,953
20	10534,661	1163,504	20336,021
21	19085,627	11807,031	13525,066
22	17227,602	1216,39	4288,095
23	3266,069	4492,689	6301,968
24	3905,68	7207,68	14760,146
25	10556,281	8410,737	6572,677
26	2470,159	4929,559	3282,735
27	1938,201	763,966	14109,725
28	2506,644	1827,474	1440,025
29	5633,08	997,733	7261,835
30	12344,489	2630,105	1482,816
31	8206,838	7299,231	12722,4
32	3294,897	1356,384	9649,565
33	6299,266	9080,041	4094,41
34	1482,366	9912,893	2963,83
35	11864,781	7822,763	16265,033
36	1643,169	33073,197	2298,996
37	6324,94	2889,205	1224,269
38	1971,983	23599,396	57065,448
39	7754,155	16472,601	25628,575
40	696,365	931,959	12617,9
41	760,777	2798,098	7203,73
42	963,02	4148,26	3144,003
43	1480,114	2696,325	1876,492
44	11555,786	3132,305	3398,496
45	8211,792	580,863	6180,352
46	12410,702	4858,895	16749,246
47	6518,175	14503,8	1742,714
48	1386,424	2331,452	1908,473
49	11481,014	844,407	11017,522
50	9483,807	3972,712	12199
51	3783,163	1688,814	7009,144
52	7501,013	3048,309	974,731

Tableau-A I-6 Données brutes complémentaires sur les mesures d'aire de grains sur l'échantillon 90° (partie 2)

	$0^\circ - 100x - 1$	$0^\circ - 100x - 2$	$0^\circ - 100x - 3$
Grain n°	Aire [μm^2]		
53	250,439	2679,436	1990,451
54	2898,518	7428,559	7915,86
55	16405,117	3920,715	15081,753
56	1596,775	413,315	10971,578
57	27952,795	5955,291	22744,471
58	35203,369	3582,952	14141,705
59	18750,056	5733,967	12598,532
60	4865,547	667,97	17017,251
61	16289,356	40778,188	6574,479
62	8082,969	7848,54	31547,678
63	15229,945	8595,618	2371,064
64	5766,857	1553,709	4299,356
65	1447,683	2694,102	1988,649
66	762,128	12622,106	1653,98
67	2766,542	2648,327	1179,226
68	869,33	2638,549	2569,704
69	5806,045	5825,519	8913,562
70	11462,547	22298,565	8972,569
71	1897,212	23217,635	2002,162
72	4558,353	1303,498	18079,366
73	10475,204	7537,443	27003,739
74	3218,774	2942,091	17235,71
75	1704,428	1095,062	5137,606
76	16936,624	9195,591	2505,293
77	5409,666	3523,399	3777,758
78	13815,143	1547,487	10313,499
79	1606,234	6117,95	8205,937
80	8742,849	6840,585	1116,166
81	1935,949	1529,265	3445,791
82	4835,368	1540,376	3154,362
83	8761,317	12462,557	720,688
84	3557,497	574,641	10284,672
85	3204,811	245,322	1183,73
86	3836,764	8575,619	1220,666
87	16210,981	21672,37	3281,834
88	8217,648	1064,842	958,065
89	1963,425	1451,935	1191,838
90	1381,469	3074,974	2995,361
91	2323,319	2187,458	14021,891
92	1162,56	9266,699	15253,367
93	2067,474	6658,371	2958,425
94	394,577	3433,625	1003,108
95	569,794	380,428	
96	12308,905	3943,825	
97	18727,084	856,406	
98	4035,854	4155,815	
99	963,02	6272,61	
100		2191,014	
101		231,101	
102		15092,663	
103		7956,98	



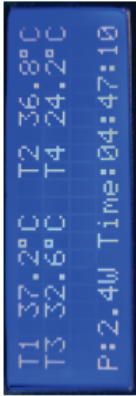








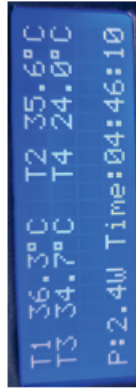
<p>Epoxy // temps : 4H 47min</p> 		
<p>0 degré // temps : 4H46min</p> 		
<p>45 degré // temps : 4H46min</p> 		
<p>90 degré // temps : 4H46min</p> 		

Figure-A I-3 Photos extraites de l'instrument de mesure des disques de Lee

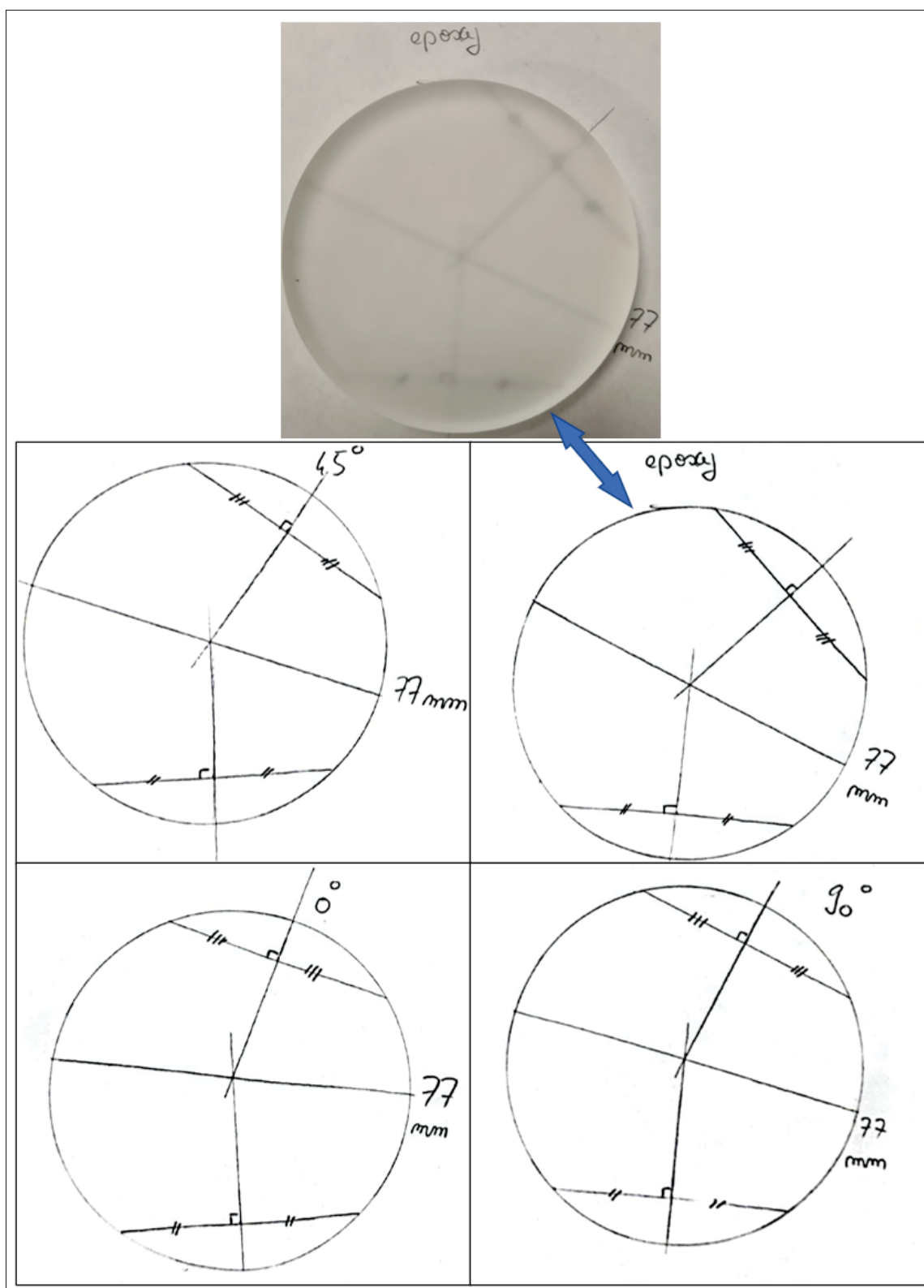


Figure-A I-4 Preuves des valeurs de diamètres

LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- AluminiumFrance. (1994). Aluminium France [site WEB]. Repéré <https://www.aluminium.fr/>.
- AluQuébec. (2017). L'aluminium dans l'aéronautique. Repéré <https://aluquebec.com>.
- Angster, S., Gowda, S. & Jayaram, S. (1996). Using VR for Design and Manufacturing Applications : A Feasibility Study. *International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*, 97621, V006T06A077.
- Anisimov, S. I. & Rethfeld, B. (1997). Theory of ultrashort laser pulse interaction with a metal. *Nonresonant Laser-Matter Interaction (NLMI-9)*, 3093, 192–203.
- Ashby, S. F., Bosl, W. J., Falgout, R. D., Smith, S. G., Tompson, A. F. & Williams, T. J. (1999). A Numerical Simulation of Groundwater Flow and Contaminant Transport on the CRAY T3D and C90 Supercomputers. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 13(1), 80-93.
- ASTM. (2014). *Standard Test Methods for Determining Average Grain Size*. ASTM E112-12. Repéré <https://www.astm.org/e0112-12.html>.
- Babuška, I. & Suri, M. (1992). On locking and robustness in the finite element method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29(5), 1261–1293.
- Bao, H., Chen, J., Gu, X. & Cao, B. (2018). A review of simulation methods in micro/nanoscale heat conduction. *ES Energy & Environment*, 1(39), 16–55.
- baron Fourier, J. B. J. (1822). *Théorie analytique de la chaleur*. Chez Firmin Didot, père et fils.
- Bauccio, M. et al. (1993). *ASM metals reference book*. ASM international.
- Bekkouche, F. (2018). *Etude théorique et numérique des équations non-linéaires de Sobolev*. (Thèse de doctorat, Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambresis).
- Cheaito, R., Hattar, K., Gaskins, J. T., Yadav, A. K., Duda, J. C., Beechem, T. E., Ihlefeld, J. F., Piekos, E. S., Baldwin, J. K., Misra, A. et al. (2015). Thermal flux limited electron Kapitza conductance in copper-niobium multilayers. *Applied Physics Letters*, 106(9), 093114.
- Committee, A. I. H. et al. (1992). Properties and selection : nonferrous alloys and special-purpose materials. *ASM international*, 2, 1143–1144.

- Cormier, J. & Guedou, J.-Y. (2015). MA1 - Des matériaux incontournables pour les turboréacteurs aéronautiques : les superalliages base nickel MA1. 35–43.
- Danilova-Tretiak, S., Nikolaeva, K., Yeuseyeva, L. & Tanaeva, S. (2017). Thermal behavior and thermophysical properties of LDPE filled with SiC. *Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry*, pp. 122–122.
- Dong, H., Wen, B. & Melnik, R. (2014). Relative importance of grain boundaries and size effects in thermal conductivity of nanocrystalline materials. *Scientific reports*, 4(1), 1–5.
- Ferrence, R. (2001). Diffusion theory and drug use. *Addiction*, 96(1), 165–173.
- Gall, D. (2016). Electron mean free path in elemental metals. *Journal of Applied Physics*, 119(8), 085101.
- Galperin, B., Sukoriansky, S. & Dikovskaya, N. (2010). Geophysical flows with anisotropic turbulence and dispersive waves : flows with a β -effect. *Ocean Dynamics*, 60(2), 427–441.
- Golding, W. L. (2005). Lightning strikes on commercial aircraft : How the airlines are coping. *Journal of Aviation/Aerospace Education & Research*, 15(1), 7.
- Guenneau, S. & Amra, C. (2013). Anisotropic conductivity rotates heat fluxes in transient regimes. *Optics express*, 21(5), 6578–6583.
- Gundrum, Bryan C, C. D. G. A. R. S. (2005). Thermal conductance of metal-metal interfaces. *Physical Review B*, 72(24), 245426.
- Günter, S., Yu, Q., Krüger, J. & Lackner, K. (2005). Modelling of heat transport in magnetised plasmas using non-aligned coordinates. *Journal of Computational Physics*, 209(1), 354–370.
- Holt, J. M. (1996). *Structural alloys handbook*. CINDAS/Purdue University.
- Hopkins, P. E. & Duda, J. C. (2006). Introduction to nanoscale thermal conduction. *Heat Transf. Math. Model. Numer. Methods Inf. Technol*, 112, 872.
- Hurley, D. H., Khafizov, M. & Shinde, S. (2011). Measurement of the Kapitza resistance across a bicrystal interface. *Journal of Applied Physics*, 109(8), 083504.
- Hyman, J., Morel, J., Shashkov, M. & Steinberg, S. (2002). Mimetic finite difference methods for diffusion equations. *Computational Geosciences*, 6(3), 333–352.
- Jannot, Y. & Moyne, C. (2012). Transferts thermiques. *Ecole des mines Nancy*, 161.

- Jin, J. S., Lee, J. S. & Kwon, O. (2008). Electron effective mean free path and thermal conductivity predictions of metallic thin films. *Applied Physics Letters*, 92(17), 171910.
- Kim, C. & Galliers, R. D. (2004). Toward a diffusion model for Internet systems. *Internet Research*.
- Kurz, W. & Fisher, D. J. (1984). *Fundamentals of solidification*.
- Leali, F., Vergnano, A., Pini, F., Pellicciari, M. & Berselli, G. (2016). A workcell calibration method for enhancing accuracy in robot machining of aerospace parts. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 85(1), 47–55.
- Lee, W. B., Cheung, C. F. & Li, J. (2001). Applications of virtual manufacturing in materials processing. *Journal of materials processing technology*, 113(1-3), 416–423.
- Lees, C. H. & Chorlton, J. (1896). LIV. On a simple apparatus for determining the thermal conductivities of cements and other substances used in the arts. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 41(253), 495–503.
- Lewy, H., Friedrichs, K. & Courant, R. (1928). Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische annalen*, 100, 32–74.
- Li, X. & Huang, W. (2010). An anisotropic mesh adaptation method for the finite element solution of heterogeneous anisotropic diffusion problems. *Journal of Computational Physics*, 229(21), 8072–8094.
- Maison, S. (2008a) [site WEB]. Repéré http://www.zpag.net/Tecnologies_Indistrielles/Materiaux_Generalite.htm.
- Maison, S. (2008b) [site WEB]. Repéré garmanage.com.
- Manzini, G. & Putti, M. (2007). Mesh locking effects in the finite volume solution of 2-D anisotropic diffusion equations. *Journal of Computational Physics*, 220(2), 751–771.
- Matweb. (2011). Matweb [site WEB]. <https://www.matweb.com>.
- Min, S., Blumm, J. & Lindemann, A. (2007). A new laser flash system for measurement of the thermophysical properties. *Thermochimica Acta*, 455(1-2), 46–49.
- Nan, C.-W. & Birringer, R. (1998). Determining the Kapitza resistance and the thermal conductivity of polycrystals : A simple model. *Physical review B*, 57(14), 8264.

- Netzsch. (2006). LFA 457 MicroFlash [site WEB]. Repéré <https://analyzing-testing.netzsch.com/fr/produits-solutions/diffusivite-thermique-et-conductivite-thermique-lfa-ghp-hfm/lfa-457-micro-flash>.
- Nicaise, S. & Bekkouche, F. (2019). A posteriori error estimates for a fully discrete approximation of Sobolev equations. *Confluentes Mathematici*, 11(1), 3–28. doi : 10.5802/cml.53.
- Park, J.-H., Suzuki, T., Kurosawa, M., Miyao, M. & Sadoh, T. (2012). (111)-Oriented large-grain Ge on insulator by gold-induced crystallization combined with interfacial layer insertion. *2012 19th International Workshop on Active-Matrix Flatpanel Displays and Devices (AM-FPD)*, pp. 231–234.
- Philip, P. & Fagbenle, L. (2014). Design of Lee's disc electrical method for determining thermal conductivity of a poor conductor in the form of a flat disc. 1–12.
- Quey, R., Driver, J. H. & Dawson, P. (2015). Intra-grain orientation distributions in hot-deformed aluminium : Orientation dependence and relation to deformation mechanisms. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 84, 506–527.
- Rasband, W. (1997). ImageJ [site WEB]. Repéré <https://imagej.net>.
- Rayleigh, L. (1879). On Reflection of Vibrations at the Confines of two Media between which the Transition is Gradual. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s1-11(1), 51-56. doi : 10.1112/plms/s1-11.1.51.
- Saltonstall, Christopher B, M. Z. D. A. M. J. G. D. R. S. T. S. A. K. P. G. A. D. P. B. T. E. (2020). Complexion dictated thermal resistance with interface density in reactive metal multilayers. *Physical Review B*, 101(24), 245422.
- Sharma, P. & Hammett, G. W. (2007). Preserving monotonicity in anisotropic diffusion. *Journal of Computational Physics*, 227(1), 123–142.
- Shepard, D., Blumm, J. & Lindemann, A. (2006). Measurement of the Thermophysical Properties of Magnesia-Carbon Refractory Materials. *Thermal Conductivity*, 28, 43.
- Singh, I., Mishra, B., Bhattacharya, S. & Patil, R. (2012). The numerical simulation of fatigue crack growth using extended finite element method. *International Journal of Fatigue*, 36(1), 109–119.
- Singh, J. & Chaturvedi, S. (2016). *IIT JEE Physics*.
- Sombatsompop, N. & Wood, A. (1997). Measurement of thermal conductivity of polymers using an improved Lee's disc apparatus. *Polymer Testing*, 16(3), 203–223.

- Spachoptics. (2004). LEICA-DM-LM [site WEB]. Repéré <https://www.spachoptics.com/>.
- Swartz, E. T. & Pohl, R. O. (1989). Thermal boundary resistance. *Reviews of modern physics*, 61(3), 605.
- Touloukian, Y. S., Powell, R., Ho, C. & Klemens, P. (1970). *Thermophysical properties of matter-the tprc data series. volume 1. thermal conductivity-metallic elements and alloys*.
- Tréguier, A.-M. (2002). Modélisation numérique pour l'océanographie physique. *Annales mathématiques Blaise Pascal*, 9(2), 345–361.
- Umansky, M., Day, M. & Rognlien, T. (2005). On numerical solution of strongly anisotropic diffusion equation on misaligned grids. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 47(6), 533–554.
- van Es, B., Koren, B. & de Blank, H. J. (2014). Finite-difference schemes for anisotropic diffusion. *Journal of Computational Physics*, 272, 526–549.
- van Es, B., Koren, B. & de Blank, H. J. (2016). Finite-volume scheme for anisotropic diffusion. *Journal of Computational Physics*, 306, 422–442.
- Vander Voort, G. F. (1999). *Metallography, principles and practice*. ASM international.
- Warmuzek, M. (2004). Metallographic techniques for aluminum and its alloys. *Materials Park, OH : ASM International, 2004.*, 711–751.