HAL
open science

Prédiction des structures de grain d'un composant en acier 316L élaboré par fabrication additive fusion laser sur lit de poudre

Anaïs Baumard

To cite this version:

Anaïs Baumard. Prédiction des structures de grain d'un composant en acier 316L élaboré par fabrication additive fusion laser sur lit de poudre. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Montpellier, 2020. Français. NNT : 2020MONTS075 . tel-03287015

HAL Id: tel-03287015

https://theses.hal.science/tel-03287015

Submitted on 15 Jul 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE POUR OBTENIR LE GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

En Spécialité Mécanique et Génie Civil

École doctorale n°166, Information Structures Systèmes (I2S)

Unité de recherche LMGC – UMR 5508

Prédiction des structures de grains d'un composant en acier 316L élaboré par fabrication additive fusion laser sur lit de poudre

Présentée par Anaïs BAUMARD
Le 7 décembre 2020

Sous la direction de **Cyril BORDREUIL**
et **Frédéric DESCHAUX-BEAUME**

Devant le jury composé de

Patrice PEYRE, Directeur de Recherche CNRS, Arts et Métiers ParisTech (PIMM)	Président du jury
Charles-André GANDIN, Directeur de recherche CNRS, MINES ParisTech (CEMEF)	Rapporteur
Rémy DENDIEVEL, Professeur des Universités, Grenoble INP (SIMaP)	Rapporteur
Christophe COLIN, Maître de Recherche, MINES ParisTech (CDM)	Examinateur
Cyril BORDREUIL, Professeur des Universités, Université de Montpellier (LMGC)	Directeur
Frédéric DESCHAUX-BEAUME, Professeur des Universités, Université de Montpellier (LMGC)	Co-directeur
Danièle AYRAULT, Ingénieure de recherche, CEA Saclay (LTA)	Encadrante
Olivier FANDEUR, Ingénieur de recherche, CEA Saclay (LM2S)	Co-encadrant
Olivier DOYEN, Ingénieur de recherche, CEA Saclay (LM2E)	Invité

UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER

Remerciements

Je souhaite tout d'abord remercier Cyril BORDREUIL et Frédéric DESCHAUX-BEAUME pour leur accompagnement et leur implication sans faille tout au long de la thèse. En plus d'être de formidables directeurs de thèse, ils ont été pour moi d'excellents professeurs tant leur enseignement en science des matériaux, en méthode numérique ou encore en physique de la solidification et des procédés de fabrication m'a été utile. Pour ne rien gâcher, leur bonne humeur perpétuelle et leur positivisme ont rendu d'autant plus agréables nos multiples échanges au cours de la thèse.

Je voudrais également adresser mes remerciements à M. Charles-André GANDIN et M. Rémy DENDIEVEL pour leur lecture attentive du manuscrit et pour leurs retours experts. Je les remercie également, ainsi que M. Patrice PEYRE et M. Christophe COLIN pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux de thèse ainsi que pour les discussions pertinentes occasionnées durant la soutenance.

Je suis reconnaissante envers Olivier DOYEN qui m'a fait confiance et grâce à qui j'ai eu la chance de travailler sur ce beau sujet, ainsi qu'envers Danièle AYRAULT qui a accepté de m'encadrer suite au départ d'Olivier. La thèse est un chemin semé d'embuches, mais il est moins difficile à suivre lorsque Danièle est à vos côtés et commente la coupe du monde de biathlon (ou le 100 m ou encore un match de Roland Garros) et je l'en remercie pour cela. Je tiens également à remercier Olivier FANDEUR pour les nombreux « CAFE » pris dans son bureau et pour son aide au développement du modèle CAFE, surtout au début de sa mise en place.

Comment ne pas remercier l'équipe du LTA pour sa sympathie et pour tous les bons moments passés autours d'un café (en minuscule celui-ci !), à l'époque où le Corona n'avait pas encore eu raison de nos interactions sociales. Merci également à tous ceux qui m'ont apporté leur aide durant la thèse, que ce soit pour les aspects administratifs (Sylvie ma bonne fée), pour la caractérisation de mes échantillons (Anne-Laure notre « métalleu »), ou encore concernant les aspects numériques et purement physiques (Christopher pour sa patience de professeur et pour ses nombreuses relectures). Partager mon bureau avec Ioana a également été un réel plaisir et je souhaite à tout le monde d'avoir une collègue de bureau aussi sympathique. Enfin merci à tous ceux du labo qui ont apporté de la joie et de la bonne humeur dans les moments sombres (au sens propre comme figuré) et notamment à Gilles, Rémi, François dont les blagues resteront inoubliées. Merci également à la « *team* Shamrock », Diogo, Baptiste, Lucas, Anne-Laure et Christopher pour ces moments d'évasion.

Je tiens également à remercier Mathieu de m'avoir encouragée dans ce projet et de m'avoir soutenue dès le début, ainsi que mes amis qui m'ont encouragée et supportée au cours de ces trois années. Ma gratitude va également vers toutes les personnes du CEA ayant contribué à un contexte de travail chaleureux : Flore, Gautier, Fernando, Elodie, Aziz, Roberto et Sebastian.

Gardant systématiquement le meilleur pour la fin, je tiens à remercier infiniment ma famille pour son soutien inconditionnel, en particulier mes parents, Sébou, Galette et Tatie pour leurs encouragements ininterrompus. La Covid a rendu ma dernière année plus difficile encore mais heureusement : vous étiez là et avez tout mis en œuvre pour que je puisse travailler dans les conditions les moins pénibles, je ne vous remercierai jamais assez. Reprenant les termes si justes d'une française au Vietnam : « Je vous aime à la même hauteur ! ».

Comme dirait un grand Maître Montpelliérain (C. B.) : *« Une thèse, c'est toujours un peu une folie ! »*

Table des matières

Nomenclature v
Introduction 1
Chapitre 1 Revue Bibliographique 3
1.1. Généralités autour de la fabrication additive 5
1.2. Le procédé de fusion laser sur lit de poudre (LBM) 6
1.2.1. Principe de fonctionnement du procédé LBM 6
1.2.2. Paramètres procédés et propriétés de la poudre 7
1.2.3. Physiques du procédé 9
1.2.4. Diagramme de Kurz 15
1.3. Structures de grains observées en FA LBM 17
1.3.1. Caractéristiques des structures de grain LBM 17
1.3.2. Influence des paramètres procédé sur les structures de grain 20
1.4. Physique de la solidification 22
1.4.1. Germination 22
1.4.2. Croissance dendritique et surfusion 25
1.5. Méthodes numériques de simulation du procédé et de la solidification 30
1.5.1. Modélisation thermique du procédé LBM 30
1.5.2. Modélisation de la solidification 35
1.5.3. Confrontation expérimentale 41
1.6. Synthèse bibliographique 43
1.7. Problématique et articulation des étapes de la thèse 43
Chapitre 2 Modèle CAFE 47
2.1. Présentation du modèle CAFE 49
2.2. Modèle thermique Éléments Finis 49
2.2.1. Phénomènes physiques pris en compte 50
2.2.2. Modélisation du procédé 53
2.3. Modèle AC 55
2.3.1. Modélisation des mécanismes physiques pris en compte 55
2.3.2. Initialisation du domaine d'étude 59
2.3.3. Définition des règles de transition 61
2.4. Couplage EF-AC 67
2.4.1. Transfert EF-AC 67
2.4.2. Données de sortie 69

2.5. Validation du modèle numérique sur cas test de la littérature 69
2.5.1. Germination et croissance d'un monocristal 70
2.5.2. Croissance compétitive 71
2.5.3. Conclusion 73
2.6. Conclusion du chapitre 73
Chapitre 3 Étude expérimentale 75
3.1. Dispositifs expérimentaux 77
3.1.1. Banc d'essai instrumenté LBM 77
3.1.2. Machine industrielle SLM 79
3.1.3. Bilan des caractéristiques des dispositifs 80
3.2. Matériaux et poudres étudiés 80
3.3. Fabrication des spécimens 81
3.3.1. Fabrication des éprouvettes monocouches 81
3.3.2. Fabrication des éprouvettes multicouches 85
3.4. Techniques de caractérisation des échantillons 87
3.4.1. Préparation des échantillons 87
3.4.2. Microscopie optique 88
3.4.3. Microscopie électronique à balayage 88
3.5. Etude des zones fondues 89
3.5.1. Dimensions et géométrie du bain de fusion 90
3.5.2. Influence des paramètres opératoires 95
3.6. Etude des structures de grain formées 99
3.6.1. Résultats obtenus 99
3.6.2. Analyses et discussion 110
3.6.3. Conclusion 113
Chapitre 4 Simulation des lignes de fusion 115
4.1. Simulation du procédé 117
4.1.1. Domaine d'étude et maillage 117
4.1.2. Propriétés matériaux 118
4.1.3. Conditions initiales et aux limites 118
4.1.4. Apport de chaleur 119
4.1.5. Calibration de la source de chaleur 120
4.1.6. Champs de températures et de vitesses de solidification 123
4.1.7. Discussion 128
4.2. Simulation des structures de grains 130
4.2.1. Initialisation du domaine AC 130

4.2.2. Loi de croissance dendritique 131
4.2.3. Structures de grains simulées 132
4.3. Conclusion 140
4.3.1. Simulation du procédé 140
4.3.2. Structures de grains simulées 141
Chapitre 5 Simulation des monocordons 143
5.1. Simulation du procédé 145
5.1.1. Domaine d'étude et maillage 145
5.1.2. Propriétés matériaux 147
5.1.3. Conditions initiales et aux limites 148
5.1.4. Apport de chaleur 148
5.1.5. Calibration de la source de chaleur 150
5.1.6. Champs de températures et vitesses de solidification 152
5.1.7. Discussion 157
5.2. Simulation des structures de grains 159
5.2.1. Initialisation du domaine automate cellulaire 159
5.2.2. Loi de croissance dendritique 160
5.2.3. Évolution d'un grain au cours de la solidification 160
5.2.4. Structures granulaires simulées 161
5.3. Conclusion 168
5.3.1. Simulation du procédé 168
5.3.2. Simulation des structures de grains 169
Conclusion 170
Annexe 1 : Propriétés matériau utilisées pour la simulation 172
Références 173

Nomenclature

Alphabet Romain

a	Demi-largeur de la source de chaleur Goldak	m
a_n	Coefficient de la loi KGT	$m.s^{-1}.K^{-n}$
Bi	Nombre de Biot	-
b	Profondeur de la source de chaleur Goldak	m
C	Centre de l'octaèdre	-
C_p	Capacité calorifique massique	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
c	Demi-longueur de la source de chaleur Goldak	m
D	Coefficient de diffusion des espèces	$m^2.s^{-1}$
E	Densité d'énergie volumique	$J.m^{-3}$
F_{cap}	Face capturante	-
f	Coefficient de la densité de chaleur volumique	-
f_M	Force de Marangoni	N
G	Gradient thermique	$K.m^{-1}$
G_{cl}	Gradient de concentration en soluté	$wt\%.m^{-1}$
HD	Distance intercordon	m
h	Coefficient de transfert thermique	$W.m^{-2}.K^{-1}$
I_v	Fonction d'Ivantsov	-
I_v	Etat de la cellule v	-
k	Coefficient de partition	-
L	Chaleur latente de fusion massique	$J.kg^{-1}$
L_c	Longueur caractéristique du système	m
l_{CA}	Longueur d'une cellule	m
m_l	Pente du liquidus du diagramme de phase	$K.wt\%^{-1}$
m_s	Pente du solidus du diagramme de phase	$K.wt\%^{-1}$
n	Coefficient de la loi KGT	-
n_{nucl}	Densité moyenne de germination	m^{-3}
n_{gr}	Indice du grain	-
P	Puissance	W
Pe	Nombre de Péclet	-
Q	Puissance effective	W
q	Densité de chaleur volumique	$W.m^{-3}$
R	Rayon de l'enveloppe de l'octaèdre	m

r	Rayon du germe	m
Sh	Nombre de Sherwood	-
T	Température	K ou °C
T_{Liq}	Température de fusion (métal pur) – Température de liquidus (alliage)	K ou °C
T_{Sol}	Température de solidus d'un alliage	K ou °C
T_{∞}	Température loin de l'interface solide/liquide	K ou °C
$\dot{T}$	Taux de refroidissement	$K.s^{-1}$
t	Épaisseur du lit de poudre	m
U	Vitesse caractéristique de l'écoulement dans le fluide	$m.s^{-1}$
v	Vitesse de déplacement de la source de chaleur	$m.s^{1}$
v_d	Vitesse de croissance dendritique	$m.s^{1}$
V	Taux de croissance	$m.s^{1}$
V_{Liq}	Volume de liquide en surfusion	m^3

Alphabet Grec

α	Diffusivité thermique	$m^2.s^{-1}$
γ	Énergie de surface	$J.m^{-2}$
$\frac{\partial\gamma}{\partial T}$	Gradient de tension de surface	$N.m^{-1}.K^{-1}$
ΔG	Variation d'enthalpie libre	J
ΔT	Surfusion	K
ΔT_A	Surfusion de cinétique d'attachement	K
ΔT_C	Surfusion constitutionnelle	K
ΔT_R	Surfusion de courbure	K
ΔT_{Th}	Surfusion thermique	K
Δt	Pas de temps de calcul EF	S
δt	Pas de temps de calcul AC	S
η	Rendement	%
θ	Angle de mouillage	°
λ	Conductivité thermique du matériau	$W.m^{-1}.K^{-1}$
λ_L	Longueur d'onde du laser	m
μ	Indice de la cellule voisine	-
μ_c	Coefficient de cinétique d'attachement	$m.K^{-1}.s^{-1}$
μ_D	Viscosité dynamique du fluide	$kg.m^{-1}.K^{-1}$
ν	Indice de la cellule considérée	-
ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$

Γ	Coefficient de Gibbs-Thomson	K.m
ϕ	2ème angle d'Euler	°
φ	Diamètre focal du faisceau laser	m
φ_1	1er angle d'Euler	°
φ_2	3ème angle d'Euler	°
φ_{eq}	Flux de chaleur équivalent	$W.m^{-2}$
Ω	Sursaturation	-

Indices

x_0	Valeur initiale
x_{AC}	Valeur rattachée aux automates cellulaires (AC)
x_b	Variable arrière (*bottom*)
x_c	Valeur en soluté
x_{EF}	Valeur rattachée aux éléments finis (EF)
x_{eq}	Valeur équivalente
x_f	Valeur avant (*front*)
x_{Liq}	Valeur liée au liquidus
x_{max}	Valeur maximale
x_{moy}	Valeur moyenne
x_{nucl}	Valeur de germination
x_p	Valeur rattachée à la poudre
x_r	Valeur arrière (*rear*)
x_{Sol}	Valeur liée au solidus
$x_{s/l}$	Valeur à l'interface solide/liquide
x_u	Valeur supérieure (*up*)
x_μ	Valeur rattachée à la cellule voisine μ
x_ν	Valeur rattachée à la cellule ν
x_σ	Écart type de la variable

Exposants

x^0	Valeur initiale d'une variable associée à une cellule (ν ou μ)
x^{en}	Valeur de liées à l'enveloppe AC
$x^{ième}$	Valeur liée à la $i^{ème}$ paramétrie
x^ν	Valeur associée au repère de la cellule ν

Introduction

La fabrication additive (FA), également connue sous le nom d'impression 3D ou de prototypage direct, regroupe l'ensemble des procédés consistant à réaliser une pièce par ajout de matière, à l'inverse des procédés conventionnels au cours desquels la pièce souhaitée est réalisée par retrait des parties non nécessaires d'un bloc de matière. Actuellement, les procédés de fabrication additive métallique sont utilisés dans de nombreux domaines, allant du médical à l'aérospatial en passant par le bâtiment et trouvent de nombreuses applications, parmi lesquelles la construction de composants et la réparation de pièces [Attaran 2017]. Les avantages majeurs de ces techniques de fabrication reposent sur la possibilité de construire des pièces de très petites dimensions, à géométrie complexe, et sur mesure, tout en limitant les pertes de matière. Ces avantages expliquent en grande partie l'intérêt croissant suscité ces dernières décennies.

Dans ce contexte, le Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) a choisi de s'intéresser aux potentialités de la fabrication additive pour l'énergie nucléaire, notamment pour la réalisation par fusion laser sur lit de poudre de certains composants en acier austénitique 316L. Cette technologie, largement répandue en FA métallique et bien connue sous le terme *Laser Beam Melting* (LBM), consiste à construire des pièces en effectuant des cycles de fusion-solidification sur des couches de poudre déposées successivement. Les structures de grains des pièces réalisées par LBM sont directement liées aux mécanismes impliqués au cours de la solidification de la poudre fondue. En particulier, l'histoire thermique générée dans le matériau par la combinaison de la forte densité d'énergie fournie par le laser et de sa vitesse de déplacement élevée, ainsi que les valeurs élevées de gradient thermique et de taux de refroidissement entrainent la formation d'une structure de grains colonnaires, principalement dirigée selon la direction de construction [Andreau 2019].

Les propriétés mécaniques de certains matériaux, parmi lesquels les aciers inoxydables, découlant directement de leur composition chimique et de leur structure granulaire, l'aspect colonnaire des grains formés en LBM génère un comportement mécanique fortement anisotrope [Liverani 2017]. Cette anisotropie n'est pas une difficulté en soi dans la mesure où elle peut être prédite ou contrôlée. Les caractéristiques des grains sont amenées à varier selon les paramètres opératoires choisis, la stratégie de construction adoptée ainsi que les conditions machine appliquées [Cherry 2015]. La prédiction de l'anisotropie doit alors passer par la compréhension de la formation des grains au cours du procédé ainsi que par l'étude de l'influence des paramètres procédé sur ces grains.

Pour y contribuer, l'objectif de ces travaux de thèse est de mettre en place un modèle numérique capable de prédire les structures de grains formées au cours du procédé LBM. Le modèle développé pour cela dans la thèse se décompose en deux parties : un modèle Éléments Finis (EF) thermique permettant de simuler les champs de température produits par le procédé, et un modèle de croissance granulaire basé sur la méthode Automate Cellulaire (AC). Cette approche, initialement développée par Gandin et Rappaz [Rappaz 1993], est connue sous l'appellation de modèle « CAFE ». Bien qu'ayant montré sa capacité à prédire la structure granulaire de pièces obtenues par fonderie [Gandin 99] ou encore par soudage [Chen 2014], cette méthode a été très peu appliquée au procédé LBM et n'a pas encore été développée en 3D pour cette application. Le modèle défini dans le cadre de cette thèse présente donc la particularité d'être à la fois un modèle 3D appliqué à la fabrication par LBM et le premier outil permettant la prédiction des structures de grains au sein du CEA. De plus, l'originalité de ces travaux de thèse réside également dans la réalisation, en parallèle de la mise en place du modèle numérique, d'essais instrumentés LBM permettant d'identifier les phénomènes physiques à intégrer au modèle. En outre, ces essais permettront également de caractériser les

structures de grains obtenues à l'issue des essais pour les comparer aux résultats de simulations. De par la complexité de la physique du procédé LBM et dans l'optique de limiter les facteurs pouvant influencer les structures de grains, nous nous intéressons uniquement à des géométries monocordons au cours de cette étude de thèse.

Le manuscrit est décomposé en cinq chapitres :

- Le premier chapitre consiste en une étude bibliographique présentant le procédé LBM, les structures de grains généralement obtenues *via* ce procédé, la théorie de la solidification ainsi que les différents modèles numériques permettant la prédiction des structures granulaires à deux échelles : microscopique (celle des particules de poudre) et macroscopique (celle de la pièce). L'articulation de la thèse est également présentée.
- Le deuxième chapitre détaille le modèle CAFE défini dans le cadre de cette thèse pour prédire numériquement la formation des structures de grains. Les modèles EF et AC sont décrits ainsi que leur couplage.
- Le troisième chapitre est consacré à l'étude expérimentale menée au cours des travaux de thèse. Les différentes campagnes d'essais réalisées sont détaillées et les résultats exposés et discutés.
- Le quatrième chapitre présente l'application du modèle CAFE 3D à la configuration ligne de fusion. D'une part les résultats de simulation sont présentés, d'autre part l'étude de l'influence de la loi de croissance et des paramètres procédé sur les structures de grains formées est étudiée. La confrontation des résultats avec les données expérimentales est également effectuée.
- Enfin, le cinquième chapitre expose les résultats de simulation CAFE obtenus sur des géométries de cordons monocouches. Tout comme dans le chapitre 4, l'influence des paramètres opératoires sur les résultats thermiques et de solidification sont discutés.

Chapitre 1 Revue Bibliographique

1.1. Généralités autour de la fabrication additive 5
1.2. Le procédé de fusion laser sur lit de poudre (LBM) 6
1.2.1. Principe de fonctionnement du procédé LBM 6
1.2.2. Paramètres procédés et propriétés de la poudre 7
1.2.3. Physiques du procédé 9
1.2.4. Diagramme de Kurz 15
1.3. Structures de grains observées en FA LBM 17
1.3.1. Caractéristiques des structures de grain LBM 17
1.3.2. Influence des paramètres procédé sur les structures de grain 20
1.4. Physique de la solidification 22
1.4.1. Germination 22
1.4.2. Croissance dendritique et surfusion 25
1.5. Méthodes numériques de simulation du procédé et de la solidification 30
1.5.1. Modélisation thermique du procédé LBM 30
1.5.2. Modélisation de la solidification 35
1.5.3. Confrontation expérimentale 41
1.6. Synthèse bibliographique 43
1.7. Problématique et articulation des étapes de la thèse 43

Lors de la production de pièces en acier inoxydable par Fabrication Additive (FA), des structures de grains vont se former et générer une microstructure caractéristique, différente de celles obtenues habituellement par procédés conventionnels (notamment la fonderie). En effet, et comme exposé en introduction, en FA les grains observés sont généralement uniquement colonnaires, principalement orientés dans la direction de fabrication. Ces structures de grains sont directement liées aux conditions de solidification induites par le procédé. Afin de positionner le travail par rapport aux recherches actuelles, nous nous intéresserons dans les première (§ 1.1) et deuxième parties (§ 1.2) respectivement à la fabrication additive et au procédé de fusion laser sur lit de poudre (LBM). Nous étudierons dans un troisième temps (§ 1.3) les structures de grains couramment observées en LBM puis dans une quatrième partie (§ 1.4) la physique régissant la solidification. Nous présenterons dans une cinquième partie (§ 1.5) les méthodes numériques permettant de modéliser la formation de grains dans les procédés de fabrication impliquant des cycles de fusion-solidification de la matière. Enfin, nous ferons une synthèse de la revue bibliographique (§ 1.6) et présenterons les choix adoptés pour la thèse (§ 1.7).

1.1. Généralités autour de la fabrication additive

La fabrication additive, communément connue sous le nom « d'impression 3D », regroupe l'ensemble des procédés consistant à construire une pièce par ajout de couches successives de matière. La première « imprimante 3D » a été créée en 1984 par Charles W. Hull [Hull 1984], et depuis, le nombre et la diversité des procédés de fabrication additive n'ont cessé de croître, ainsi que l'intérêt que lui porte la communauté scientifique. La Figure 1.1 décrit l'évolution du nombre de publications annuelles liées à la fabrication additive depuis 1997. Ce graphique a été tracé en utilisant la base de données scientifiques *ScienceDirect*, depuis laquelle a été relevé le nombre de publications rattachées chaque année au terme « *additive manufacturing* ». Il ressort de ce graphique que depuis les années 2000, le nombre d'articles publiés chaque année en lien avec la FA est en constante augmentation (à quelques exceptions près), et qu'à partir de 2010, cette augmentation annuelle est systématiquement supérieure à 14 %. Par ailleurs les domaines d'études liés à ces articles sont très variés puisqu'ils vont de l'application médicale [Revilla-León 2017] à la fabrication de composants aérospatiaux [Shapiro 2016] en passant par les applications architecturales [Cruz 2020].

Aujourd'hui, les procédés de fabrication additive s'intègrent dans la chaine numérique et peuvent être décomposés en 4 étapes principales :

- **La conception :** représentation tridimensionnelle de la pièce souhaitée par conception assistée par ordinateur (CAO), puis conversion du fichier généré en format stéréo lithographique (STL) ;
- **La préparation logicielle :** découpe du fichier STL en tranches horizontales, générant une succession de plans 2D empilés selon la direction de construction. Ces plans correspondent aux couches fabriquées consécutivement lors de la réalisation de la pièce ;
- **La fabrication :** construction de la pièce couche par couche ;
- **Le post-traitement :** désolidarisation de la pièce et du substrat quand nécessaire, nettoyage de la pièce, application de traitements thermiques et finitions. Cette quatrième étape varie fortement en fonction des procédés et matériaux utilisés ainsi que de l'application finale de la pièce.

Cet intérêt grandissant pour la FA s'explique par les divers avantages qu'elle procure. Tout d'abord, ce mode de construction permet de fabriquer des pièces de géométrie complexe, impossibles à obtenir par des procédés conventionnels, tout en consommant moins de matière première (pas de

nécessité de masselottes de fonderie ni d'usinage de brut). De plus, les cycles de production sont courts et permettent de réaliser des pièces unitaires, sur-mesure, très facilement et sans utilisation d'un outillage spécifique. Elle permet également de fabriquer des pièces ayant été conçues par optimisation topologique, et donc d'obtenir un gain de masse important. Une étude réalisée en 2017 complète la liste non exhaustive des avantages cités précédemment [Attaran 2017].

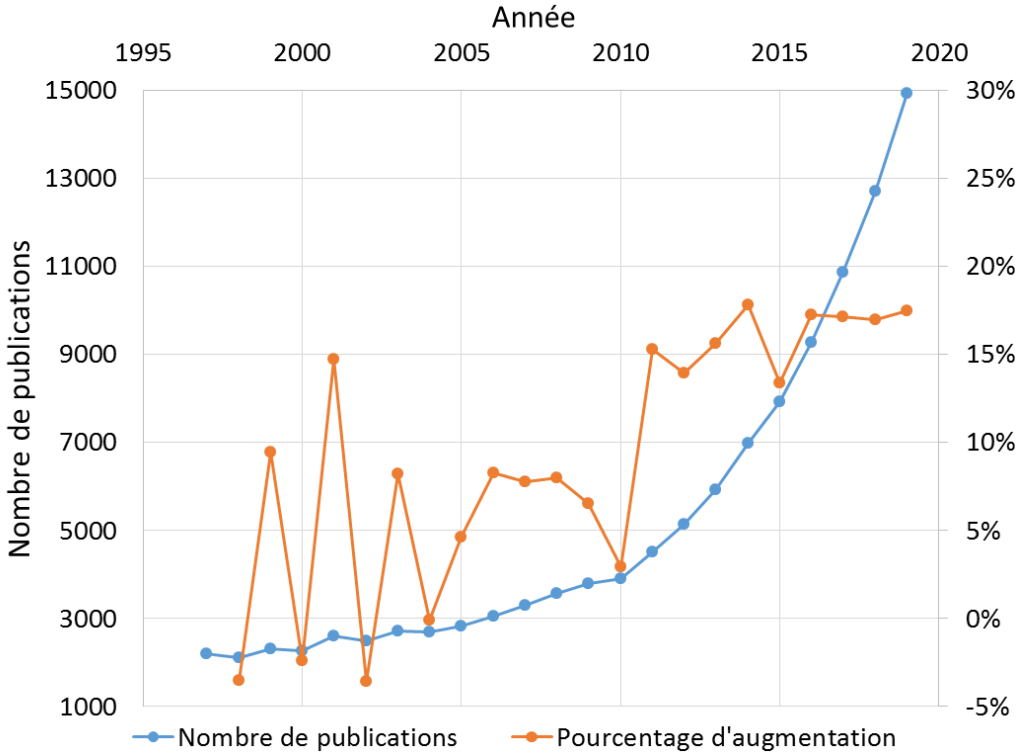


Figure 1.1. Evolution du nombre de publications annuelles contenant les termes "Additive Manufacturing" sur le moteur ScienceDirect

1.2. Le procédé de fusion laser sur lit de poudre (LBM)

Il existe une multitude de procédés rattachés à la fabrication additive. On peut citer notamment la stratoconception, la stéréo lithographie, le frittage laser sélectif ou encore le dépôt direct de matière. Dans le cadre de cette étude nous nous intéressons à la fabrication additive métallique, et plus particulièrement au procédé de fusion laser sur lit de poudre, communément désigné par l'acronyme anglais LBM (*Laser Beam Melting*). Ce procédé est présenté en détail dans les paragraphes qui suivent.

1.2.1. Principe de fonctionnement du procédé LBM

Le procédé de fusion laser sur lit de poudre LBM, également appelé *Selective Laser Melting* (SLM), est représenté de manière schématique sur la Figure 1.2. Il consiste à déposer une couche de poudre sur un substrat au moyen d'un outil (raclette ou rouleau), puis à faire fondre localement à l'aide d'un laser qui balaye la surface suivant une trajectoire prédéfinie la couche de poudre, qui en se solidifiant forme un solide dense. Une fois la couche traitée, le substrat se déplace verticalement vers le bas, permettant ainsi le dépôt d'une nouvelle couche de poudre. En fonction des modèles de machines utilisées, l'apport de poudre sur la plateforme de construction peut s'effectuer par étalement de la poudre présente dans la chambre de distribution *via* la raclette (ou rouleau) ou par dépôt direct de poudre dans le cas où la poudre est stockée dans la raclette. La construction de la pièce se fait dans une enceinte sous atmosphère contrôlée (argon la plupart du temps, azote ou hélium dans certains

cas) afin d'empêcher l'oxydation de la pièce et pour limiter la formation de porosités au cours de la fabrication. Une fois la totalité des couches effectuées, la pièce est désolidarisée du substrat et subit des finitions permettant l'obtention de la pièce finale.

Le procédé LBM peut être utilisé pour une très large gamme de matériaux métalliques : des aciers, des alliages de titane, d'aluminium, à base nickel et cobalt-chrome, ou encore des métaux précieux [DebRoy 2018]. La composition chimique des matériaux obtenus dépend directement de celle des poudres utilisées. En plus des avantages communs aux différentes techniques de fabrication additive, le procédé LBM se distingue par sa capacité à réaliser avec une bonne précision dimensionnelle des pièces complexes pouvant être très fines et de petites dimensions, parfois issues d'optimisations topologiques.

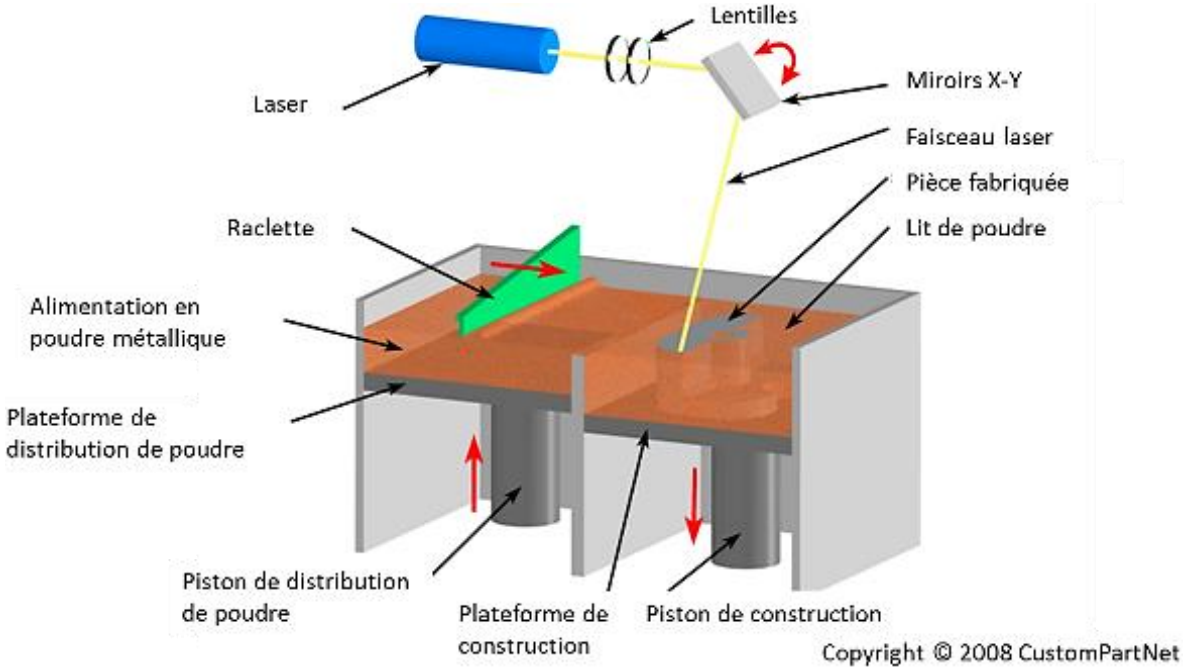


Figure 1.2. Principe de fonctionnement du procédé de fusion laser sur lit de poudre [CustomPart 2008]

1.2.2. Paramètres procédés et propriétés de la poudre

Lors de la fabrication d'une pièce par LBM, de nombreux paramètres entrent en compte. Ils peuvent être regroupés dans quatre catégories distinctes : les paramètres liés à la poudre, ceux dépendant du laser, ceux associés à la stratégie de fabrication et enfin, ceux rattachés aux conditions de fabrication. Les paramètres les plus influents sur les propriétés finales de la pièce sont présentés ci-après, regroupés par catégorie. L'ensemble de ces paramètres joue un rôle sur les échanges thermiques et donc sur les conditions de solidification.

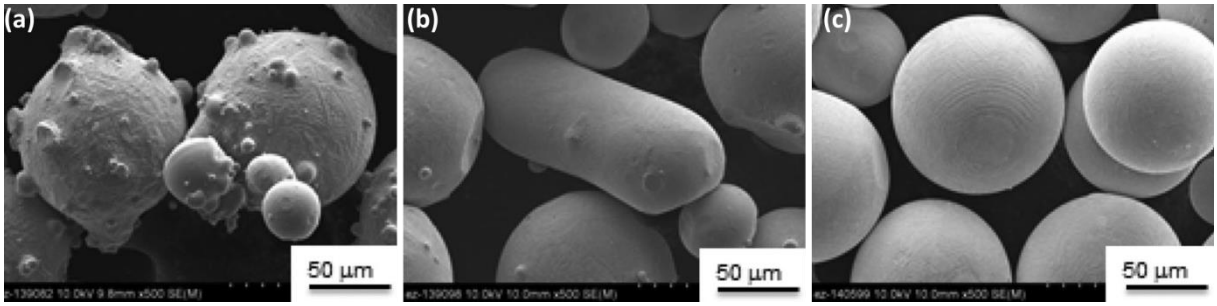
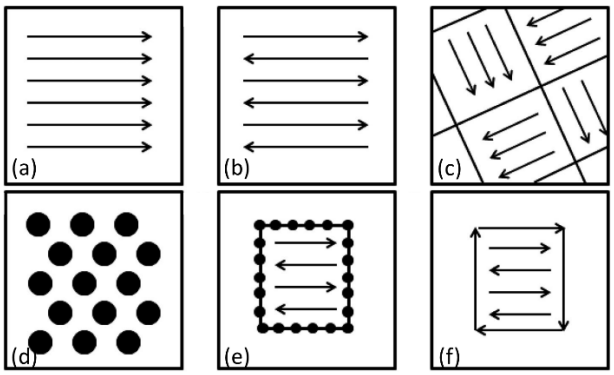


Figure 1.3. Comparaison entre différentes qualités de poudre [Sames 2016]. De (a) vers (c) la qualité s'améliore

Tableau 1.1. Paramètres opératoires du procédé LBM et valeurs de référence associées [DebRoy 2018] et [Gunenthiram 2018]

	Paramètres	Valeurs de référence
Liés au laser	P : puissance (W)	$50 \leq P \leq 1\,000$
	v : vitesse de balayage (mm.s^{-1})	$100 \leq v \leq 2\,000$
	Mode du faisceau	Pulsé (d-e) ou continu (a-c) et (f)
	λ_L : longueur d'onde (nm)	Dépendante du laser
	φ : diamètre focal du faisceau (µm)	$50 \leq \varphi \leq 200$
Liés à la stratégie de fabrication	t : épaisseur du lit de poudre (µm)	$20 \leq t \leq 100$
	Stratégie de balayage	*Pour une couche :* - une seule direction avec un ou deux sens de balayage (a-b) - avec répétition d'un motif ("Island scanning") (c) - avec contour (e-f)  *Figure 1.4. Stratégies de construction possibles [Sames 2016]* *Inter-couche :* rotation possible [45 à 90°]
	HD : distance inter-cordon (µm)	$50 \leq HD \leq 120$
	Direction de construction choisie	Verticale, horizontale ou avec un angle
Conditions de fabrication	Gaz de régulation du taux d'oxygène	Argon, azote ou hélium
	Température du plateau (°C)	$20 \leq T \leq 300$

1.2.2.1. Les paramètres de la poudre

Ils dépendent de la poudre et sont par conséquent fixés une fois la poudre choisie. Ils comprennent :

- *La composition chimique de la poudre*, donnée par le fournisseur. C'est le premier paramètre qui motive le choix d'une poudre parmi d'autres ;
- *La géométrie des grains de poudre :* il est préférable dans la mesure du possible d'utiliser des poudres sphériques et sans satellites afin de limiter le taux de porosité du matériau

obtenu [Sames 2014] ainsi que la rugosité finale de la pièce, mais aussi pour améliorer ses propriétés mécaniques [Brika 2020] (Figure 1.3).

- *La taille des particules de poudre et leur distribution :* il est important de prendre en compte ce paramètre car il est déterminant pour les propriétés finales de la pièce. Une étude récente menée sur un alliage de titane a montré qu'une poudre ayant une grande quantité de particules de petites tailles voyait son comportement rhéologique se dégrader et la densité du lit de poudre diminuer, détériorant par conséquent la densité finale et l'état de surface des pièces fabriquées [Brika 2020]. En LBM, les poudres ont généralement un diamètre moyen (d_{50}) compris entre 15 et 45 µm.

1.2.2.2. Les paramètres opératoires

Les paramètres appartenant aux trois autres catégories peuvent être qualifiés de paramètres opératoires. Ils sont listés et regroupés dans le Tableau 1.1, avec leur plage d'utilisation en LBM. Les indices (a à f) présents dans le tableau sont ceux de la Figure 1.4 inclue dans le Tableau 1.1. L'influence de ces paramètres procédé sur la formation du bain fondu en LBM et sur la formation des structures de solidification générées est étudiée dans la section 1.3.2. Il est important de noter que l'apport d'énergie fourni par le laser varie en fonction des paramètres opératoires, modifiant ainsi les conditions de solidification de la pièce et par conséquent les structures de grains obtenues.

1.2.3. Physiques du procédé

L'obtention d'une pièce par procédé LBM est rendue possible grâce à la formation d'un bain liquide généré au cours de l'interaction laser-matière puis grâce à la solidification du métal liquide au cours du procédé. Au début du procédé de fabrication de la pièce, le rayon laser incident vient frapper la surface du lit de poudre [DebRoy 2018]. En entrant en contact avec les particules de poudre, l'énergie transmise par le laser est en partie absorbée par la poudre, en partie réfléchie jusqu'à ce que son intensité devienne négligeable ou jusqu'à ce que le rayon sorte du système (flèches noires sur la Figure 1.5 (a)).

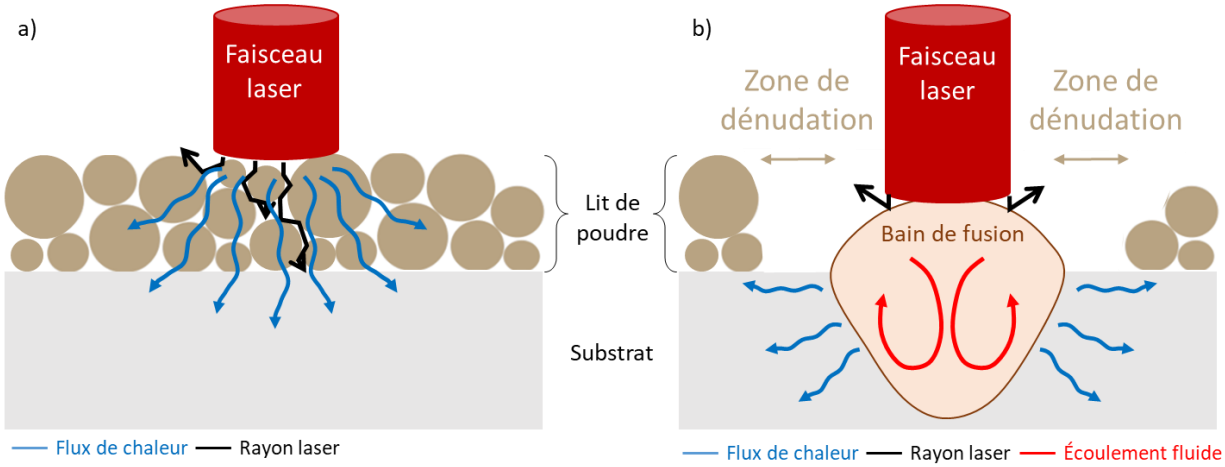


Figure 1.5. Représentation schématique de l'interaction (a) laser-lit de poudre et (b) laser-bain de fusion

Dans le cas où l'énergie absorbée par une particule de poudre n'est pas suffisante pour qu'elle atteigne la température de liquidus, la particule de poudre reste à l'état solide et la chaleur est alors transmise par conduction aux particules voisines et au substrat (flèches bleues sur la Figure 1.5 (a)). A l'inverse, si la température du matériau dépasse la température de liquidus suite à l'absorption de suffisamment d'énergie, un bain liquide se forme : le laser n'interagit alors plus avec le lit de poudre mais avec le bain de fusion (Figure 1.5 (b)).

Suite à la formation du bain de fusion, de nouveaux phénomènes physiques interviennent au cours du procédé. Les travaux menés par Matthews et Khairallah en 2016 [Matthews 2016, Khairallah 2016] et ceux conduits en 2018 par V. Gunenthiram au cours de sa thèse [Gunenthiram 2018], font état de quatre phénomènes principaux, détaillés succinctement ci-après et représentés sur la Figure 1.6.

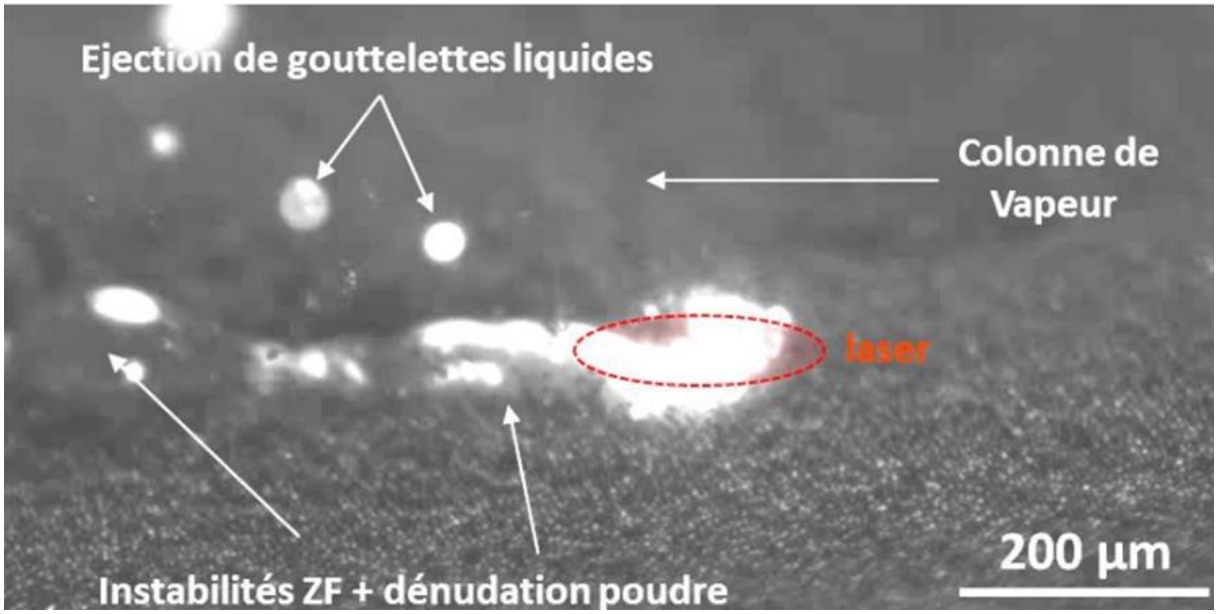


Figure 1.6. Mise en évidence des quatre principaux phénomènes physiques intervenant au cours de la fabrication de monocordon 316L par fusion laser sur lit de poudre [Gunenthiram 2018]

1.2.3.1. Ecoulements dans le bain liquide

Des forces motrices apparaissent dans le liquide, générant des mouvements dans le fluide, représentés par des flèches rouges sur la Figure 1.5 (b). Une des principales forces motrices intervenant dans le cas du procédé de fusion laser sur lit de poudre est la force de Marangoni, détaillée dans la section 2.2.1.3. Les mouvements générés par ces forces sont plus ou moins atténués par les forces d'extinction intervenant dans le fluide, forces directement liées à sa viscosité. Les transferts thermiques en présence du bain liquide sont gouvernés par la conduction, mais également par le phénomène d'advection au sein du fluide. Le rapport entre les forces motrices et les forces d'extinction permet d'évaluer la prédominance éventuelle d'un des deux modes de transferts thermiques sur l'autre (*cf.* 2.2.1.4). Les écoulements sont souvent perturbés en LBM par des instabilités hydrodynamiques entrainant des fluctuations des dimensions et de la géométrie du bain, et par conséquent des irrégularités au niveau des cordons formés.

1.2.3.2. Phénomène de dénudation

En fabrication LBM, et notamment dans le cas de la construction de monocordons, une zone dépourvue de poudre est souvent observée au voisinage du cordon : on parle de zone de dénudation (Figure 1.7 (a) et (b)). Plusieurs études se sont intéressées au phénomène de dénudation afin de comprendre les mécanismes le régissant. Yadroitsev et al. [Yadroitsev 2010, 2013] ont observé expérimentalement cette zone de dénudation et attribuent sa formation à la présence de particules de poudre situées juste à côté de la zone d'irradiation du laser et qui se retrouvent attirées dans le bain, laissant un espace vide de poudre. Dans deux études menées en 2016 [Khairallah 2016, Matthews 2016], des chercheurs ont proposé une explication plus précise pour la formation de la zone de dénudation. Selon eux, deux flux de vapeur métallique ayant des effets opposés agissent sur les grains de poudre situés directement aux environs du bain fondu : un flux dirigé vers l'intérieur du

bain entrainant les particules de poudre dans le bain, et un flux dirigé vers l'extérieur et en particulier vers l'arrière et les côtés du bain contribuant à éloigner les particules de la zone fondue. Ces phénomènes d'attraction et d'éjection ont été observés expérimentalement et sont visibles sur la Figure 1.7 sur laquelle les flèches bleues et jaunes correspondent au déplacement des particules de poudre ayant été respectivement incorporées au bain fondu ou éjectées.

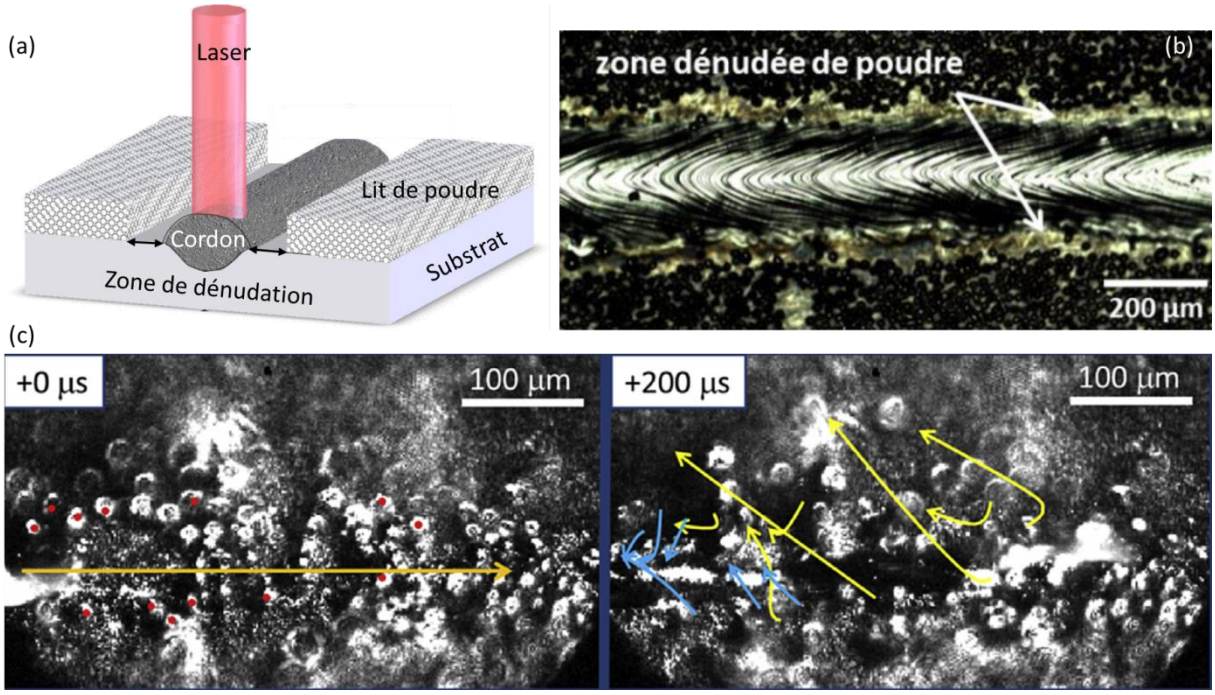


Figure 1.7. Zone de dénudation (a) représentée schématiquement [Yadroitsev 2013] et (b) observée expérimentalement [Gunenthiram 2018]. (c) Suivi par imagerie rapide de particules de poudre au cours du procédé LBM [Matthews 2016]

Les quatre études citées précédemment ont également toutes signalé l'influence non négligeable qu'a la zone de dénudation sur les caractéristiques des cordons formés. L'étude de Yadroitsev et al. a notamment montré qu'elle modifie les dimensions du cordon [Yadroitsev 2013] et celle de Matthews et al. qu'elle impacte son état de surface [Matthews 2016]. Néanmoins, Bidare et al. [Bidare 2018] ont observé que son influence est surtout significative dans les premières couches fabriquées.

1.2.3.3. Formation d'un jet de vapeur

Au niveau de la zone d'interaction entre le laser et le bain, une colonne de vapeur métallique a souvent été observée au cours du procédé LBM. Cette colonne de vapeur métallique génère une dépression au-dessus de la zone fondue, perturbant ainsi la surface libre du bain [Matthews 2016]. Dans le cas où les perturbations sont importantes, l'interface liquide-gaz peut devenir instable, perturbant ainsi la solidification du cordon.

1.2.3.4. Ejection de matière liquide

La dynamique du bain ainsi que l'interaction entre le laser et le bain entraine localement l'éjection de gouttelettes de métal liquide, comme l'a observé V. Gunenthiram [Gunenthiram 2018] au cours de ses travaux de thèse (Figure 1.6). Ces gouttelettes atterrissent ensuite et se solidifient sur le cordon déjà formé ou bien en dehors de la pièce fabriquée, sur le lit de poudre, pouvant conduire à des défauts.

1.2.3.5. Spécificités du bain fondu en LBM

Le bain fondu (BF) formé en LBM est généralement très allongé et présente une forme semi-circulaire en coupe transversale [Zhang 2013, Antony 2014, Liu 2017, Sun 2017, Kurzynowski 2018,

Zhang 2019b]. Concernant ses dimensions, elles sont de l'ordre de la centaine de micromètres, ce qui correspond à des BF bien plus petits que ceux habituellement observés en soudage, généralement de l'ordre du centimètre. Par ailleurs, leur profondeur dépasse la hauteur d'une couche [Yasa 2011, DebRoy 2018], ce qui permet la fusion totale de l'épaisseur de poudre déposée et la refusion au moins partielle de la couche précédemment construite, assurant ainsi une continuité entre les couches.

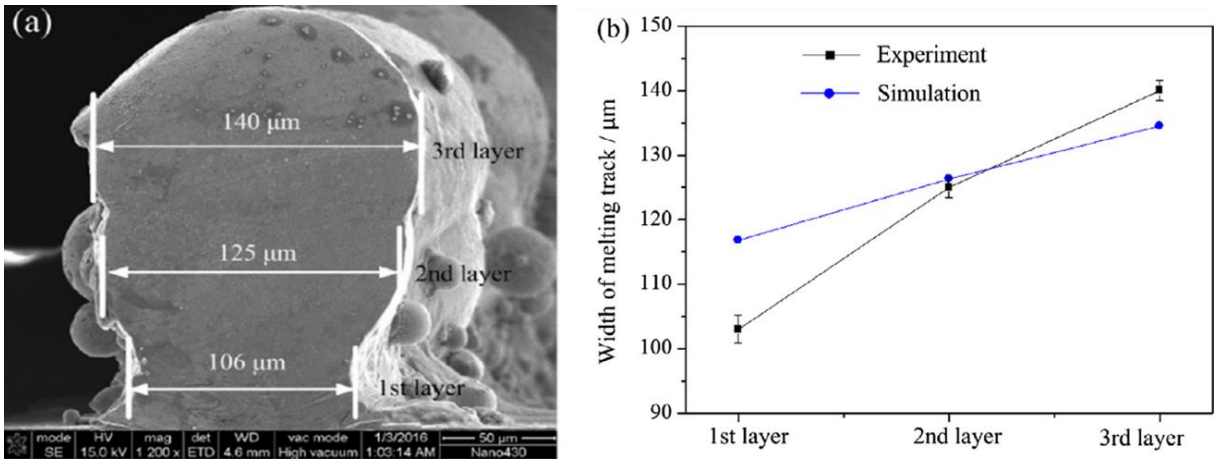


Figure 1.8. (a) Section transverse d'un empilement de 3 couches en 316L obtenu par LBM, (b) évolution des largeurs de bain fondu expérimentales et numériques pour les 3 couches [Liu 2018b]

Il est également relevé de façon récurrente dans la littérature que la taille des BF augmente au cours de la fabrication des premières couches [Manvatkar 2014, Liu 2017, Liu 2018b]. Cette augmentation des dimensions du BF est due à l'accumulation de chaleur dans la pièce causée par l'éloignement du substrat, qui réduit la dissipation thermique par conduction à travers ce dernier. Le bain fondu est alors plus large, profond et allongé que dans les couches précédentes. Nous pouvons observer cette augmentation sur l'image (a) de la Figure 1.8 représentant la coupe transverse d'un empilement comportant trois couches superposées. Cette même étude a néanmoins montré que l'augmentation des dimensions du BF ralentit progressivement à cause de la diminution de l'influence du substrat dans les échanges thermiques (Figure 1.8 b).

1.2.3.6. Effet des paramètres procédé sur le bain fondu

Dans la section précédente nous avons présenté les caractéristiques du bain de fusion généralement formé au cours du procédé LBM. Cependant en fonction de l'importance des différents phénomènes cités dans les sections précédentes, le bain obtenu est amené à changer. Ces phénomènes dépendant eux-mêmes des paramètres opératoires, cette section a pour objectif d'étudier l'influence des paramètres procédé sur la physique du bain.

Les études qui se sont intéressées à l'influence des paramètres de fabrication sur le bain fondu ont toutes montré que la densité volumique d'énergie E (J.m^{-3}), proportionnelle au rapport P/v (W.s^{-1}), et donc par extension les paramètres de vitesse v et de puissance P du laser, sont les plus influents. La densité d'énergie correspond au rapport de la puissance sur le produit de la vitesse v, de la distance inter-cordon HD (ou du diamètre focal du faisceau dans le cas d'un monocordon) et de l'épaisseur d'une couche t (*cf.* paragraphe 3.3.1.4).

Si nous nous intéressons dans un premier temps à la taille du bain, il a été remarqué que l'augmentation de la densité d'énergie, par augmentation de la puissance ou par diminution de la vitesse, provoque un accroissement de la largeur et de la profondeur du bain [Antony 2014, Bertoli 2017, Sun 2017, Zhang 2019b]. Les valeurs de profondeur et largeur de bain obtenues

expérimentalement pour la fabrication d'un monocordon avec différentes densités volumiques d'énergie sont présentées sur laFigure 1.9. Des observations similaires ont été faites par Zhang et al. lors d'une étude couplant essais et simulations numériques [Zhang 2019b].

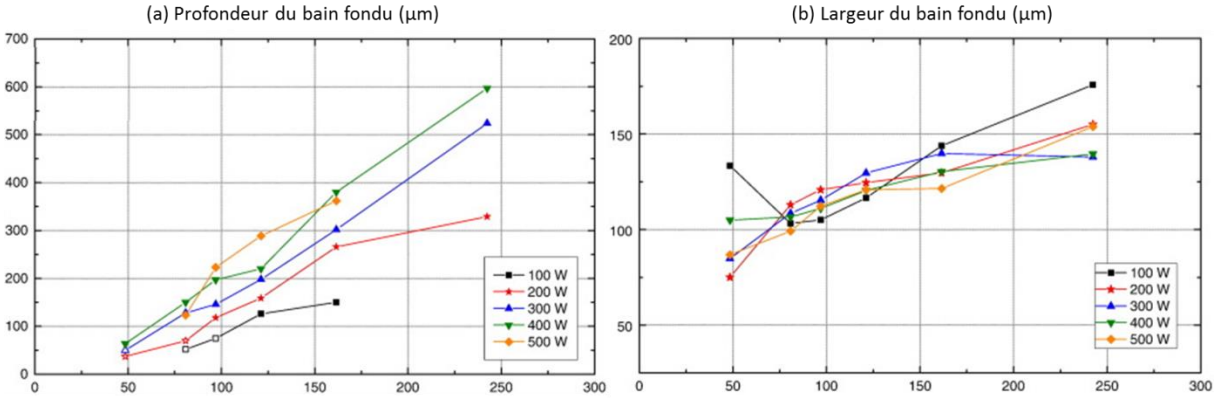


Figure 1.9. Evolution de (a) la profondeur et (b) la largeur du bain fondu en fonction de la densité d'énergie volumique (J.mm^{-3}) [Bertoli 2017]

Concernant la géométrie du bain, il ressort qu'en fonction des valeurs de densité d'énergie appliquées, deux modes de fusion peuvent être rencontrés [King 2014, Bertoli 2017, Zhang 2019b] : le mode de conduction et le mode « *keyhole* » (Figure 1.10). Lorsque la densité d'énergie apportée est trop importante, le bain formé est alors très profond et atteint des températures très élevées qui entrainent la vaporisation localisée du métal : c'est le mode « *keyhole* » [King 2014]. Ce mode, combiné à l'effet Marangoni, peut générer des porosités dues à la présence de gaz piégé dans le bain (Figure 1.10 (a)).

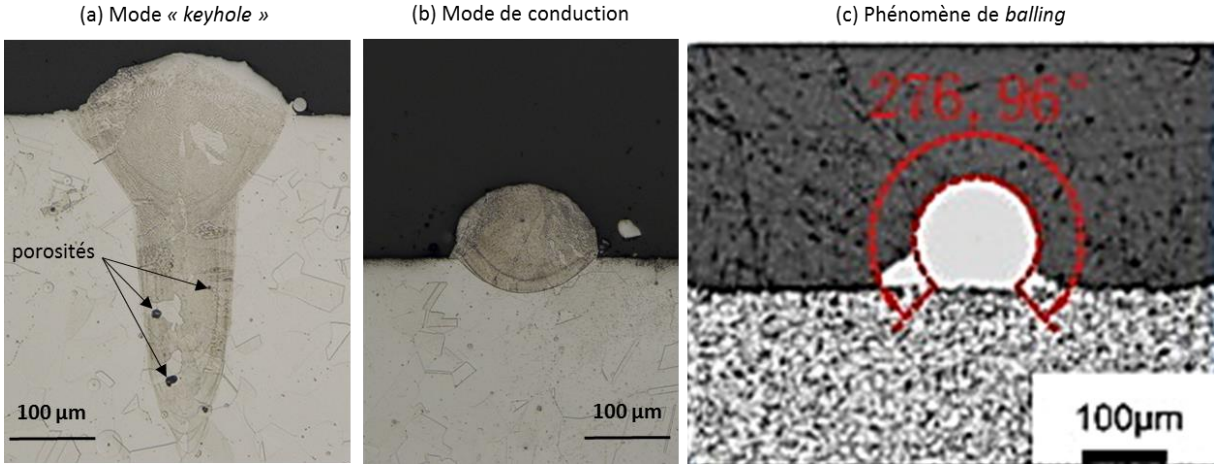


Figure 1.10. Coupes transversales de bains fondus obtenus en mode (a) « keyhole » [King 2014] (b) de conduction classique [King 2014] et (c) présentant un défaut de type« balling » [Zhang 2013]

A l'inverse, quand l'énergie délivrée au lit de poudre est insuffisante, le cordon est discontinu et des manques de fusion sont observés (Figure 1.11 (c) et (d)). Des amas ellipsoïdaux et sphériques de différentes tailles sont alors visibles à la surface du cordon, conduisant à un mauvais état de surface. Les températures et les dimensions du bain fondu étant alors très faibles, les zones de contact entre le bain fondu, les particules de poudre et le substrat sont limitées. Par conséquent, certaines particules n'entrent pas complétement dans la phase liquide, conduisant à une fusion incomplète et générant un défaut appelé « *balling* » [Tolochko 2004] visible en coupe transversale sur la Figure 1.10 c.

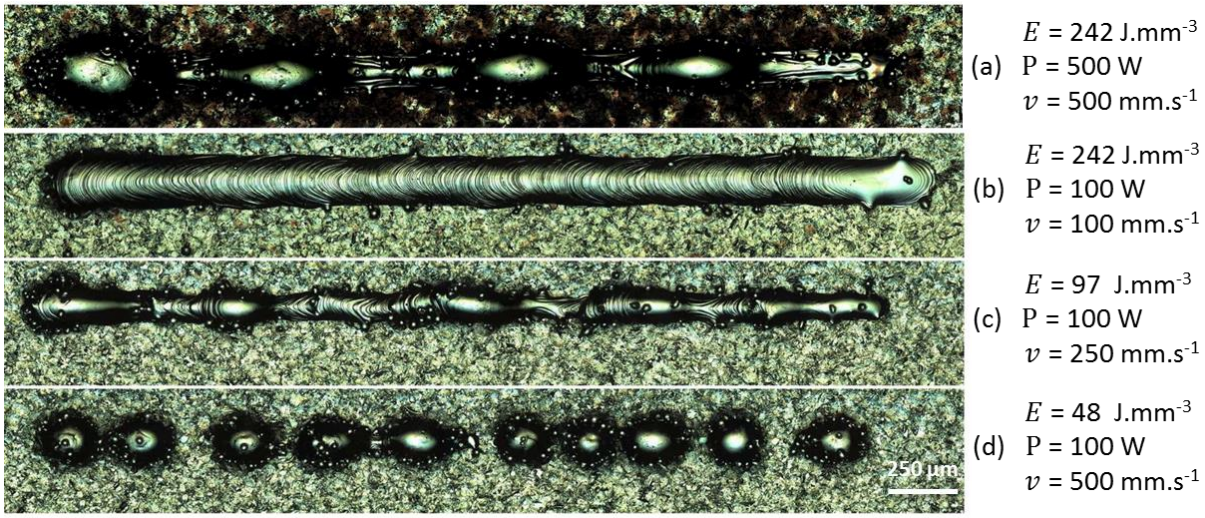


Figure 1.11. Vue de dessus de monocordons 316L obtenus pour différentes valeurs d'énergie [Bertoli 2017]

De nombreuses études ont montré que la continuité des cordons dépend des variations de densité d'énergie [Zhang 2013, Antony 2014, Bertoli 2017, Mukte 2018, Sun 2017, Zhang 2019b]. Elles ont notamment mis en avant le fait qu'une valeur de E élevée favorise l'obtention d'un cordon continu (Figure 1.11), limite l'apparition de porosités dans la pièce réalisée, et permet donc l'obtention d'une densité de la pièce finale élevée [Yasa 2011, Cherry 2015, Wang 2016, Mutke 2018, Bertoli 2019] (Figure 1.12 a). L'étude menée par Bertoli et al. en 2017 a toutefois montré que pour une valeur de densité d'énergie constante, si la vitesse devient trop élevée le cordon est discontinu (Figure 1.11 (a) et (b).

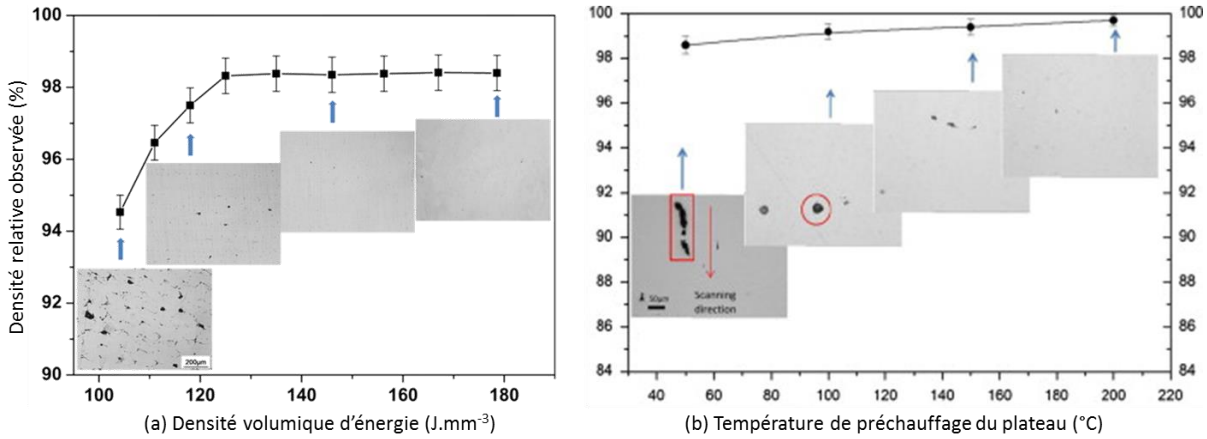


Figure 1.12. Evolution de la densité relative de la pièce en fonction de : (a) la densité volumique d'énergie [Wang 2016], (b) la température de préchauffage du plateau [Zhang 2013]

L'effet sur le bain fondu d'autres paramètres moins influents a aussi été étudié. L'influence du temps d'exposition et de la distance inter-cordon sur le bain a notamment été étudiée par Mutke et al. [Mutke 2018]. Dans une autre étude, Andreau et al. se sont intéressés à la façon dont les dimensions et la géométrie du bain sont affectées par le lien entre la direction de balayage et le flux de gaz [Andreau 2019]. Ces travaux de recherche ont permis d'observer que lorsque le flux de gaz est aligné avec la direction de balayage, la profondeur du bain diminue de 33 %. Une étude menée par Zhang et al. en 2013 s'est penchée sur l'impact du préchauffage du plateau sur la densité finale de la pièce obtenue [Zhang 2013]. Ils ont mis en avant le fait qu'un préchauffage du plateau permet de limiter l'apparition de porosités dans la pièce et donc favorise l'obtention d'une pièce de densité élevée

(Figure 1.12 b). Des travaux de recherche réalisés par Kruth et al. en 2010 ont montré la même augmentation de densité mais en fonction du nombre de refusions de la zone d'intérêt [Kruth 2010].

Les valeurs de puissance et de vitesse appliquées au cours du procédé et par extension celle de densité d'énergie influençant directement la géométrie du bain, les conditions de solidification sont amenées à évoluer.

1.2.4. Diagramme de Kurz

L'analyse des caractéristiques du bain nous permet d'évaluer deux grandeurs physiques fondamentales en solidification : le gradient thermique et le taux de croissance le long du front de solidification, localisé au niveau de l'interface liquide/solide dans la partie arrière du bain [Kurz 1984]. Ces deux grandeurs vont en effet déterminer en grande partie les caractéristiques morphologiques et dimensionnelles de la structure de solidification qui va se former.

1.2.4.1. Le gradient thermique G

Le gradient thermique G, donné en K.m^{-1} , est orienté dans la direction normale aux isothermes. Il peut varier fortement le long de l'interface solide/liquide en fabrication additive. Une étude menée par Wang et al. en 2016 s'est intéressée aux mécanismes de croissance agissant au cours de la fabrication par LBM d'une pièce en 316L [Wang 2016]. Cette étude principalement basée sur l'analyse des champs thermiques à l'intérieur du bain liquide, a montré que le gradient thermique varie fortement en fonction de sa position le long de l'interface solide/liquide (Figure 1.13). En effet, nous pouvons observer sur la Figure 1.13 (b) que le gradient thermique à l'interface solide/liquide, supposée confondue avec l'isotherme de liquidus, est plus élevé dans l'axe de symétrie du bain (axe OM) que dans l'axe orienté à 45° (axe ON).

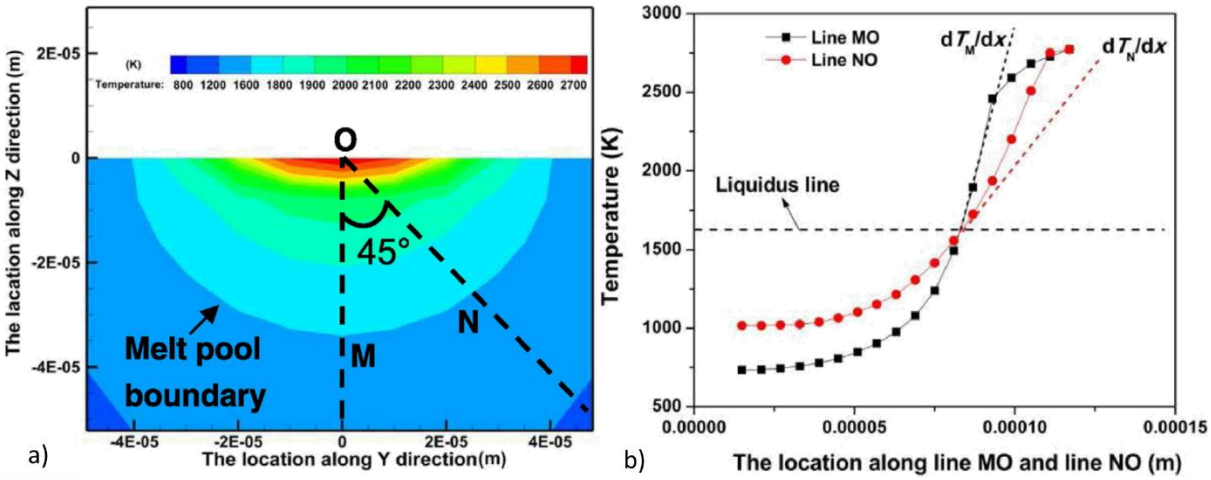


Figure 1.13. (a) Champ de températures au niveau du bain fondu calculé en coupe transversale. (b) Distribution des températures selon les lignes (OM) et (ON) [Wang 2016]

De manière générale, il est observé en soudage comme en fabrication additive que le gradient thermique à l'interface solide/liquide est plus élevé sur les bords du bain de fusion, où la solidification démarre, qu'à l'arrière du bain, où la solidification s'achève [Gaumann 1999, Liu 2018a].

1.2.4.2. Le taux de croissance V

Le taux de croissance V, exprimé en m.s^{-1}, correspond à la vitesse de déplacement de l'interface solide/liquide. Il est lié à la vitesse de balayage ou plus généralement à la vitesse de déplacement de la source de chaleur. Il peut être approximé de façon simplifiée comme suit :

$$|V| = |v|\cos(\varphi) \tag{1}$$

où v est la vitesse de la source de chaleur en m.s^{-1} et φ l'angle entre la normale à l'interface solide/liquide et la direction de déplacement de la source (Figure 1.14).

Tout comme le gradient thermique, le taux de croissance varie fortement selon la position considérée par rapport à la limite du bain de fusion. L'équation (1) et la Figure 1.14 montrent que le taux de croissance augmente depuis la partie inférieure du bain, où l'angle φ est égal à 90°, vers l'arrière du bain, où l'angle φ est nul. A cet endroit, le taux de croissance est ainsi égal à la vitesse de déplacement de la source.

1.2.4.3. Relation entre V, G et structures de solidification

Nous avons évoqué en début de paragraphe 1.2.4. la dépendance des caractéristiques des structures de grains aux valeurs de V et G. En effet, la morphologie du front de solidification dépend du rapport $\frac{G}{V}$, tandis que la finesse de la microstructure formée découle du produit GV, produit correspondant au taux de refroidissement, $|\dot{T}|$. La Figure 1.14 (a) proposée par Kurz et Fischer [Kurz 1984] permet d'illustrer l'évolution des structures de grain en fonction des valeurs de G et V. Partir d'un rapport $\frac{G}{V}$ élevé puis diminuer sa valeur progressivement (*i.e.* se déplacer du coin inférieur droit vers le coin supérieur gauche) conduit à un changement de morphologie du front de solidification, qui passe successivement d'une morphologie planaire à cellulaire, colonnaire dendritique, puis équiaxe dendritique. Pour un rapport $\frac{G}{V}$ constant, l'augmentation du produit GV conduit à un raffinement de la microstructure et des structures granulaires (déplacement du coin inférieur gauche vers le coin supérieur droit).

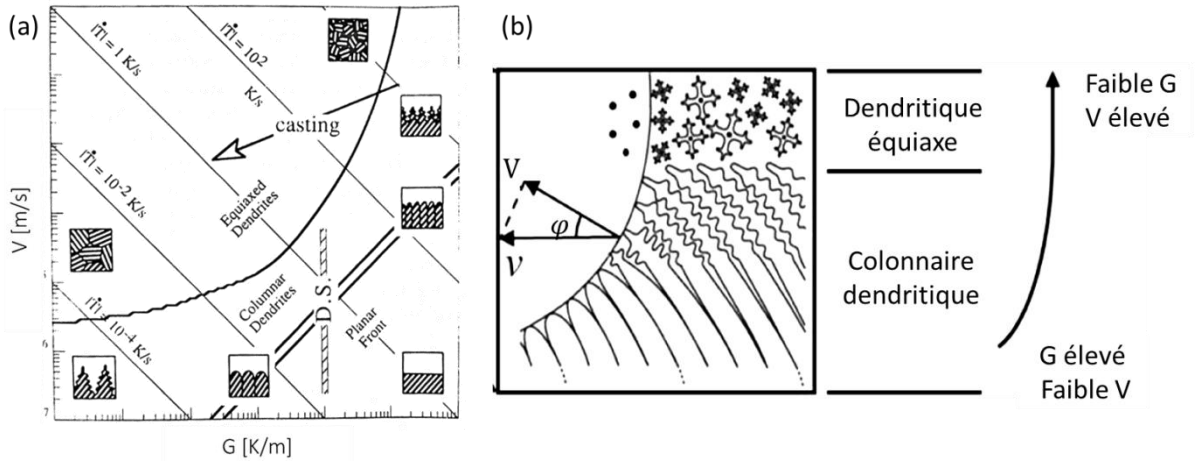


Figure 1.14. (a) Effet du gradient thermique (G) et du taux de croissance (V) sur la morphologie et la taille des sous-structures [Kurz 1984]. (b) Représentation des variations de structure de grains au sein d'une zone fondue en FA [Liu 2018a]

Nous avons vu précédemment que les valeurs de V et G varient fortement le long de la frontière du bain de fusion, comme représenté sur l'image (b) de la Figure 1.14. Par conséquent les structures de grains formées vont varier en fonction de leur localisation dans le bain. Comme le rapport $\frac{G}{V}$ diminue depuis la partie inférieure du contour du bain vers l'arrière du bain (G diminue alors que V augmente), il est possible dans certains cas d'observer un changement de morphologie de la structure de grains qui passe de colonnaire en périphérie, à équiaxe dans la partie centrale : on parle

alors de transition colonnaire-équiaxe (CET). La maîtrise de G et V permettrait donc de contrôler la structure granulaire formée dans le cas du monocordon.

Lors de la fabrication d'une pièce par procédé LBM, une puissance élevée est fournie sur une zone focale réduite (50-100 µm), produisant ainsi des densités d'énergie considérables [DebRoy 2018]. Par ailleurs, le flux de chaleur généré se déplace rapidement à cause des vitesses de balayage élevées, et de façon répétée à cause de la superposition des couches successives en FA. De la combinaison de ces conditions résultent alors en LBM, de très forts gradients thermiques et taux de croissance [Li 2017, DebRoy 2018, Mukherjee 2018b, Mukte 2018]. La Figure 1.15 représente le diagramme GV obtenu pour la fabrication par LBM de plusieurs pièces en 316L composées de 5 couches superposées, réalisées à différentes vitesses de balayage [Mukherjee 2018b]. Nous pouvons voir que les valeurs de gradient thermique varient entre 4.10^6 et 1.10^7 $K.m^{-1}$ et que le taux de croissance est de l'ordre du $m.s^{-1}$. D'après ce diagramme, les structures résultantes devraient donc être constituées de grains colonnaires.

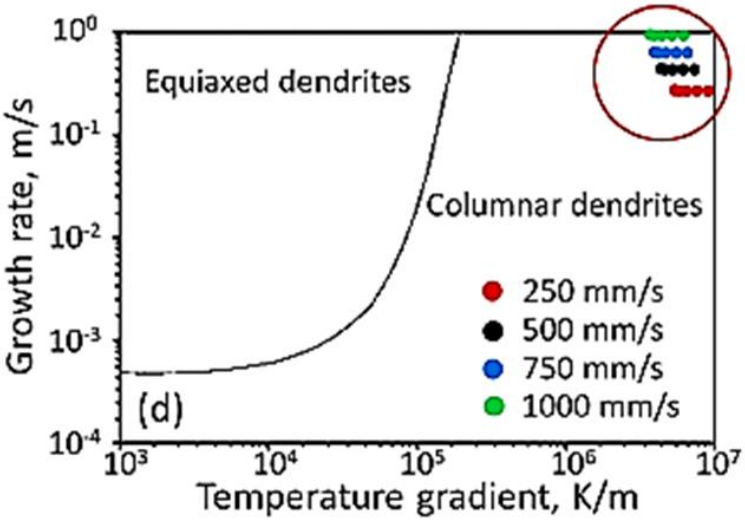


Figure 1.15. Valeurs de G et V obtenues pour quatre vitesses de balayage lors de la réalisation par LBM d'éprouvettes en 316L composées de 5 couches superposées [Mukherjee 2018b].

1.3. Structures de grains observées en FA LBM

Il existe une grande diversité de structures de grains observées en fabrication additive, du fait des spécificités liées aux différents procédés. Dans ce paragraphe nous nous focaliserons sur les grains habituellement observés dans des aciers inoxydables austénitiques obtenus par fusion laser sur lit de poudre, ainsi qu'à l'influence des paramètres procédés présentés au paragraphe 1.2.3 sur ces grains et sur la formation du bain fondu. Rappelons qu'avec le procédé LBM, le laser vient chauffer localement la poudre jusqu'à produire sa fusion et se déplace, formant ainsi un bain fondu qui se déplace lui aussi, suivant la position du laser. La solidification se produit alors au sein du liquide situé à l'arrière du bain de fusion.

1.3.1. Caractéristiques des structures de grain LBM

En LBM les pièces fabriquées étant très majoritairement formées sur un substrat de même composition chimique, la formation des structures cristallines lors de la première couche de poudre déposée se déroule quasiment exclusivement par croissance épitaxiale à partir des grains partiellement fondus du substrat présents à l'interface avec la zone fondue [Yasa 2011, Sun 2017, Mutke 2018, Andreau 2019]. Pour les couches suivantes, la formation des grains se fait par

croissance épitaxiale des structures de grains formées dans les couches précédentes et ayant été en partie refondues. Les caractéristiques de la structure granulaire finale vont dépendre des valeurs de V et G.

Cela correspond bien à ce qui est généralement observé dans la littérature : les diverses études menées sur des aciers inoxydables austénitiques obtenus par LBM font toutes état de grains colonnaires traversant plusieurs couches déposées, orientés dans la direction de construction (direction verticale) [Casati 2016, Liverani 2017, Wang 2016, Zhang 2013, Zhong 2015, Andreau 2019, Kong 2019]. Par ailleurs, l'ensemble de ces études montre également que les grains colonnaires sont orientés majoritairement suivant les directions <100>. Ceci s'explique par le fait que le gradient thermique est maximal dans la direction de construction à cause du pompage thermique effectué par le plateau (Figure 1.13), et par le fait que les directions <100> correspondent aux directions préférentielles de croissance des métaux cubiques à face centrés (CFC). Les grains dont les directions <100> sont faiblement désorientées par rapport à la direction de construction, malgré leur croissance plus lente, vont donc bloquer la croissance des grains voisins : c'est le phénomène de croissance compétitive. Ce phénomène explique l'obtention d'une structure colonnaires texturée visible sur la Figure 1.16.

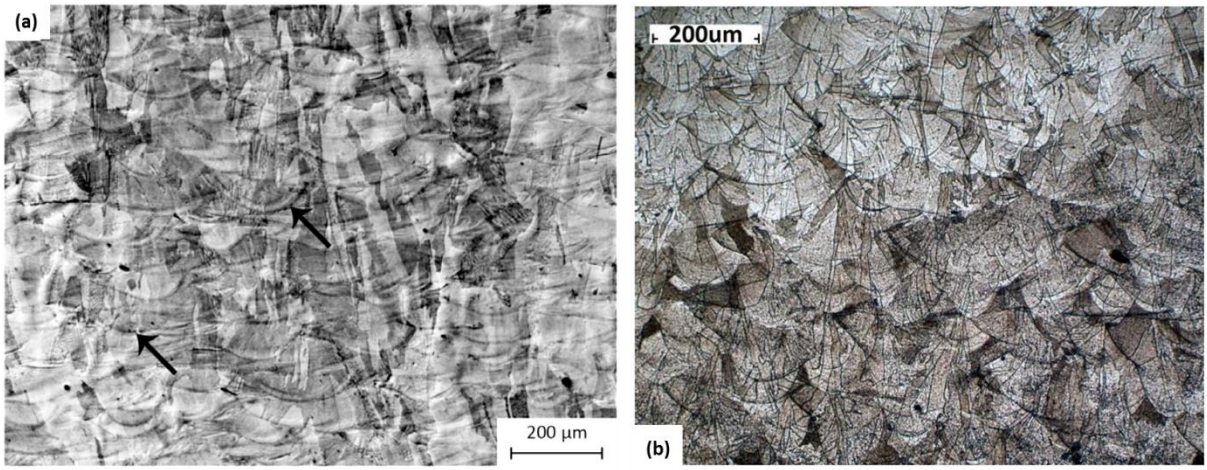


Figure 1.16. Grains colonnaires observés dans deux pièces en 316L fabriquées par LBM et formés par croissance épitaxiale à partir du substrat (a) [Kurzynowski 2018] (b) [Cherry 2015]

Cependant, une étude menée en 2017 par Sun et al. a montré une variation d'orientation cristallographique entre les dernières couches fabriquées et le reste de la pièce, témoignant selon eux d'une germination au niveau des dernières couches formées [Sun 2017]. Une autre étude datant de 2018 a également montré localement la présence de grains d'apparence équiaxe au niveau du centre du bain fondu, ce qui semblerait montrer qu'il y a eu germination de nouveaux grains [Mutke 2018]. Par ailleurs, certaines études LBM menées sur des alliages de titane [Antonysamy 2013] ou sur des alliages d'aluminium [Thijs 2013] ont révélé la formation de petits grains équiaxes sur les bords du bain fondu ou à l'interface entre deux couches (au niveau du bas du bain fondu). Néanmoins très peu d'explications sont fournies dans ces différentes études sur les raisons de la présence de ces grains équiaxes, qui restent donc à préciser.

Un aspect supplémentaire qui ressort régulièrement dans la littérature est l'augmentation de la taille des grains dans la hauteur de la pièce (Figure 1.17). Cela peut s'expliquer d'une part par le phénomène de compétition de croissance, et d'autre part par le fait que lors de la fabrication des premières couches, le substrat dense et massif favorise le refroidissement des cordons par conduction thermique, accélérant la solidification du bain de fusion [Manvatkar 2015, Liu 2018b]. Au

fur et à mesure de la fabrication de la pièce, le substrat va ensuite se trouver de plus en plus éloigné de la couche en cours de réalisation, évacuant alors moins bien la chaleur et modifiant donc le gradient. Par conséquent, la pièce se réchauffe et le taux de refroidissement diminue, laissant davantage de temps aux grains pour se former lors de la solidification. Cependant, le substrat s'éloignant de plus en plus, son effet sur le refroidissement du cordon devient négligeable, ce qui se caractérise par une stabilisation de la taille des grains à partir d'un certain nombre de couches déposées.

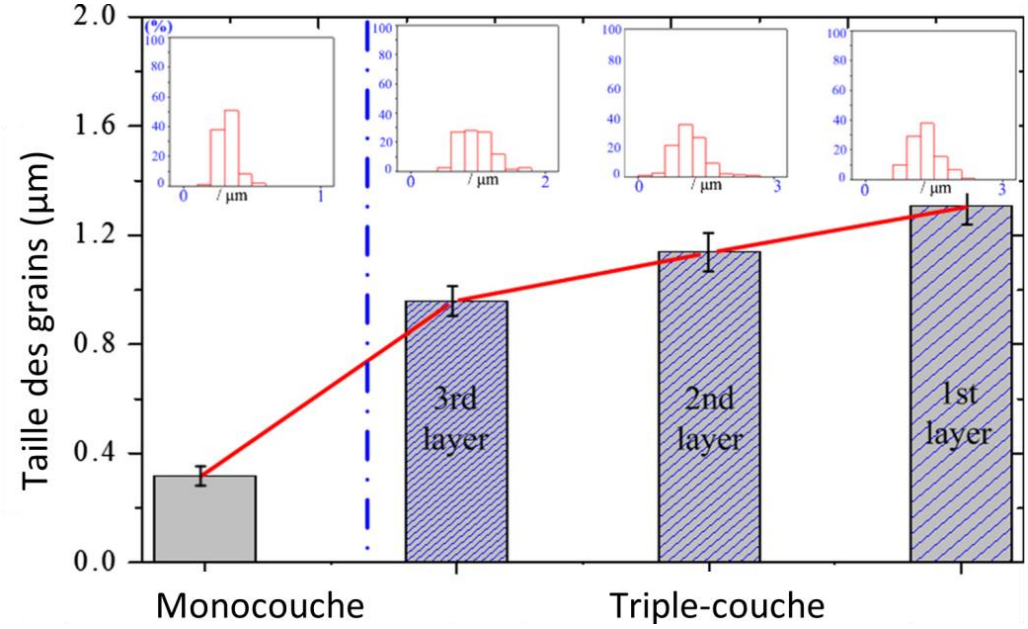


Figure 1.17. Taille des grains présents dans l'unique couche d'un cordon monocouche et dans les trois couches d'un cordon triple couche [Liu 2018b]

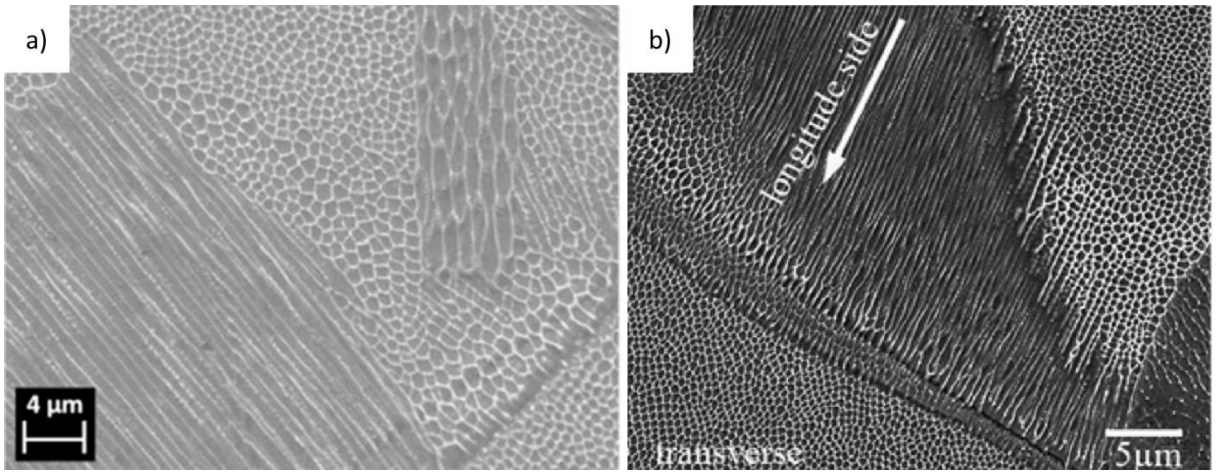


Figure 1.18. Sous-structures cellulaires observées dans deux 316L LBM (a) [Casati 2016] b) [Zhong 2015]

Une autre originalité des structures observées en FA et notamment en LBM dans les aciers inoxydables austénitiques, est la présence de sous-structures cellulaires à l'intérieur des grains (Figure 1.18). Ces sous-structures sont dues aux forts gradients thermiques et à la solidification rapide induite par un taux de refroidissement très élevé et par le cyclage thermique du procédé [Yasa 2011, Zhang 2013, Wang 2016]. Ces sous-structures cellulaires peuvent varier à l'intérieur d'un même grain, ce qui génère une désorientation à l'intérieur du grain [Andreau 2019, Kurzynowski 2018].

1.3.2. Influence des paramètres procédé sur les structures de grain

Tout comme pour le bain fondu, de nombreuses études se sont intéressées à l'influence de la densité d'énergie sur les structures de grain. Tout d'abord, il a été montré qu'une augmentation de la densité d'énergie, par diminution de la vitesse et/ou augmentation de la puissance, entraine un grossissement de la taille de grains [Kruth 2010, Wang 2016, Sun 2017, Bertoli 2019]. Cette augmentation de la taille des grains s'explique par le fait que pour des valeurs plus élevées de densité d'énergie, les vitesses de refroidissement sont plus faibles, laissant davantage de temps aux grains pour croitre. Cette hypothèse est confirmée par l'étude menée par Wang et al., qui révèle une augmentation de l'espacement des bras dendritiques primaires à mesure que la densité d'énergie augmente [Wang 2016].

L'étude menée par Bertoli et al. en 2019 s'est intéressée en particulier à l'évolution des paramètres de solidification (*i.e.* le gradient thermique G, le taux de croissance V, le taux de refroidissement GV et le rapport $\frac{G}{V}$) en fonction de l'énergie linéique, qui correspond au rapport P/v. En observant les deux graphiques présentés sur la Figure 1.19 nous pouvons voir que le taux de refroidissement est inversement proportionnel à l'énergie linéique puisqu'il diminue fortement à mesure qu'elle augmente. Le rapport G/V quant à lui n'apparait que très peu affecté par les variations d'énergie linéique, bien qu'une légère augmentation semble être remarquée. Le rapport G/V gouvernant le type de structures granulaires obtenues, cette étude a déduit qu'il était impossible d'obtenir une transition colonnaire-équiaxe dans un monocordon réalisé par procédé LBM simplement en faisant varier les valeurs des paramètres procédés [Bertoli 2019].

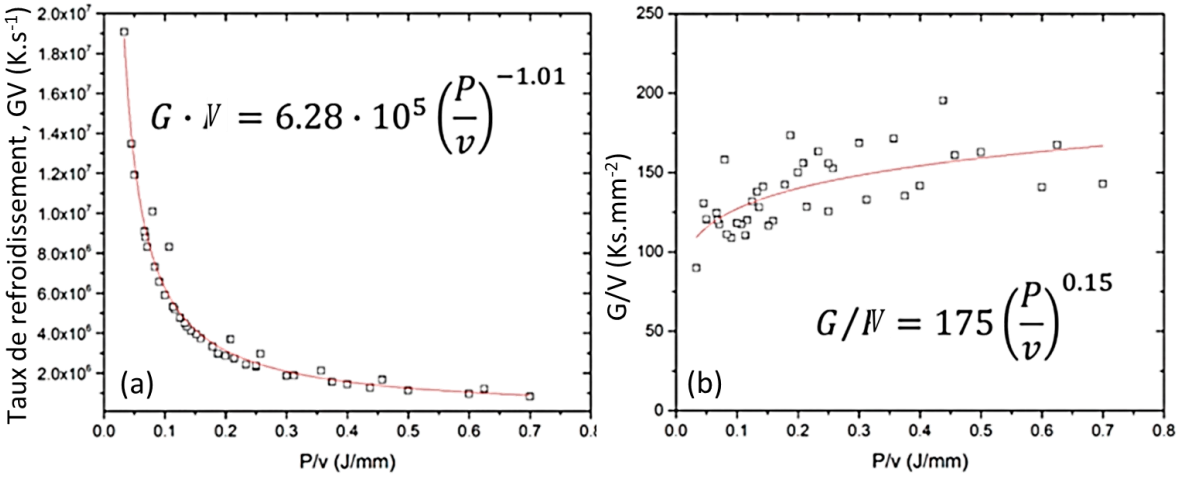


Figure 1.19. Evolutions en fonction du rapport P/v (a) du taux de refroidissement et (b) du rapport G/V [Bertoli 2019]

Cette étude ainsi que celle menée par Kurzynowski et al. [Kurzynowski 2018] ont montré l'amélioration de l'alignement des grains avec la direction de construction (direction verticale) lorsque la densité d'énergie augmente. Une explication probable à cette observation est que la direction du gradient thermique, et donc du flux de chaleur, a été modifiée et s'est alignée avec la direction de construction. Cette modification de direction du flux de chaleur entraine également la modification de la texture de la pièce [Kurzynowski 2018]. En effet, si nous comparons les figures de pôles (a) et (b) visibles sur la Figure 1.20, nous pouvons remarquer que la simple augmentation de la puissance (de 100 W pour la ligne (a) à 200 W pour la ligne (b)) entraine un renforcement de la texture cubique caractérisée par un fort alignement de l'axe <001> avec la direction de construction (axe z). L'augmentation de densité d'énergie, en causant l'alignement de la direction principale de

flux de chaleur avec la direction de construction, renforce alors la texture cristallographique de la pièce.

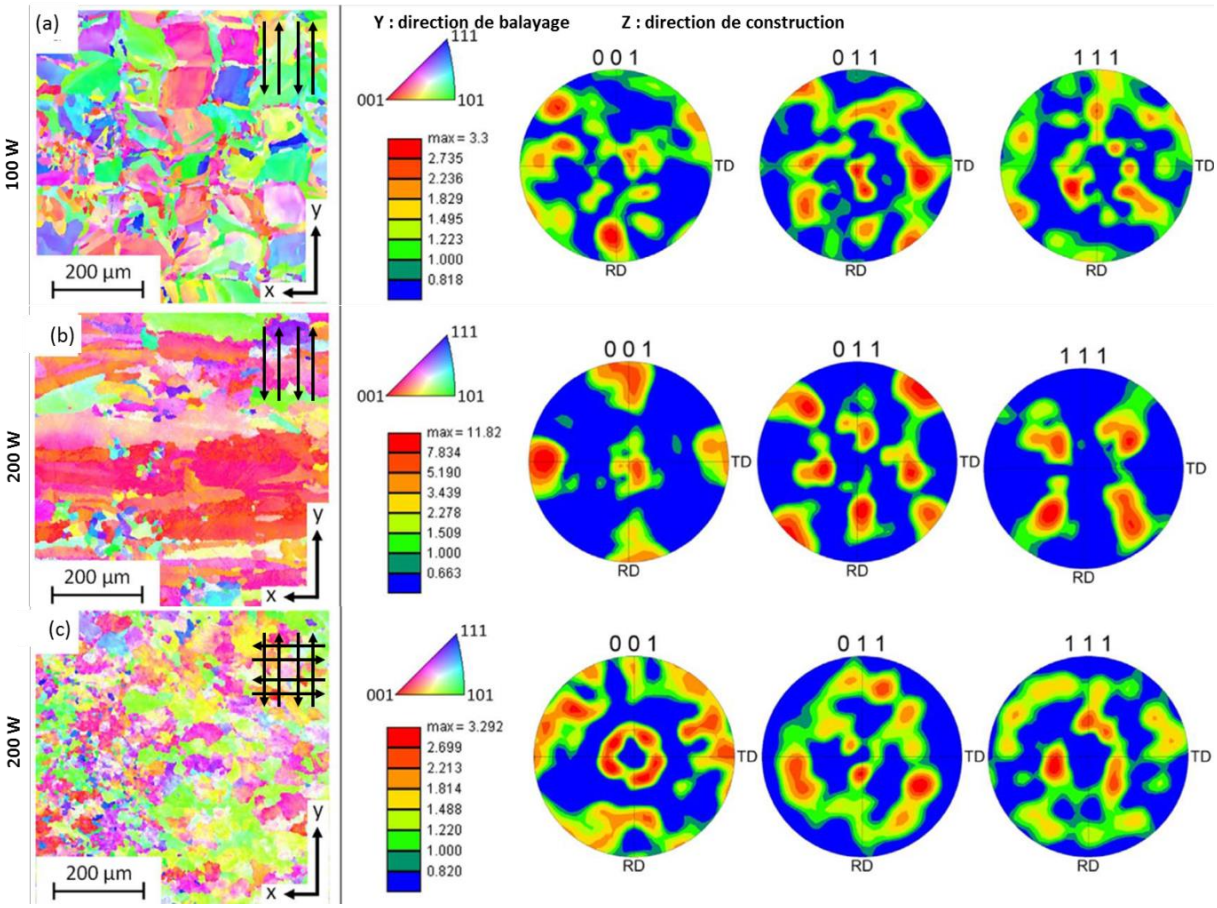


Figure 1.20. Cartographies EBSD et figures de pôles correspondantes obtenues pour une configuration (a) initiale, (b) identique à l'initiale mais avec une puissance doublée et (c) identique à la deuxième mais avec une refusion systématique de la partie fondue [Kurzynowski 2018]

La densité d'énergie n'est pas le seul paramètre capable d'influer sur la texture cristallographique. La stratégie de construction joue également un rôle important. Dans cette même étude menée par Kurzynowski, la stratégie initiale consistait à balayer la pièce de façon alternée puis à effectuer une rotation de 90° entre chaque couche. Une deuxième stratégie a été testée, identique à la première à la différence près que chaque couche a été refondue lors d'un deuxième balayage (alterné toujours mais tourné à 90° par rapport au premier). La structure finale obtenue est alors bien différente de la précédente, et l'on peut cette fois observer une texture fibreuse dans la direction <001> (Figure 1.20 (c)).

Enfin il est important d'insister sur le fait qu'indépendamment des paramètres procédé appliqués, la géométrie de la pièce influence fondamentalement les échanges thermiques et en particulier le gradient de température et le taux de croissance, modifiant ainsi la structure de grains formée. L'influence de la géométrie a été encore très peu étudiée puisque la plupart des études se sont intéressées à des géométries simples (cubique ou bloc rectangulaire) ou bien à des monocordons.

L'ensemble de ces études montre que les échanges thermiques diffèrent au cours de la fabrication en fonction des valeurs de paramètres opératoires appliquées, de la stratégie de construction choisie ainsi que de la géométrie de la pièce. Les structures de grains formées dépendant directement des échanges thermiques et en particulier du gradient de température et du taux de croissance, il est

donc envisageable de contrôler la structure de grains formée en adaptant les paramètres procédé. Afin de comprendre plus en détails la formation de ces structures de grains dendritiques et colonnaires observées dans le procédé LBM, la physique de la solidification est étudiée dans la section suivante.

1.4. Physique de la solidification

Sont présentés dans cette partie les principaux phénomènes physiques intervenant lors de la solidification, ainsi que leurs spécificités associées au soudage et à la fabrication additive. Elle s'appuie principalement sur l'ouvrage de Dantzig et Rappaz [Dantzig 2009]. La solidification est une transformation de l'état liquide à l'état solide qui se déroule dans un corps pur dès lors que le liquide atteint une température inférieure à la température de fusion. Elle se décompose en deux étapes principales : la germination et la croissance.

1.4.1. Germination

Dans le cas où un métal est refroidi progressivement jusqu'à une température inférieure à sa température de fusion, la solidification débute par une phase de germination. La germination, aussi nommée nucléation, consiste en la formation de germes constitués de réseaux d'atomes organisés suivant une structure cristalline spécifique. Ces germes vont ensuite donner naissance à des grains. La proportion de solide à l'issue de cette étape est très faible. Deux types de germinations se distinguent : la germination homogène et la germination hétérogène.

1.4.1.1. Germination homogène

La germination homogène se déroule dans le bain liquide. Pour bien comprendre ce phénomène il est nécessaire d'introduire la notion de variation d'enthalpie libre, ΔG. Considérant un germe sphérique de rayon r (m) formé au sein d'un liquide pur homogène, la variation d'enthalpie libre peut être décrite comme la somme de deux contributions :

- ΔG_V, la variation d'enthalpie libre liée au changement de phase liquide-solide. Cette composante est proportionnelle au volume de liquide transformé et donc proportionnelle à r^3 ;
- ΔG_S, la variation d'enthalpie libre liée à la création de l'interface solide/liquide. Cette composante est proportionnelle à la surface de l'interface, et donc proportionnelle à r^2.

La variation d'enthalpie libre ΔG étant la somme de ces composantes volumique et surfacique, elle est calculée de la façon suivante :

$$\Delta G = \Delta G_V + \Delta G_S = \frac{4\pi}{3} . \Delta G_v . r^3 + 4\pi . r^2 . \gamma \qquad (2)$$

avec ΔG_v la différence d'enthalpie libre par unité de volume des phases solide et liquide, en J.m^{-3} et γ l'énergie de surface de l'interface solide/liquide en J.m^{-2}.

La Figure 1.21 représente l'évolution de l'enthalpie libre ainsi que celle de ses deux composantes en fonction de r, dans le cas où la température est inférieure à la température de fusion. A cette température, le liquide est métastable et donc ΔG_V est négative, contrairement à ΔG_S qui est toujours positive, indépendamment de la température. En observant la Figure 1.21 nous pouvons remarquer que deux cas se distinguent selon la taille du germe formé :

1. $r < r_0$: dans ce cas l'augmentation du rayon du germe produit une augmentation de ΔG. Un germe formé sous l'effet de l'agitation thermique aura donc tendance à disparaitre pour minimiser son enthalpie libre. On parle alors d'embryon.
2. $r > r_0$: dans ce cas l'accroissement de la taille du germe entraîne une diminution de ΔG. Le germe va donc croître pour minimiser son enthalpie libre, formant ainsi un grain.

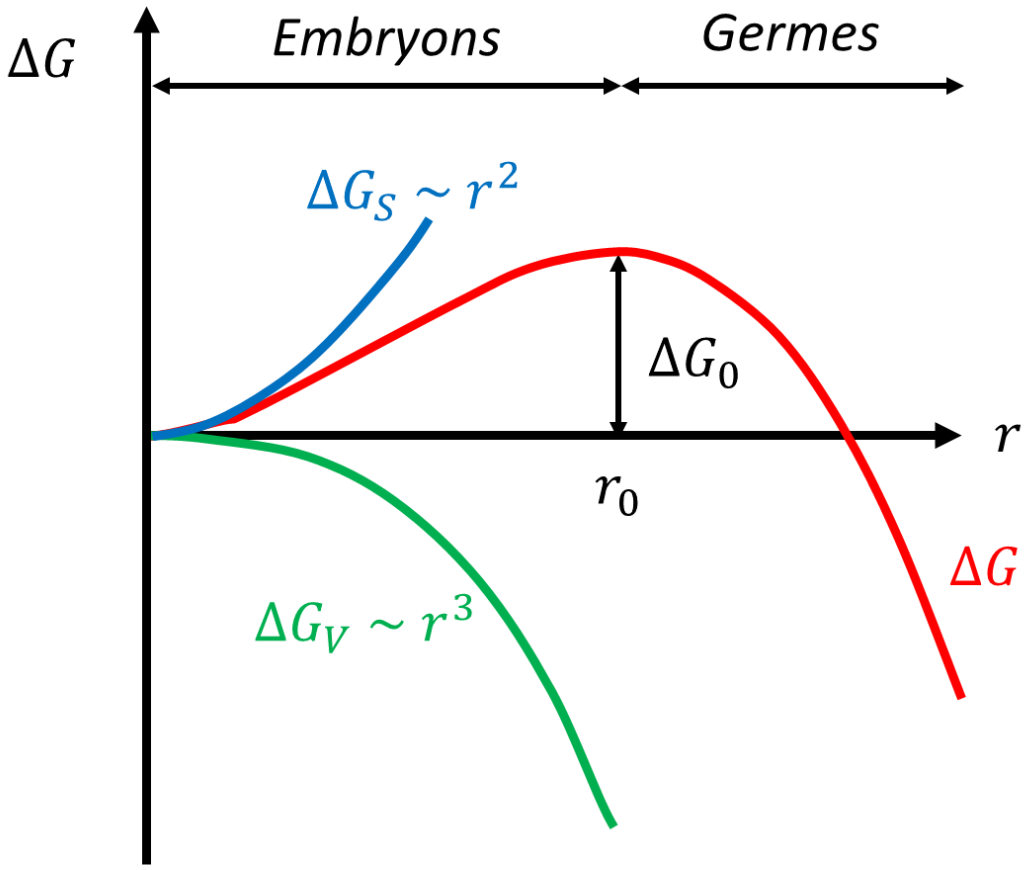


Figure 1.21. Évolution de la variation d'enthalpie libre ΔG en fonction du rayon du germe

Pour qu'un embryon devienne un germe capable de croître pour donner un grain par la suite, il est donc nécessaire que son rayon atteigne une valeur critique r_0 à partir de laquelle la variation d'enthalpie libre décroit. Ce rayon critique étant atteint pour une valeur maximale de ΔG, on a donc :

$$r_0 = -\frac{2\gamma}{\Delta G_v} = \frac{2\gamma . T_{Liq}}{\rho L . \Delta T} \quad (3)$$

$$\Delta G_0 = \frac{16\pi\gamma^3}{3\Delta G_v{}^2} \quad (4)$$

avec T_{Liq} la température de fusion en K, ρ la masse volumique en kg.m^{-3}, L la chaleur latente de fusion en J.kg^{-1} et ΔT la surfusion en K (différence entre la température de fusion du métal et la température du liquide).

Un germe de rayon critique r_0 pourra donc ce former si l'agitation thermique permet de franchir la barrière d'énergie ΔG_0 , qui correspond à l'enthalpie libre d'activation de la germination. Cette barrière d'énergie, tout comme le rayon critique, diminue lorsque la surfusion augmente, c'est-à-dire lorsque la température du liquide diminue.

1.4.1.2. Germination hétérogène

La germination homogène demande une enthalpie libre d'activation importante pour pouvoir former une phase solide à partir d'une phase purement liquide. Lorsque la germination se produit à partir d'un substrat solide préexistant, l'interface solide/liquide est partiellement remplacée par une interface solide/solide, permettant ainsi de réduire fortement cette enthalpie libre d'activation nécessaire à la germination, et donc de la faciliter. Dans ce cas, la germination est dite hétérogène.

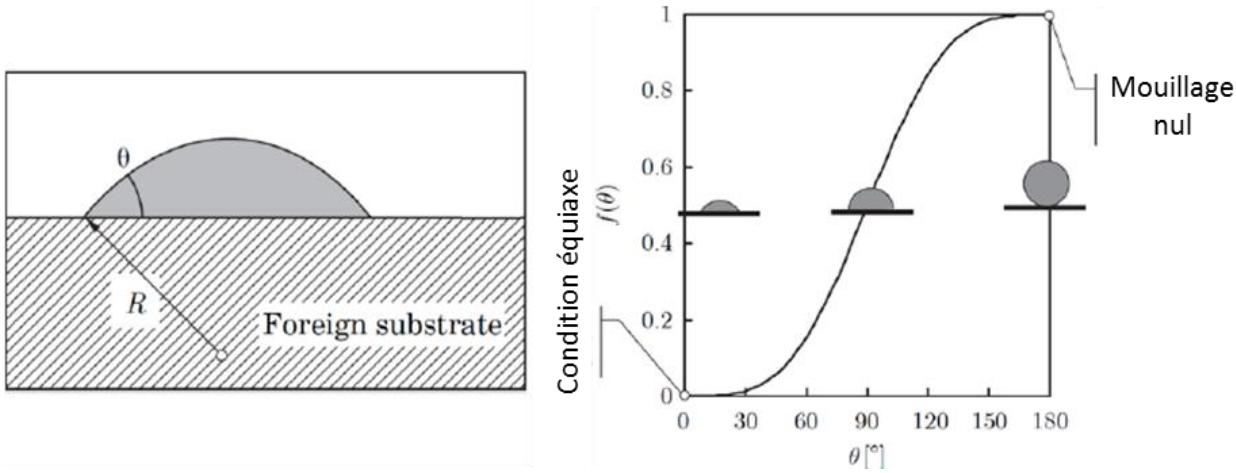


Figure 1.22. Représentation schématique de la germination hétérogène et de l'angle de mouillage θ et évolution de $f(\theta)$ en fonction de l'angle de mouillage [Dantzig 2009]

Plusieurs corps peuvent faire office de substrat : des particules solides présentes dans le liquide, les parois d'un moule, une couche d'oxydes, le métal de base pour une soudure, ou encore les grains de poudre dans le cas de la fabrication additive. La Figure 1.22 permet d'illustrer la formation d'un germe au cours de la germination hétérogène ainsi que la notion d'angle de mouillage. Pour une germination hétérogène, la variation d'enthalpie libre lors de la formation d'un germe de rayon r est donnée par la relation :

$$\Delta G_{hétérogène} = \Delta G_{homogène} \cdot f(\theta) \tag{5}$$

où $f(\theta)$ est fonction de l'angle de mouillage $\theta \in [0° ; 180°]$. Son évolution est visible sur la Figure 1.22 et elle est définie telle que :

$$f(\theta) = \frac{(2+\cos\theta)(1-\cos\theta)^2}{4} \tag{6}$$

Le phénomène de germination hétérogène nécessite ainsi des valeurs de surfusion relativement faibles, qui peuvent être de l'ordre de quelques degrés seulement, contrairement à la germination homogène qui peut nécessiter pour certains métaux des surfusions de l'ordre de la centaine de degrés. Par conséquent, la germination hétérogène est beaucoup plus fréquemment rencontrée que la germination homogène. Dans le cas de la fabrication additive, la solidification débutera alors au niveau des grains partiellement fondus du substrat, ou à partir des particules de poudre en partie solides ou couvertes d'un oxyde réfractaire qui se retrouveront dans le métal liquide. Ces différents corps solides pourront en effet être assimilés à des substrats en vis-à-vis du liquide présent dans le reste du bain fondu. Signalons toutefois que lorsque le substrat est de même composition que le liquide, l'énergie de surface de l'interface substrat/solide formé est quasiment nulle, de même que l'angle de mouillage, ce qui fait que l'enthalpie libre d'activation de la germination est nulle. La

solidification est alors principalement gouvernée par la phase de croissance décrite dans les sections suivantes.

1.4.2. Croissance dendritique et surfusion

1.4.2.1. Croissances équiaxe et colonnaire

Après la germination, la solidification entre dans sa deuxième phase : la croissance de l'interface solide/liquide. Cette étape qui se traduit par l'augmentation de la taille des germes formés, permet de diminuer l'enthalpie libre du système, et se manifeste par la progression de l'interface solide/liquide.

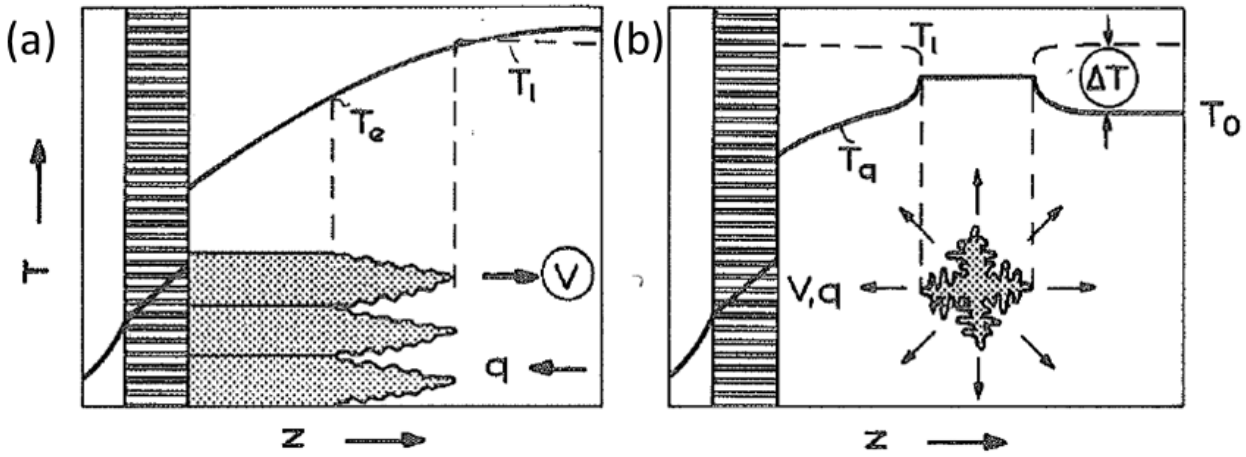


Figure 1.23. Représentation de deux types de croissances dendritiques : (a) colonnaire, (b) équiaxe [Kurz 1984]

Lorsque la vitesse de déplacement de ce front est rapide, ce qui est généralement le cas en fabrication additive, l'interface solide/liquide adopte une morphologie cellulaire ou dendritique caractérisée par des bras primaires orientés suivant les directions de croissance préférentielles du cristal. On distingue deux types de croissance principaux : la croissance libre (ou équiaxe) et la croissance directionnelle (ou colonnaire). Ces deux modes sont présentés brièvement ci-après et illustrés sur les Figure 1.23 et Figure 1.24.

Croissance équiaxe (aussi dite libre ou non contrainte)

Elle se déroule dans le cas d'un liquide présentant de faibles gradients thermiques et ayant été refroidi sous la température de fusion (Figure 1.23 (b)). Les germes de taille critique croissent dans toutes les directions, libérant la chaleur latente de fusion, qui va être évacuée dans le liquide. Dans ce cas, le cristal formé est la partie la plus chaude du système et par conséquent, le flux de chaleur est radial et orienté dans la même direction et le même sens que la croissance des dendrites. Elles peuvent donc croître librement, jusqu'à rencontrer d'autres grains ou corps solides bloquant leur progression.

Croissance directionnelle (aussi dite contrainte)

La croissance directionnelle aussi dite colonnaire, a lieu dans le cas d'un liquide présentant de forts gradients thermiques (Figure 1.23 (a)). Les grains observés lors de ce type de croissance découlent de la germination hétérogène à partir d'un substrat plus froid que le liquide. C'est le mode de croissance principalement observé en soudage ou en fabrication additive. En effet dans le cas de ces deux

applications, les grains croissent par épitaxie à partir des grains partiellement fondus situés tout le long de la frontière du bain liquide formé. Dans ce cas, le liquide est la partie la plus chaude du système puisque les cristaux formés sont en contact avec le substrat ou le métal non fondu. La chaleur est alors conduite du liquide vers le substrat à travers les cristaux en croissance, ce qui génère un flux de chaleur opposé à la direction de croissance des dendrites. Leur croissance est donc contrainte par le déplacement des isothermes, ce qui conduit à la formation de grains colonnaires orientés perpendiculairement aux isothermes (Figure 1.24). Tout comme pour la croissance équiaxe, les grains colonnaires vont croître jusqu'à être bloqués par un ou plusieurs autres corps solides.

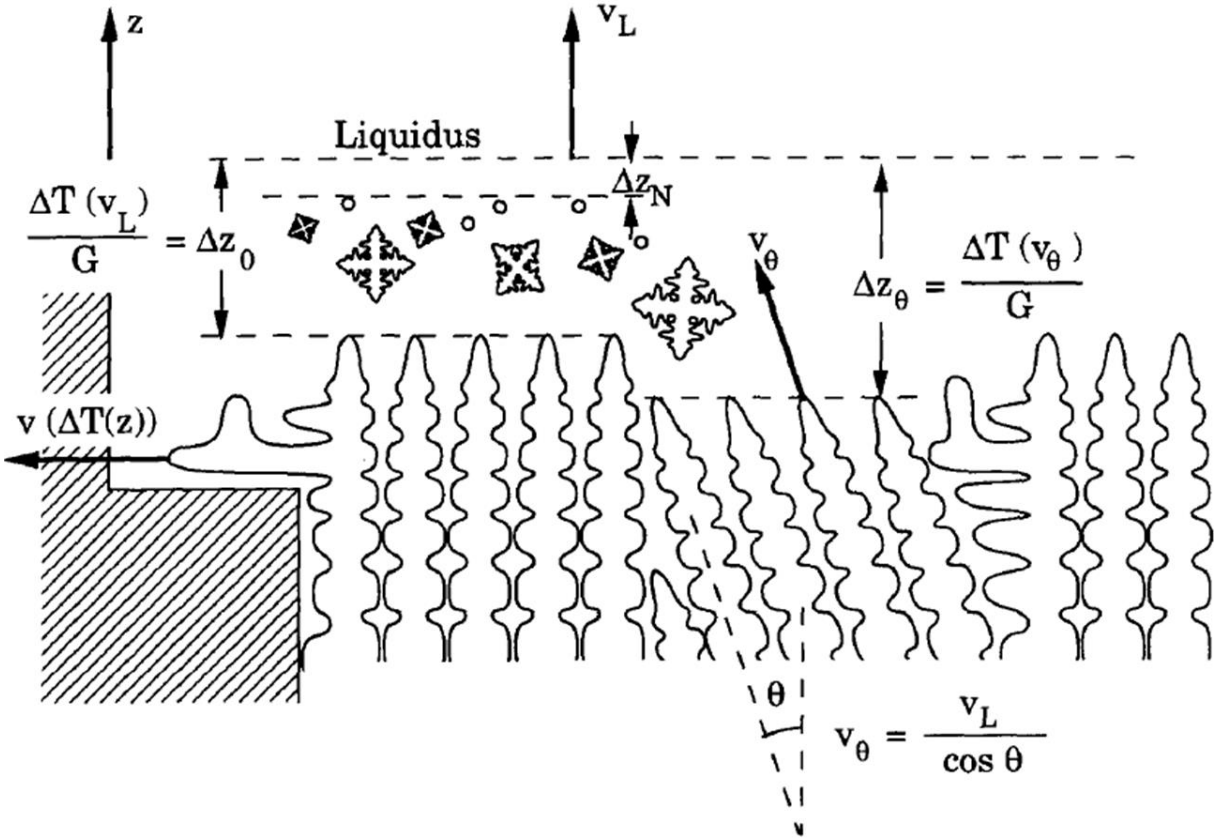


Figure 1.24. Représentation schématique de la solidification directionnelle [Rappaz 1993]

Il est intéressant d'ajouter que la croissance directionnelle s'accompagne toujours d'une compétition de croissance entre les grains, c'est-à-dire d'une sélection des grains les plus favorablement orientés. Les grains favorablement orientés sont ceux dont la direction préférentielle de croissance est proche de celle du gradient thermique. La direction préférentielle de croissance dépend de la nature du cristal et dans le cas des matériaux CFC, ce qui est le cas des aciers austénitiques, elle correspond aux directions <100>. Cela signifie que les grains dont les bras primaires de dendrites seront alignés avec le gradient thermique dépasseront les grains plus défavorablement orientés, bloquant ainsi leur progression (Figure 1.24). La compétition de croissance est donc accompagnée d'une réduction du nombre de grains ainsi que d'une texturation de la structure cristalline puisque seuls persistent les grains faiblement désorientés par rapport à la direction du gradient thermique. De récentes études numériques effectuées par T. Takaki et al. [Takaki 2018] et Rai et al. [Rai 2016] ont permis d'illustrer l'influence du gradient et de l'orientation initiale des grains dans le cas d'une solidification directionnelle.

1.4.2.2. Surfusion

Lors de la solidification, et cela pour les deux modes de croissance précédemment décrits, les cristaux devraient croitre rapidement dans toute la partie liquide portée à une température inférieure à la température de fusion (ou de liquidus dans le cas des alliages), puisque ce phénomène diminue l'enthalpie libre du système. Cependant, des gradients thermiques, et dans le cas des alliages des gradients de composition chimique apparaissent au voisinage du front de solidification, conduisant à un retard de la croissance dendritique. Ce retard se traduit par un écart entre la température de l'interface solide/liquide et la température de fusion (ou de liquidus dans le cas des alliages) : c'est la surfusion du liquide, ΔT, La Figure 1.24 illustre cette surfusion et permet de la relier à la croissance des dendrites. On distingue quatre origines possibles pour cette surfusion, détaillées ci-dessous.

La surfusion thermique ΔT_{Th}

Lors de la solidification du liquide, la chaleur latente de fusion est libérée en pointe de dendrite, élevant ainsi la température au niveau de l'interface solide/liquide, ce qui entraine un ralentissement de la croissance dendritique. La différence entre la température à l'interface, $T_{s/l}$, et celle du liquide situé loin de cette interface, T_∞, correspond à la surfusion thermique. Elle est définie par :

$$\Delta T_{Th} = T_{s/l} - T_\infty \tag{7}$$

La surfusion de cinétique d'attachement ΔT_A

Lors de la croissance de l'interface solide/liquide, l'attachement d'atomes liquides au réseau cristallin déjà construit engendre un ralentissement de la solidification, traduit par la différence de température entre l'interface statique et celle en mouvement. Plus la vitesse à l'interface est élevée plus la surfusion de cinétique d'attachement est importante. Elle peut être exprimée par la relation suivante :

$$\Delta T_A = \frac{v_{s/l}}{\mu_c} \tag{8}$$

où $v_{s/l}$ est la vitesse de croissance normale à l'interface solide/liquide en m.s^{-1} et μ_c le coefficient de cinétique d'attachement en m.K^{-1}.s^{-1}.Pour les matériaux dont la croissance des cristaux se déroule de façon facettée, ΔT_A contribue de façon non négligeable à la surfusion totale.

La surfusion de courbure ΔT_R

La géométrie courbe de l'interface solide/liquide génère une surfusion de courbure ΔT_R. Elle peut être estimée par l'équation de Gibbs-Thomson :

$$\Delta T_R = \frac{2\Gamma}{R} \tag{9}$$

avec Γ le coefficient de Gibbs-Thomson (K.m) et R le rayon de courbure en pointe de dendrite (m), généralement de l'ordre du micron.

La surfusion de courbure étant inversement proportionnelle à R, sa contribution dans la surfusion totale peut-être importante dans le cas de faibles rayons de courbure, et peut même stabiliser à nouveau l'interface solide/liquide conduisant alors à une croissance en front plan.

La surfusion constitutionnelle ΔT_C

La surfusion constitutionnelle est due au rejet de solutés devant l'interface solide/liquide. En effet, dans les aciers inoxydables austénitiques courants, le solide formé étant moins riche en solutés, la solidification se traduit par un rejet des solutés dans le liquide au niveau de l'interface solide/liquide, suivi de sa diffusion dans le liquide. Si la vitesse de déplacement du front de solidification est plus élevée que celle de la diffusion chimique, alors cette dernière ne peut s'effectuer correctement, générant un gradient de composition chimique dans le liquide. Ce gradient de composition conduit à un écart de température de liquidus entre le liquide présent à l'interface et le liquide éloigné de l'interface. Cette différence de température correspond à la surfusion constitutionnelle. Celle-ci conduit à la déstabilisation de l'interface qui devient alors cellulaire-dendritique. En considérant un alliage binaire et si on suppose que son diagramme de phase est représenté de façon simplifiée (les lignes de solidus et de liquidus sont rectilignes), elle peut être calculée pour une structure solide paraboloïde en pointe de rayon de courbure R, en utilisant l'équation suivante :

$$\Delta T_C = -m_l C_0 \left(\frac{(1-k) I_v(Pe_C)}{1-(1-k) I_v(Pe_C)} \right) \tag{10}$$

où m_l est la pente du liquidus (respectivement m_s est celle du solidus), k le coefficient de partition de l'espèce chimique soluté de l'alliage binaire ($k = m_s/m_l$), C_0 la concentration en soluté de l'alliage, Pe_C le nombre de Péclet solutal défini tel que :

$$Pe_C = \frac{R.v_d}{2D_l} \tag{11}$$

où v_d est la vitesse de croissance de la pointe de la dendrite en m.s^{-1}, D_l est le coefficient de diffusion des espèces dans le liquide en m².s^{-1} et I_v la fonction d'Ivantsov donnée par la relation :

$$I_v(Pe_C) = Pe_C \exp(Pe_C) E_1(Pe_C) \tag{12}$$

avec E_1 la fonction intégrale de l'exponentielle définie telle que :

$$E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-s}}{s} ds \tag{13}$$

La surfusion constitutionnelle est celle qui contribue le plus à la valeur de la surfusion totale dans les alliages, car c'est la principale responsable de l'instabilité de l'interface solide/liquide.

1.4.2.3. Vitesse de croissance dendritique

La vitesse de croissance des dendrites est directement liée à la surfusion. Une relation liant ces deux grandeurs physiques permet de modéliser la cinétique de croissance des dendrites. Plusieurs modèles ont été développés pour cela, le plus couramment cité étant le modèle proposé par Kurz, Giovanola et Trivedi, souvent nommé modèle KGT [Kurz 1986]. L'expression simplifiée du modèle

KGT, reliant la vitesse de croissance de la dendrite v_d en m.s^{-1} à la surfusion ΔT en K est alors donnée par la relation :

$$v_d(\Delta T) = a_n \Delta T^n \tag{14}$$

avec a_n et n coefficients d'ajustement du matériau en m.s^{-1}.K^{-n} et sans unité respectivement.

En fabrication additive la solidification est dite rapide, ce qui nous permet de faire l'hypothèse que la surfusion thermique est négligeable. Par ailleurs la solidification du 316L n'étant pas facettée, nous négligeons également la surfusion de cinétique d'attachement, si bien que la surfusion totale peut s'écrire :

$$\Delta T = \Delta T_C + \Delta T_R \tag{15}$$

Les coefficients a et n étant inconnus, il est nécessaire de les identifier. Pour cela les équations (9) à (13) sont combinées. Trois inconnues restent présentes dans l'équation finale : la surfusion totale ΔT, le rayon de courbure en pointe de dendrite R et la vitesse de croissance de la dendrite, v_d. Afin de résoudre le système pour un ΔT donné, il est nécessaire d'utiliser une équation supplémentaire de R et v_d. Pour cela, Kurz et al. ont proposé d'utiliser le critère établi par Langer et Muller-Krumbhaar en 1977 [Langer 1977] nommé critère de stabilité marginale, qui suppose que le rayon R est égal à la longueur d'onde minimale λ_{min} des perturbations responsables de l'instabilité du front de solidification plan. L'égalité suivante peut alors être établie :

$$R = \lambda_{min} = 2\pi \sqrt{\frac{\Gamma}{m_l G_{cl} \xi_c - G_l}} \tag{16}$$

où G_{cl} et G_l sont respectivement les gradients de concentration en soluté et de température dans le liquide à l'interface solide/liquide. G_{cl} est donné par la relation suivante :

$$G_{cl} = -\frac{v_d}{D_l}\left(\frac{C_0(1-k)}{1 - I_v(Pe_C)(1-k)}\right) \tag{17}$$

Le facteur ξ_c intervenant dans l'équation (16) est estimé de la façon suivante :

$$\xi_c = \frac{1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2\pi}{Pe_C}\right)^2}}{1 - \sqrt{1 + \left(\frac{2\pi}{Pe_C}\right)^2} - 2k} \tag{18}$$

Le modèle choisi précédemment ne permet pas la prise en compte de la convection. Gandin et al. ont proposé en 2003 un modèle qui permet de la considérer [Gandin 2003]. Pour cela ils ont ajouté au modèle KGT l'influence des écoulements dans le liquide en considérant que la composition et la température du liquide étaient totalement homogénéisées par la convection en dehors d'une « couche limite » entourant les pointes de dendrites. A l'intérieur de cette couche limite, les transferts de chaleur et de matière sont considérés comme purement diffusifs. L'épaisseur de la couche limite δ est reliée à la vitesse et à la direction des écoulements à partir de la relation :

$$\delta = \frac{2R}{Sh - 2} \tag{19}$$

avec Sh le nombre de Sherwood dépendant de la vitesse d'écoulement et de son orientation.

1.5. Méthodes numériques de simulation du procédé et de la solidification

Comme expliqué précédemment dans ce chapitre, la fabrication d'une pièce en LBM de par sa nature, génère une distribution non homogène des températures ainsi qu'un cyclage thermique, impliquant des variations de gradient thermique et de vitesse de croissance le long de la frontière du bain de fusion. Ces variations conduisent ensuite à l'évolution des structures de grains au cours de la solidification. Par ailleurs nous avons vu que le procédé LBM fait intervenir de nombreux paramètres dont les valeurs influent sur les caractéristiques du bain fondu et sur les structures de grains obtenues (*cf.* paragraphes 1.2.3.6 et 1.3.2). C'est pourquoi il est important d'étudier la formation du bain fondu et des grains formés au cours de la fabrication d'une pièce ainsi que leur évolution au cours du procédé.

Nous avons vu dans la section 1.2.3 que le procédé LBM fait intervenir des vitesses de croissance très élevées (plusieurs centaines de mm/s) et des échelles caractéristiques de la microstructure très réduites (échelle micrométrique). En conséquence, l'observation expérimentale du bain fondu et des microstructures formées est particulièrement complexe à mettre en place et se limite souvent à l'observation de la géométrie du bain à l'aide d'une caméra rapide [Andani 2018, Yin 2019], et à des analyses post mortem de la microstructure des pièces fabriquées. Par ailleurs, bien que des techniques expérimentales permettent de le faire (comme par exemple la pyrométrie [Cheng 2018] ou *via* l'usage de thermocouples [Dunbar 2016]), mesurer les températures en cours de fabrication reste délicat à mettre en œuvre.

La modélisation apparait donc dans de nombreuses études comme une solution alternative intéressante pour étudier le bain fondu et la formation des structures de grains en LBM. En effet, elle permet d'obtenir des informations relatives au bain fondu, à la structure granulaire formée ou encore au comportement mécanique de la pièce. Dans cette partie nous nous pencherons dans un premier temps sur les modèles de représentation du procédé LBM permettant la prédiction du bain liquide formé. Dans un second temps nous aborderons les modèles permettant de simuler la solidification. Enfin nous aborderons la validation expérimentale des modèles numériques.

1.5.1. Modélisation thermique du procédé LBM

La modélisation du procédé permet de prédire ou d'analyser les caractéristiques du bain fondu en cours de fabrication. Ces modèles peuvent être classés dans trois catégories différentes, liées à leur échelle (Figure 1.25) :

- *Les modèles microscopiques* : ils sont à l'échelle de la poudre et permettent de décrire de façon détaillée l'interaction entre le laser et la matière. Dans ces modèles le lit de poudre est considéré comme un milieu discret (les grains de poudre sont représentés individuellement) ;
- *Les modèles dits « mésoscopiques »* : ceux-ci sont à l'échelle du lit de poudre. La principale différence avec les modèles microscopiques réside dans le fait que le lit de poudre est cette fois considéré comme un milieu continu ;
- *Les modèles macroscopiques* : ils permettent de décrire la fabrication à l'échelle de la pièce.

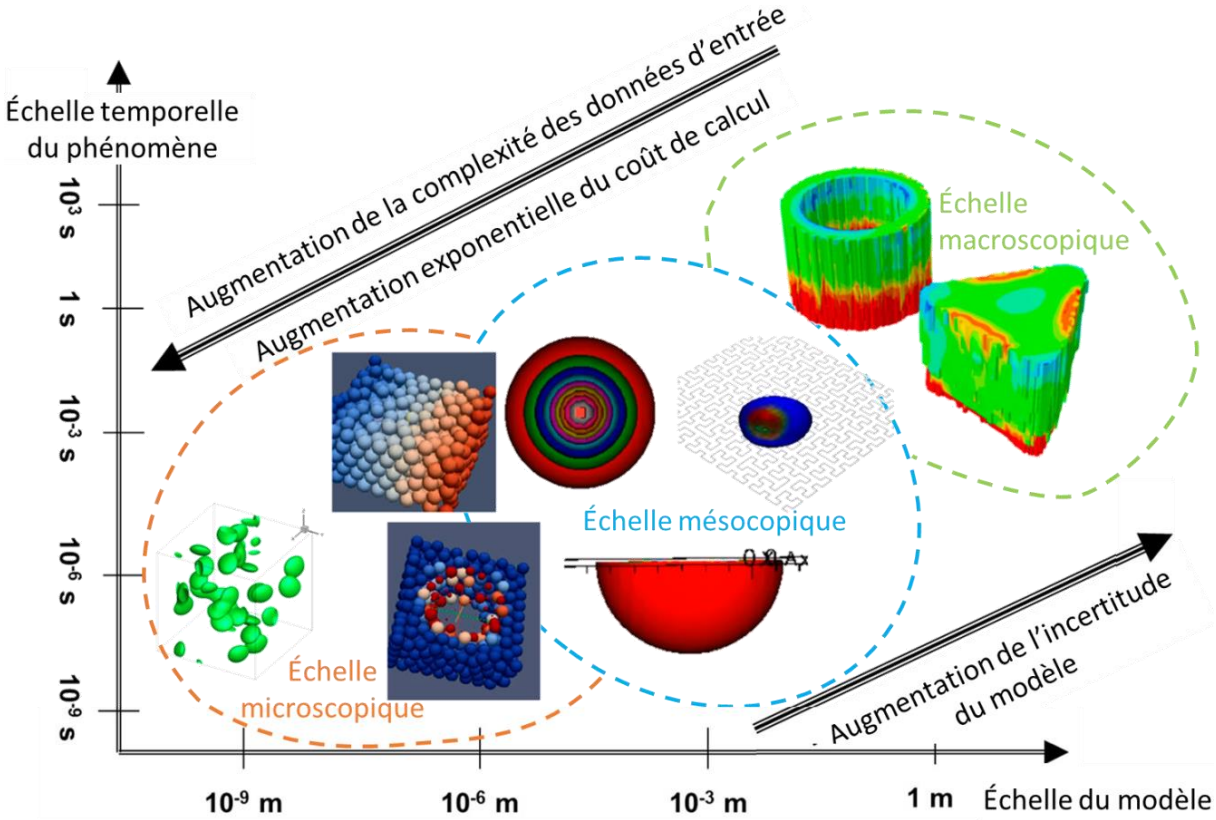


Figure 1.25. Représentation des échelles intervenant dans les différents modèles [Sames 2016]

Chacun des trois types de modèles est présenté dans les grandes lignes ci-après. Pour chaque échelle d'étude, des exemples d'applications sont présentés.

1.5.1.1. Physique des modèles

Indépendamment de l'échelle choisie, les modèles diffèrent également selon les phénomènes physiques qu'ils prennent en compte. Certains considèrent les matériaux comme des milieux solides et ne prennent en compte que les phénomènes de conduction thermique à travers la matière [Antony 2014, Wang 2016, Liu 2018b, Liu 2020b].

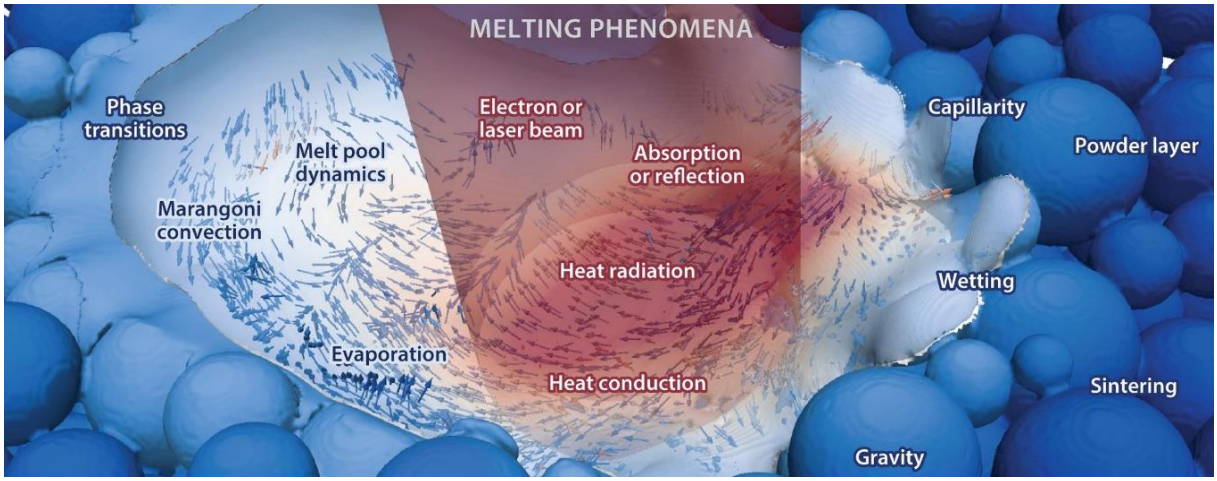


Figure 1.26. Représentation des principaux phénomènes physiques pouvant être modélisés [Cook 2020]

D'autres modèles (microscopiques ou mésoscopiques) prennent en compte, en plus de la conduction thermique, les phénomènes gouvernant les mouvements de fluides tels que la tension de surface,

l'effet Marangoni ou encore la pression de recul [Gürtler 2013, Manvatkar 2015, Khairallah 2016, Chen 2017, Rai 2017, Mukherjee 2018a]. La prise en compte de ces phénomènes fluides permet de prédire de façon plus précise les caractéristiques du bain fondu formé. P. S Cook et A. B Murphy ont publié en 2020 une revue sur les méthodes de simulation thermo-fluide permettant de modéliser le comportement du bain fondu en fabrication additive [Cook 2020]. La Figure 1.26 représente les principaux phénomènes physiques pouvant être pris en compte lors de la modélisation du procédé. Certaines études ont également considéré les phénomènes mécaniques afin de simuler les contraintes résiduelles ou encore les déformations générées dans la pièce [Chen 2017, Hussein 2013, Denlinger 2017].

Indépendamment de l'échelle choisie, la complexité de la modélisation des procédés de fabrication additive réside dans la gestion des changements de phase. L'affectation et la gestion d'un « état » dans le modèle est en effet une étape délicate, nécessitant de définir des règles de transition.

1.5.1.2. Modèles microscopiques

Plusieurs études récentes ont utilisé un modèle microscopique pour décrire le procédé LBM [Boley 2015, Khairallah 2016, Panwisawas 2017, Yang 2018b, Liu 2020b]. L'approche consiste à décrire l'interaction entre le faisceau laser et les grains de poudre. Elle se base sur la théorie du rayonnement optique considérant que le rayonnement incident se divise en un rayonnement réfléchi, transmis et absorbé [Yang 2018b].

Pour modéliser la trajectoire du faisceau laser et son apport d'énergie, la méthode de *ray-tracing* est la plus utilisée [Winston 2005]. Les particules de poudre sont réparties afin de former le lit de poudre, de façon régulière ou suivant une distribution donnée (gaussienne, binomiale ou autre). Les principales étapes nécessaires à la définition du modèle sont visibles sur les images (a) à (c) de la Figure 1.27.

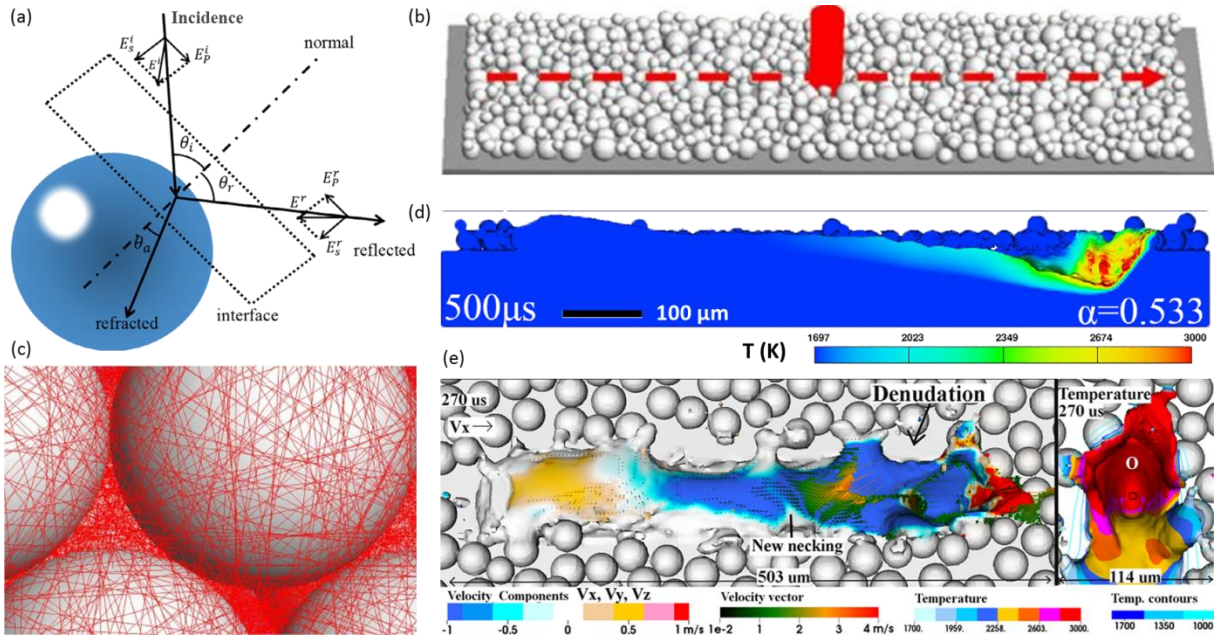


Figure 1.27. Représentation schématique des principales étapes nécessaires à la modélisation microscopique du procédé LBM : (a) interaction laser-matière [Liu 2020a] (b) répartition des particules pour former le lit de poudre [Boley 2015] (c) trajectoires obtenues avec la méthode ray-tracing [Boley 2015]. Résultats de simulations microscopiques décrivant le BF et donnant le champ de températures dans le lit de poudre (d) en coupe longitudinale [Liu 2020a] (e) en vue de dessus [Khairallah 2016]

Le choix de l'échelle microscopique offre la possibilité de décrire précisément le comportement de la poudre au cours des essais, la formation du bain ainsi que les phénomènes physiques liés à son évolution (effet Marangoni, tension de surface, pression de recul, dénudation). Néanmoins, la taille des grains de poudre étant de l'ordre de la dizaine de micromètres, il est nécessaire de définir très finement le système d'étude (échelle micrométrique) ce qui engendre des temps de calcul élevés et nécessite beaucoup de mémoire de stockage. Sur les images (d-e) de la Figure 1.27 sont visibles des résultats de simulations permettant d'observer le bain fondu en cours de fabrication ainsi que l'évolution des températures.

1.5.1.3. Modèles mésoscopiques

La plupart des travaux de recherche menés sur la modélisation du procédé LBM utilisent des modèles définis à l'échelle mésoscopique [Hussein 2013, Manvatkar 2015, Wang 2016, Panwisawas 2017, Liu 2018a, Liu 2018b, Mukherjee 2018a, Koepf 2019, Zhang 2019b]. Ces modèles visent à représenter l'interaction entre le laser et le lit de poudre, considéré cette fois comme un milieu continu. Pour cela des propriétés équivalentes sont attribuées au milieu considéré uniforme représentant la poudre.

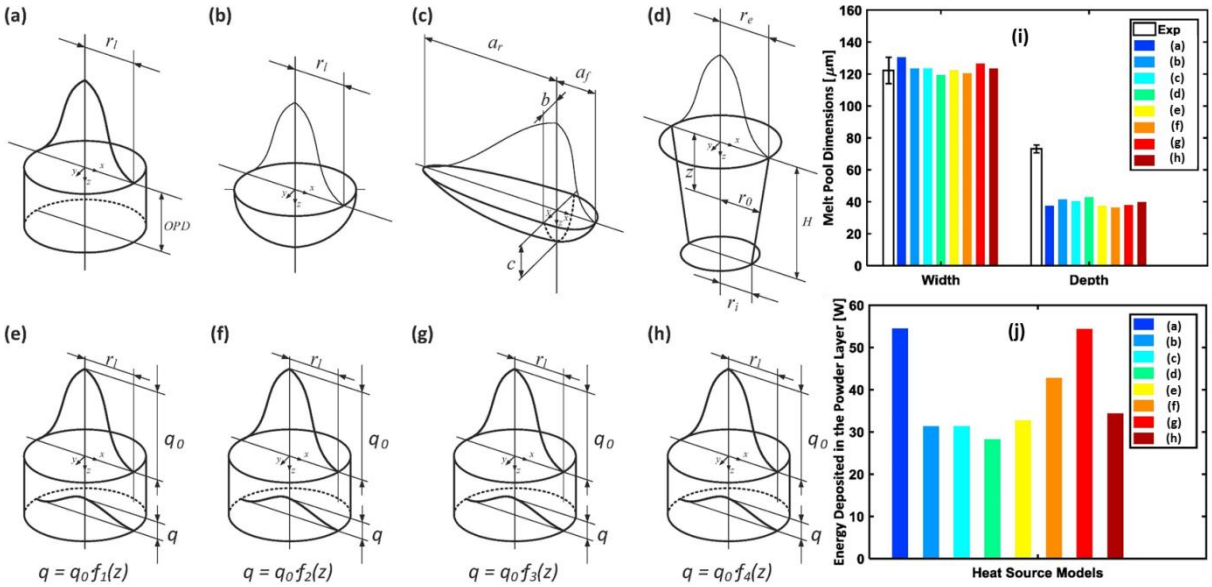


Figure 1.28. (a-h) Représentation schématique des différentes sources de chaleur testées par Zhang et al. ; Associées à chaque source : (i) les dimensions du bain fondu obtenu, (j) l'énergie déposée [Zhang 2019b]

Afin de représenter le faisceau laser, une source de chaleur équivalente, caractérisée par une distribution surfacique ou volumique de densité de puissance, est appliquée sur ce milieu continu. Zhang et al. ont montré qu'il est préférable de choisir une source volumique plutôt que surfacique puisque l'énergie déposée par le laser s'applique à la fois sur la surface du lit de poudre mais aussi à l'intérieur du lit de poudre (ou à l'intérieur du bain fondu) [Zhang 2019b]. Cette même étude s'est intéressée à l'influence du type de source de chaleur sur les caractéristiques du bain fondu et a montré la diversité des résultats obtenus en fonction de 8 sources différentes (Figure 1.28). Il ressort de cette étude que la définition de la source de chaleur est une étape clé dans la mise en place du modèle mésoscopique puisque de sa bonne définition vont dépendre les caractéristiques du bain et donc les valeurs des grandeurs calculées. La Figure 1.28 représente différents types de sources envisageables ainsi que les dimensions du bain fondu formé et l'énergie déposée associés [Zhang 2019b].

Par rapport aux modèles définis à l'échelle microscopique, les modèles définis à l'échelle mésoscopique permettent de décrire le procédé de façon plus performante pour ce qui est du temps de calcul et de la mémoire de stockage, mais de façon moins précise, en particulier en ce qui concerne le comportement de la couche de poudre.

1.5.1.4. Modèles macroscopiques simplifiés

Les travaux présentés précédemment s'intéressent la plupart du temps à des monocordons ou à des pièces simples, principalement à cause du temps de calcul élevé. Bien que les pièces LBM soient de petites dimensions (souvent centimétriques), elles sont tout de même composées de plusieurs centaines de couches, chacune comportant plusieurs cordons. Le temps de calcul requis pour simuler une pièce entière et donc la succession de centaines de couches peut alors être très important et par conséquent non adapté à une application industrielle.

Afin de pouvoir modéliser la fabrication totale d'une pièce, une étude menée au Centre de Mise en forme des Matériaux (CEMEF) a conduit à la mise au point d'un modèle macroscopique, c'est-à-dire à l'échelle de la pièce [Zhang 2018]. Il repose sur une simplification de l'apport d'énergie et de matière. En effet, la pièce à fabriquer est représentée entièrement puis découpée en couches successives, elles même fractionnées. Ces fractions de couches vont ensuite recevoir pendant une durée d'exposition donnée, une quantité de chaleur prédéfinie. La Figure 1.29 représente le champ de températures obtenu à l'issue de la simulation de la fabrication en LBM d'une turbine [Zhang 2018].

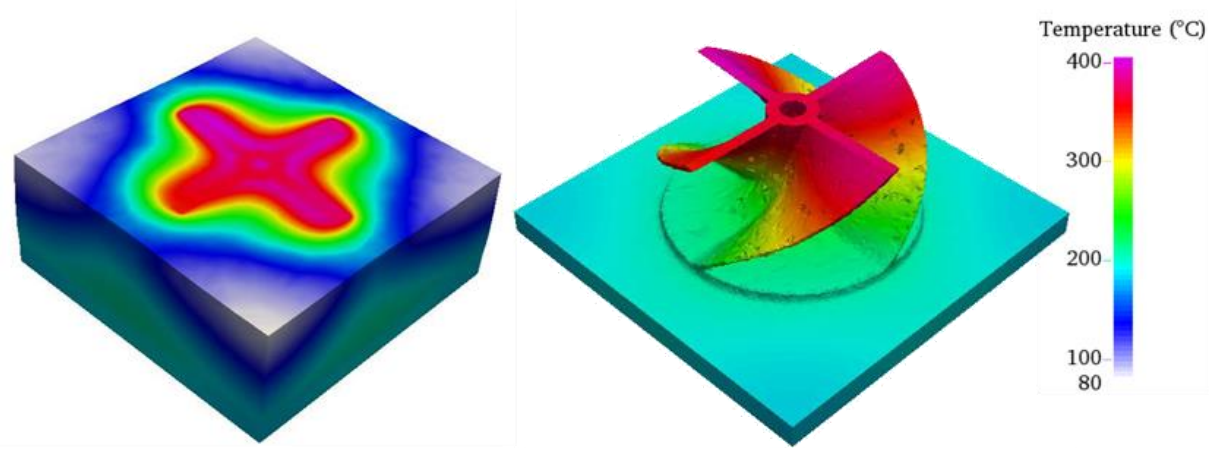


Figure 1.29. Champs de températures obtenus lors de la simulation de la fabrication d'une turbine en LBM utilisant un modèle macroscopique simplifié [Zhang 2018]

Ce modèle offre la possibilité de simuler la fabrication complète d'une pièce en réduisant fortement les temps de calcul par rapport aux modèles micro et mésoscopique. Néanmoins, l'apport d'énergie étant appliqué de façon partitionnée sur des domaines assez grands par rapport aux dimensions du cordon, les résultats obtenus sont moins précis et les variations de températures ou de propriétés mécaniques ne peuvent être modélisées à l'échelle locale (celle du bain par exemple).

Afin de profiter des avantages proposés par les différentes échelles décrites précédemment, certaines études ont couplé plusieurs modèles pour décrire le procédé LBM [Panwisawas 2017, Liu 2020b]. Cependant, la définition de modèles impliquant différentes échelles ainsi que leur couplage restent complexes à mettre en place.

1.5.1.5. Méthodes de calcul

Une fois les bases du modèle choisies (échelle et phénomènes physiques à intégrer) une méthode doit être sélectionnée afin de décrire le bain fondu.

La quasi-totalité des études thermiques et thermomécaniques réalisées à l'échelle mésoscopique utilise la méthode des éléments finis (EF) pour discrétiser le système [Hussein 2013, Antony 2014, Denlinger 2017, Wang 2016, Liu 2018a, Liu 2018b, Koepf 2019]. Les modèles thermo fluides (micro ou mésoscopiques) préfèrent souvent recourir à des méthodes de description de la surface libre de l'interface solide/liquide telles que la méthode *Volume of Fluid* (VOF) [Gürtler 2013, Liu 2020a] décrite par Hirt et Nichols [Hirt 1981], la méthode *Level Set* [Osher 1988] appliquée au soudage [Chen 2014] ou encore la méthode *Lattice Boltzmann* [Rai 2017]. Ces méthodes présentent l'avantage de pouvoir intégrer de nombreux phénomènes physiques et donc de prédire relativement précisément la thermique du procédé. Néanmoins, les temps de calcul résultant des simulations utilisant ces modèles sont considérables. Une méthode semi-analytique couplant discrétisation ponctuelle et différences finies est également proposée par Yang et al. pour décrire l'évolution du champ thermique [Yang 2018a].

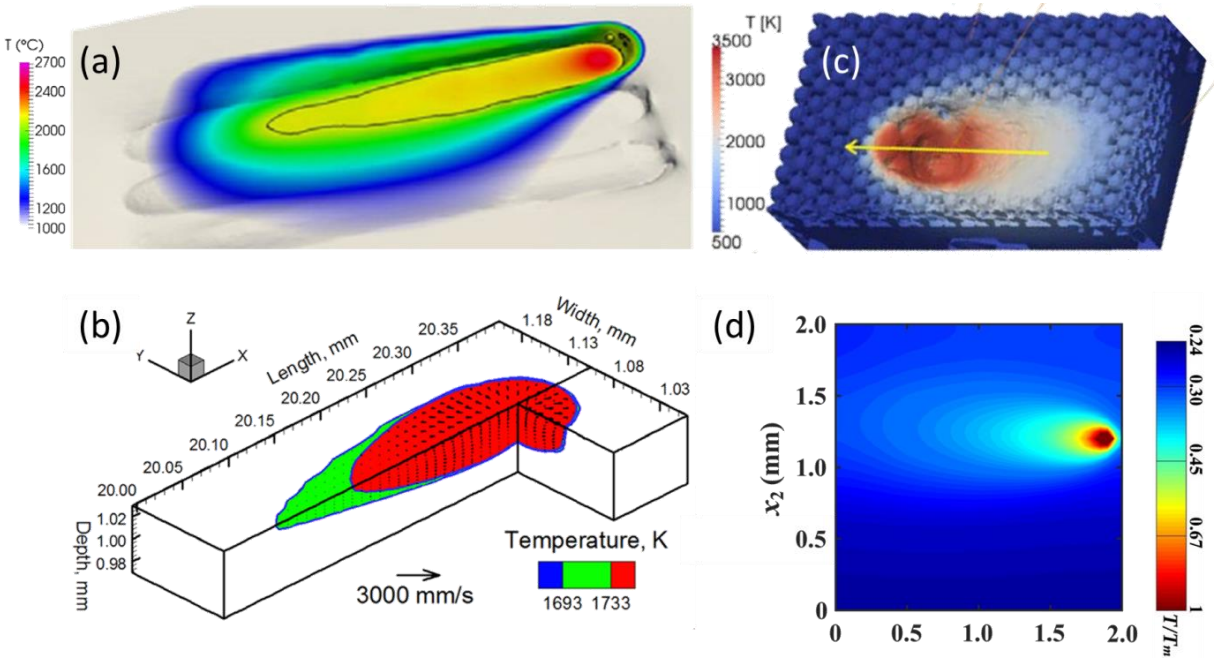


Figure 1.30. Champs de températures obtenus par simulation numérique utilisant la méthode (a) level-set [Chen 2017] (b) élément finis [Mukerjee 2018] (c) VOF [Gürtler 2013] (d) semi-analytique [Yang 2018a]

Une fois le modèle défini, le calcul des grandeurs d'intérêt (températures, écoulements de fluides, contraintes ou déformations mécaniques) est effectué par résolution des équations de conservation (conservation de la masse, de l'énergie et de la quantité de mouvement) adaptée à la configuration choisie (fonction des phénomènes physiques pris en compte, des propriétés matériaux, des conditions aux limites et de la méthode choisie). Des exemples de champs de températures obtenus en utilisant les différentes méthodes citées précédemment sont présentés sur la Figure 1.30.

1.5.2. Modélisation de la solidification

Tout comme ceux développés pour la modélisation du procédé, les modèles de solidification peuvent être regroupés selon l'échelle spatiale qui les caractérise. On distingue deux échelles différentes : l'échelle microscopique qui permet la description de la formation des microstructures à l'intérieur des grains (*i.e.* les dendrites ou les cellules) et l'échelle mésoscopique qui ne modélise que l'évolution de l'enveloppe des grains. La Figure 1.31 permet de présenter les différents modèles et leur domaine d'application. Dans cette partie sont présentés en premier lieu les modèles correspondant à la

formation des microstructures puis dans un second temps ceux permettant de décrire le développement des structures de grain.

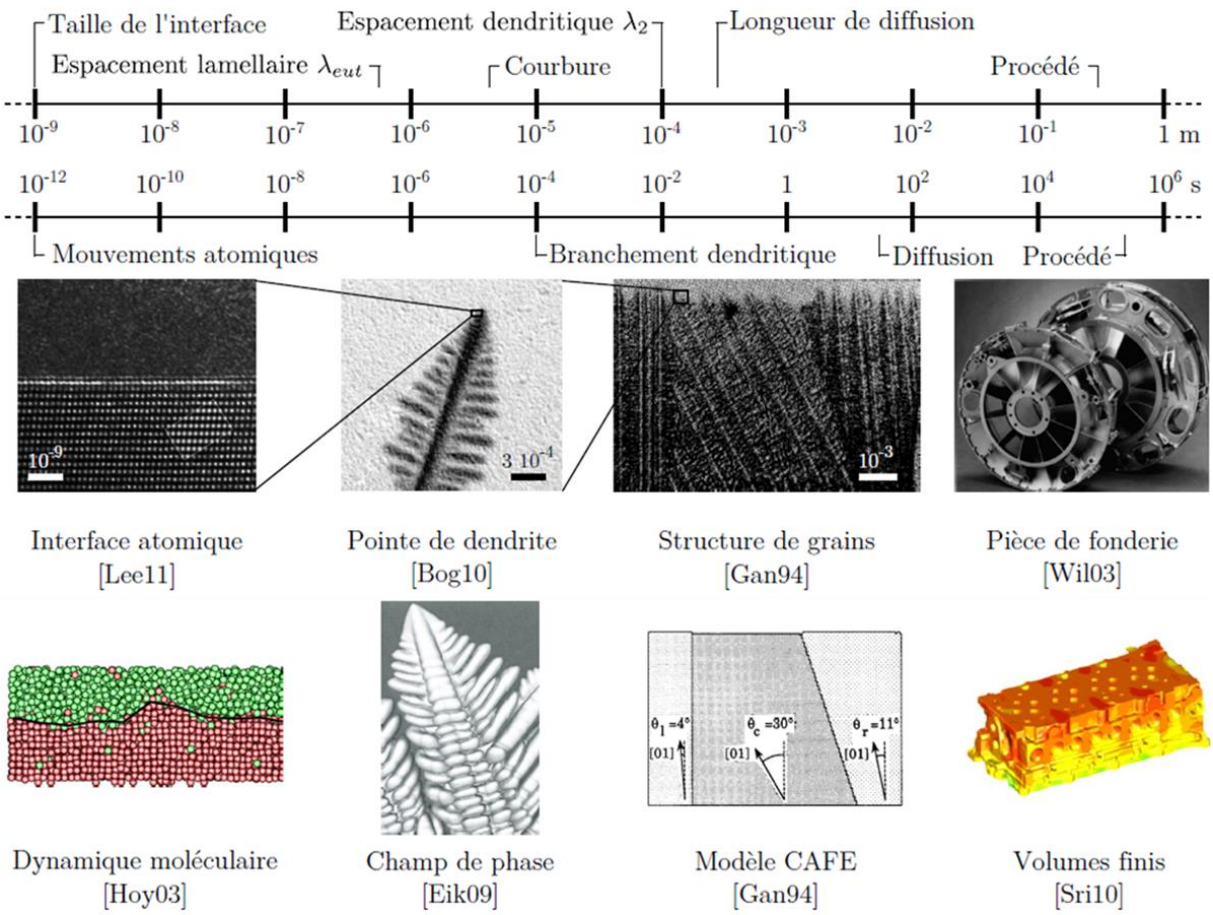


Figure 1.31. Représentation des différentes échelles disponibles pour les modèles de solidification [Carozzani 2012]

1.5.2.1. Modélisation des microstructures de solidification

Les modèles regroupés ici permettent de prédire la solidification à l'échelle de la dendrite (échelle micrométrique). La plupart d'entre eux sont basés sur le suivi de l'interface solide/liquide permettant une description morphologique des microstructures de solidification créées au niveau du front solide/liquide. Dans ce paragraphe sont présentés les plus couramment rencontrés.

Méthode de suivi de front

Cette méthode proposée en 2001 par Tryggvason et al. permet de suivre de façon explicite l'interface solide/liquide grâce à l'utilisation d'une chaine de marqueurs [Tryggvason 2001]. En effet les changements de morphologie de l'interface ainsi que les variations de phases sont pris en compte dans ce modèle permettant de décrire de façon détaillée l'évolution de l'interface. Le principe de fonctionnement de ce modèle est décrit précisément dans l'article de Juric et Tryggvason publié en 1996 [Juric 1996].

L'avantage principal de cette méthode est qu'elle permet d'obtenir un niveau de détail avancé sur le comportement et l'évolution de l'interface solide/liquide. Cependant elle ne permet pas de reproduire le phénomène de fusion et les temps de calcul requis sont très importants. Ces raisons expliquent pourquoi aucune application de cette méthodologie à la fabrication additive métallique n'a encore été publiée.

Méthode des champs de phase microscopique

La méthode des champs de phase repose également sur le suivi du front de solidification avec en plus l'introduction d'une fonction continue comprise entre deux entiers correspondant aux milieux considérés à l'interface. Dans le cas de la solidification par exemple, deux milieux sont présents : le liquide et le solide. On introduit alors une fonction comprise en 0 et 1 valant 0 dans le liquide et 1 dans le solide, et dont la valeur oscillera entre 0 et 1 au niveau de l'interface. Cette méthodologie est basée sur la minimisation de l'énergie libre du système et son principe est détaillé dans les travaux de Boettinger et al. [Boettinger 2002]. A l'issue d'une simulation effectuée selon la méthode des champs de phase, la taille des grains et leur structure dendritique interne sont connues, ainsi que les proportions de phase solide et liquide. L'épaisseur de l'interface solide-liquide est également calculée.

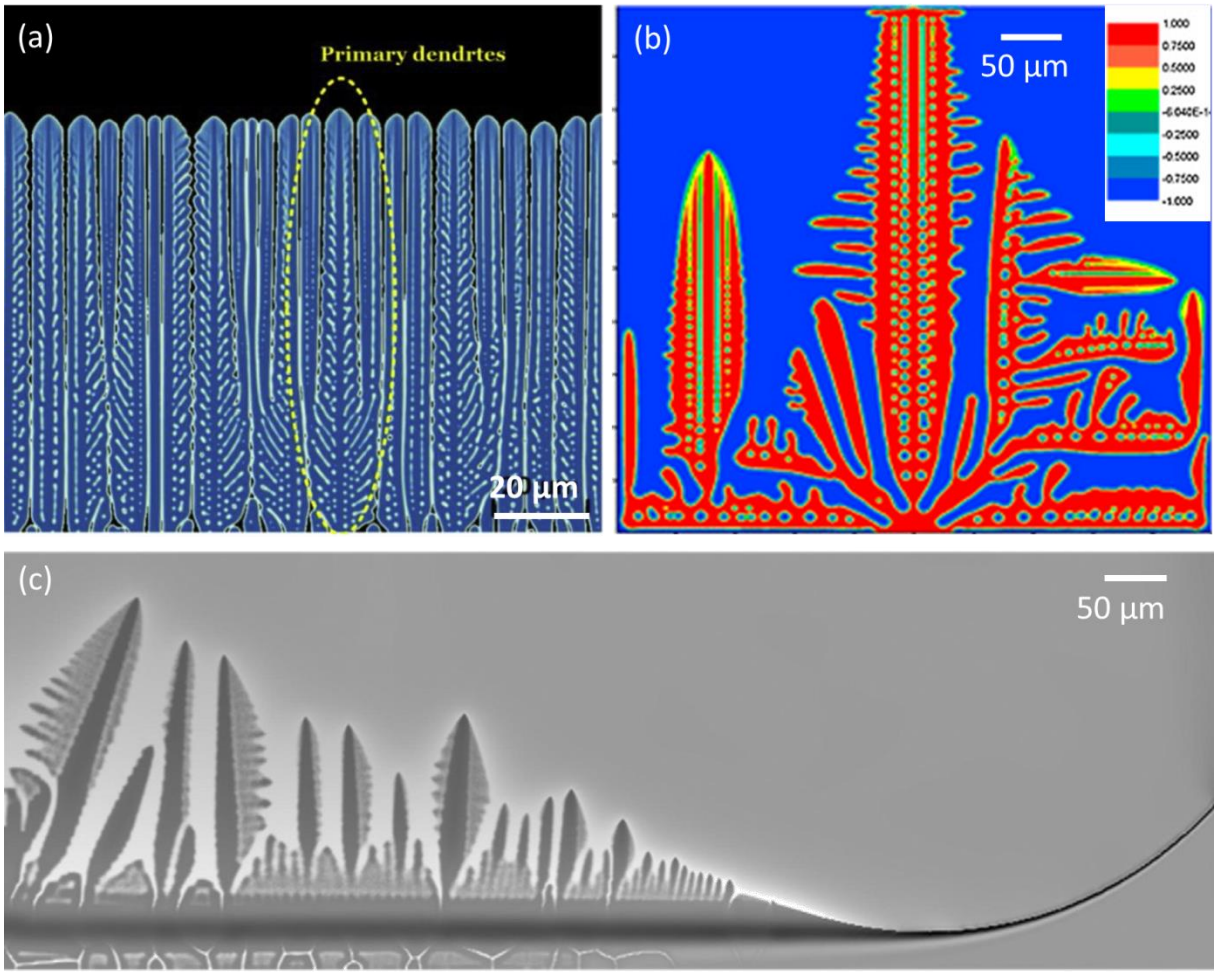


Figure 1.32. Résultats de simulations de champ de phase représentant la morphologie des dendrites formées en fabrication additive lors de la solidification de différents métaux : alliage d'aluminium (a) [Wang 2019] et alliages de titane (b) [Sahoo 2016] (c) [Ji 2018]

La méthode des champs de phase est la méthode la plus utilisée à cette échelle de modélisation et plusieurs travaux menés sur des problématiques de fabrication additive métalliques l'utilisent [Sahoo 2016, Ji 2018, Wang 2019]. Son usage fréquent vient principalement du fait qu'elle s'affranchit des conditions aux limites à l'interface, inconnues la plupart du temps au moment de définir le modèle, ainsi que de la possibilité qu'elle offre de reproduire les changements de morphologies de l'interface, même complexes. La Figure 1.32 expose des résultats de simulations de champ de phases appliquées à la fabrication additive métallique.

Méthode Automate Cellulaire microscopique

Les modèles Automates Cellulaires (AC) appliqués au phénomène de solidification ont été introduits par Rappaz et Gandin en 1993 [Rappaz 1993] afin de décrire le développement du front solide/liquide à l'échelle des grains formés (*cf*. paragraphe 2.3). Afin d'obtenir des informations plus précises sur l'évolution de l'interface solide/liquide (morphologie et dimensions des dendrites), une version modifiée du modèle mésoscopique AC a été proposée par Dilthey and Pavlyk [Dilthey 1997]. Elle est proche de celle du champ de phase mais présente l'avantage d'être plus performante en matière de temps de calcul, notamment par le fait que l'épaisseur de l'interface solide/liquide ne soit modélisée que par une rangée de cellules, permettant ainsi d'étudier des domaines plus larges. Cette méthode permet également de prédire la structure dendritique du grain ainsi que les proportions des phases solide et liquide. Un inconvénient notable de cette technique par rapport au champ de phase est que la régularité de la grille AC peut générer une anisotropie dans les résultats observés. Aucune étude utilisant la méthode AC microscopique et liée à la fabrication additive n'a encore été publiée. Cependant certains travaux appliqués au soudage ont conduit à des simulations par méthode AC microscopique [Tan 2011, Yin 2011, Choudhury 2012] permettant de prédire la formation des dendrites lors de la solidification (Figure 1.33).

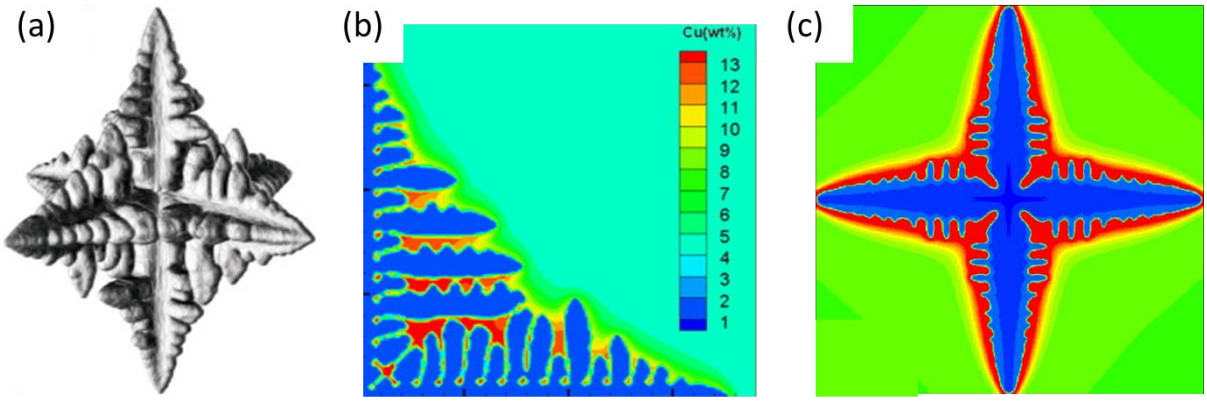


Figure 1.33. Morphologie de dendrites obtenues par simulation utilisant la méthode AC microscopique dans le cas de configuration de soudage (a) [Choudhury 2012] (b) [Tan 2011] (c) [Yin 2011]

1.5.2.2. Modélisation des structures de grains

Les modèles de structure de grains, aussi appelés modèles « mésoscopiques », permettent la prédiction de la formation des grains sans détailler leur structure interne. Les principaux modèles utilisés actuellement sont présentés dans cette partie.

Modèle de champ de phase mésoscopique

Ce modèle fonctionne sur le même principe que celui présenté dans la partie 1.5.2.1, mais plutôt que de considérer les bras dendritiques individuellement, c'est l'enveloppe du grain qui est étudiée. Cette enveloppe correspond au contour du grain et est considérée comme une surface continue reliant les pointes de dendrites primaires entre elles. Les travaux de Steinbach détaillent le fonctionnement de ce modèle [Steinbach 1999].

Ce modèle présente l'avantage de pouvoir obtenir des formes d'enveloppe de grains assez proches de la réalité mais implique des temps de calcul importants, limitant son application à des domaines de petites dimensions. P. W. Liu et ses collègues américains et anglais ont utilisé ce modèle pour étudier l'évolution des structures de grains durant la fabrication d'alliages de titane par faisceau d'électron [Liu 2018a, Liu 2020b]. Leur modèle est notamment parvenu à modéliser la croissance épitaxiale des grains, la compétition de croissance entre les grains ainsi que localement, l'apparition

de structures équiaxes liées à une germination en cours de fabrication. D'autres études menées cette fois sur le procédé LBM se sont également servies de la méthode de champs de phase mésoscopique pour modéliser la croissance granulaire au cours de la fabrication [Keller 2017, Lu 2018]. La Figure 1.34 illustre les structures granulaires obtenues par simulation *via* la méthode de champ de phase mésoscopique.

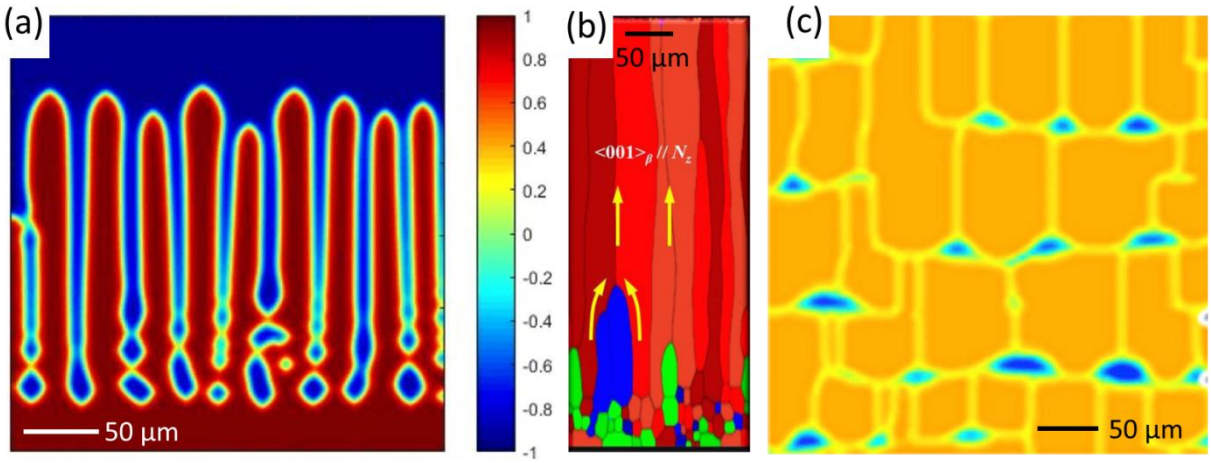


Figure 1.34. Résultats de simulations par méthode de champ de phase mésoscopique de la croissance des grains en cours de fabrication additive d'alliages de titane (a) [Zhang 2019b], (b) [Liu 2018a] et (c) [Lu 2018]

Modèle CAFE

Le terme « CAFE » vient du couplage entre des Automates Cellulaires (AC) et des Eléments Finis (EF) (*Cellular Automaton-Finite Element)*. Ce modèle a été proposé pour la première fois par Rappaz et Gandin en 1993 afin de modéliser la formation des grains lors de la solidification en fonderie [Rappaz 1993]. La méthode AC repose sur une discrétisation spatiale du domaine en éléments géométriques réguliers, puis à l'attribution d'un état et de caractéristiques à ces éléments. Ensuite un voisinage est attribué et des règles de calcul sont définies pour permettre l'évolution des caractéristiques et de l'état des éléments au cours du temps. Les règles dépendent d'un certain nombre de paramètres dont la température, et sont basées sur la physique des phénomènes décrits (germination, croissance granulaire par exemple). Cette température est calculée par le modèle EF puis transmise aux AC, qui peuvent en retour, dans le cas d'un couplage fort, avoir une incidence sur les températures des AC dépendant des transformations subies par les cellules. La méthodologie AC adaptée à la solidification est présentée en détails dans la partie 2.3. Comme dans le cas du modèle de champ de phase mésoscopique précédemment présenté, le modèle CAFE permet de suivre l'enveloppe des grains en cours de fabrication.

Le modèle CAFE ne modélisant que l'enveloppe du grain formé, il ne prédit pas la structure interne du grain. Néanmoins il permet de modéliser les phénomènes de fusion, germination et croissance granulaire et c'est pourquoi de nombreux travaux ont appliqué cette méthode, en deux ou trois dimensions. Plusieurs études utilisant des modèles CAFE tridimensionnels se sont intéressées à la formation de grains lors de la réalisation de pièces en alliages de titane, de nickel ou en acier inoxydable austénitique par procédés LBM ou faisceau d'électrons : Koepf et al. ont modélisé la fabrication d'un cylindre [Koepf 2019] et Dezfoli et al. [Dezfoli 2017], Panwisawas et al. [Panwisawas 2017], Zhang et al. [Zhang 2016] ainsi que les chercheurs du département d'ingénierie mécanique de la *Northwestern University* [Lian 2018] se sont intéressés à la modélisation d'un monocordon. Nous pouvons observer sur la Figure 1.35 des grains colonnaires, principalement orientés dans la direction de fabrication, ce qui correspond aux résultats expérimentaux observés jusqu'à maintenant. Le

modèle CAFE couplé avait auparavant déjà montré sa robustesse pour la prédiction de structures de solidification en soudage et fonderie [Gandin 1994, Gandin 1999, Chen 2014, Chen 2016].

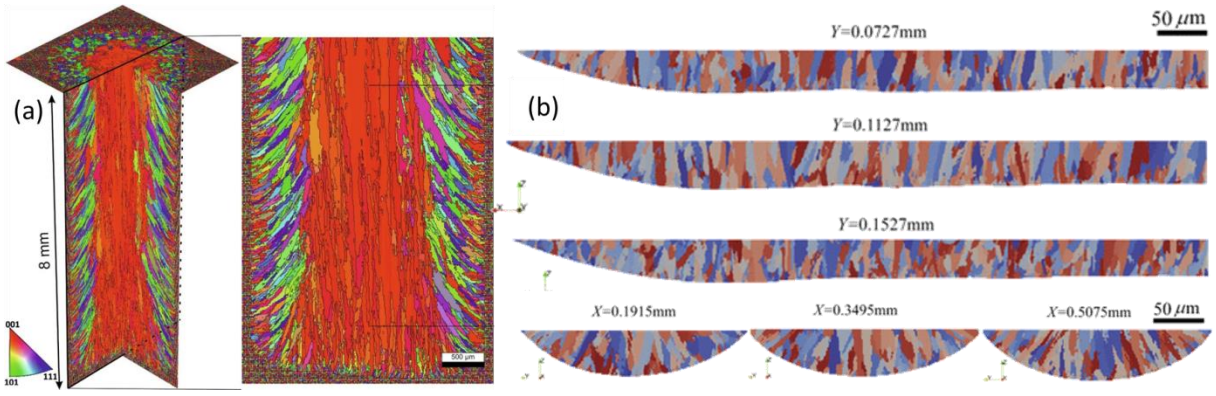


Figure 1.35. Structures de grains obtenues par simulations numériques CAFE pour différentes géométries de pièces en FA: (a) cylindrique [Koepf 2019] et monocordon [Lian 2018]

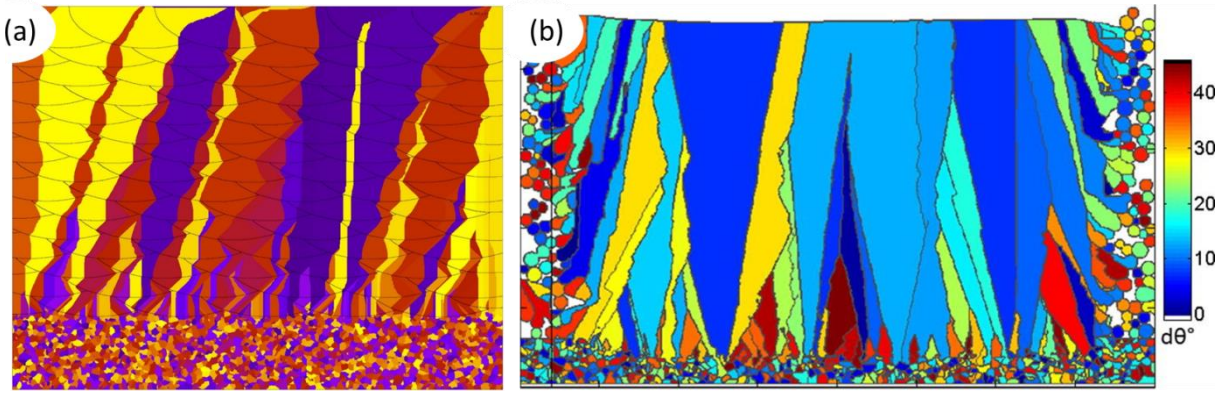


Figure 1.36. Structures granulaires obtenues par simulation numérique utilisant la méthode des automates cellulaires couplée (a) aux différences finies [Zinoviev 2016] (b) à la méthode Lattice-Boltzmann [Rai 2017]

Certaines études ont également utilisé les automates cellulaires pour modéliser la solidification, couplés à d'autres méthodes de simulation des champs de température. Dans une étude bidimensionnelle, Rai, Helmer et Körner ont ainsi simulé les grains formés lors de la fabrication d'une pièce par faisceau d'électrons en couplant des AC avec les champs de températures obtenus par la méthode *Lattice-Boltzmann* [Rai 2017]. Lors de travaux effectués en 2016, A. Zinoviev et ses collègues ont transmis au modèle AC le champ thermique calculé grâce à la méthode des différences finies [Zinoviev 2016]. Les structures de grains obtenues dans ces deux études sont présentées sur la Figure 1.36. Les grains obtenus sont également colonnaires, orientés dans la direction de construction et ont crû par épitaxie à partir des grains présents initialement dans le substrat.

Modèle Monte Carlo

La méthode Monte Carlo (MC) est une méthode probabiliste apparue en 1953 [Metropolis 1953] souvent utilisée pour la prédiction de la croissance granulaire au cours de la solidification et basée sur la minimisation de l'énergie de surface. Comme la méthode AC divise le domaine d'étude en cellules, la méthode MC elle discrétise le domaine en sites. A chaque site sont attribués un nombre représentant son état (liquide, solide, pâteux) ainsi qu'un indice dans une plage représentant son orientation cristallographique. Les sites adjacents ayant la même orientation sont rattachés au même grain.

Deux étapes se succèdent dans l'approche MC : la germination de nouveaux germes positionnés de façon aléatoire dans le domaine, et le tirage au sort d'un site dont l'état et les propriétés cristallographiques sont amenés à évoluer en fonction de la variation d'énergie du site, qui dépend elle-même des caractéristiques des sites voisins. Le détail du modèle MC appliqué à l'évolution des structures de grains est présenté dans les travaux de Holm et Battaile [Holm 2001].

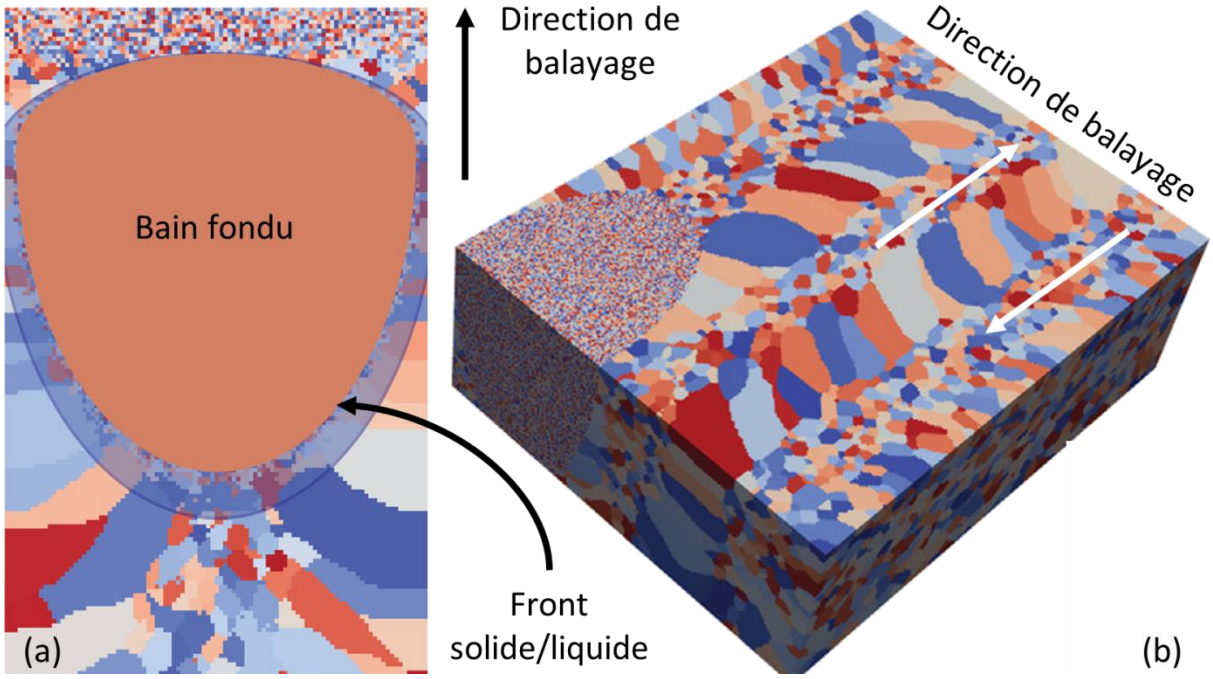


Figure 1.37. Structures granulaires obtenues par simulation Monte Carlo (a) en coupe transversale et (b) en vue de perspective [Rodgers 2017]

On trouve dans la littérature plusieurs études numériques Monte Carlo appliquées à la fabrication additive [Rodgers 2017, Zhang 2019a, Zhang 2019c]. Les structures cristallines obtenues par simulation Monte Carlo dans les travaux de Rodgers sont visibles sur la Figure 1.37 [Rodgers 2017]. Le choix de la méthode Monte Carlo pour prédire la formation des grains vient principalement du fait que c'est une méthode performante en matière de temps de calcul puisque son aspect probabiliste permet son application à des domaines de grandes dimensions. Néanmoins, cette méthode ne permet pas la prédiction de l'orientation cristallographique des grains, et donc ne semble pas adaptée à la modélisation du comportement mécanique des pièces obtenues. De plus, une étude réalisée en 2019 par Zhang et al. a montré que pour un même calcul, la méthode AC était plus performante en terme d'efficacité informatique puisqu'elle nécessite moins de pas de temps de calcul pour obtenir le même résultat [Zhang 2019c].

1.5.3. Confrontation expérimentale

Nous avons pu voir dans les deux paragraphes précédents de quelle façon la modélisation du procédé et de la solidification peuvent aider à prédire la formation du bain fondu ainsi que les structures de solidification. Cependant, ces modèles utilisent des lois mathématiques pour décrire de manière plus ou moins simplifiée les phénomènes physiques pris en compte, et il est donc nécessaire d'étudier leur validité. Pour cela, certaines études ont comparé à des résultats expérimentaux les champs thermiques obtenus, les dimensions de bains fondus formés, ou encore les structures de solidification générées [Panwisawas 2017, Rai 2017, Rodgers 2017, Liu 2018, Yang 2018b, Koepf 2019, Zhang 2019b].

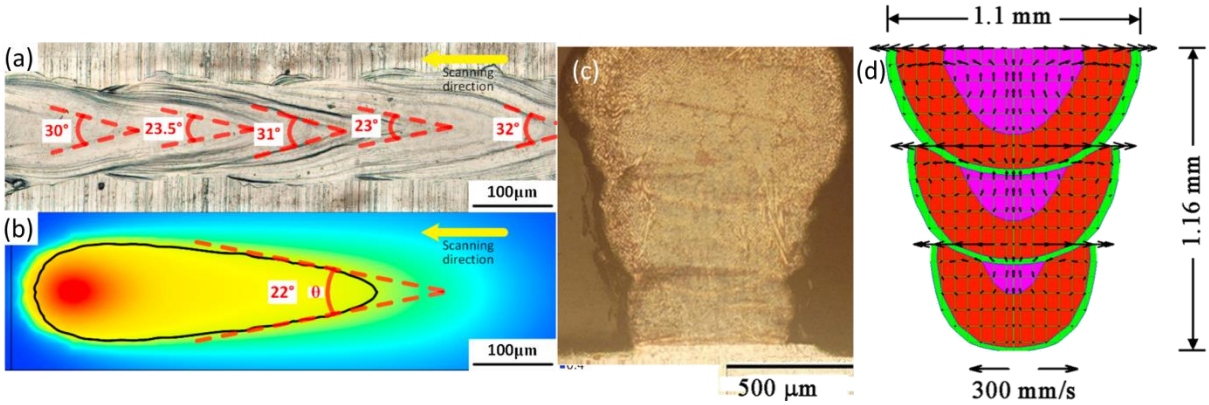


Figure 1.38. Comparaison entre (a et c) cordons expérimentaux et (b et d) bains fondus numériques. Les figures (a-b) proviennent des travaux de Z. Zhang et al. [Zhang 2019b] et les figures (c-d) de ceux de Manvatkar, De et DebRoy [Manvatkar 2014]

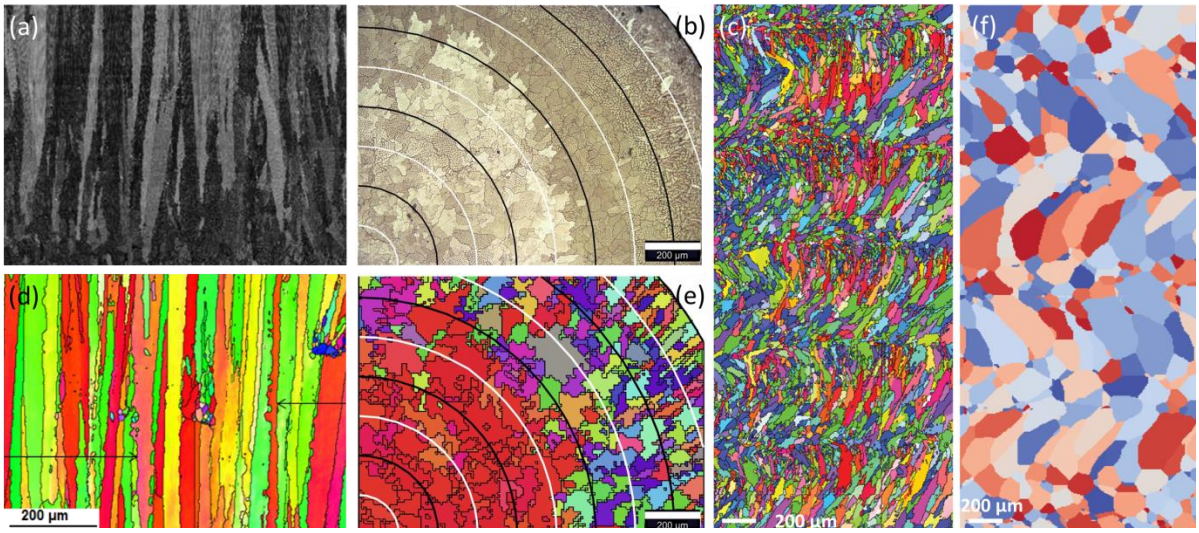


Figure 1.39. Comparaison entre structures de grains (a-c) expérimentales et (d-f) numériques obtenues dans le cadre de trois études (a et d) [Rai 2017], (b et e) [Koepf 2019] et (c et f) [Rodgers 2017]

Concernant la modélisation du procédé, des bains fondus de formes et dimensions proches de ceux observés expérimentalement à partir d'analyses post-mortem peuvent être obtenus avec les différentes méthodes de simulation aux échelles microscopique et mésoscopique. Des exemples de résultats expérimentaux et numériques, obtenus dans le cadre de deux études, sont présentés sur la Figure 1.38 [Manvatkar 2014, Zhang 2019b]. Les résultats expérimentaux et de simulation s'accordent à montrer un bain semi-circulaire en coupe transverse, très allongé dans la direction de balayage, et dont la largeur augmente lorsque les couches se succèdent dans la hauteur de la pièce (Figure 1.38 (c) et (d)). Des différences peuvent tout de même être observées localement, notamment au niveau de l'arrière du bain, qui est plus arrondi et avec un angle d'ouverture plus faible dans les résultats de simulation (Figure 1.38 (a) et (b)).

A propos de la modélisation de la solidification, des structures de grain expérimentales et numériques issues de trois études effectuées à l'échelle mésoscopique en utilisant les méthodes CAFE et MC sont exposées sur la Figure 1.39 [Rai 2017, Rodgers 2017, Koepf 2019]. Nous pouvons remarquer un bon accord entre les résultats expérimentaux et de simulation. En effet dans les deux cas nous pouvons observer des grains colonnaires caractéristiques des structures observées en fabrication additive, orientés dans la direction de construction dans le cas d'une stratégie simple (figures (a-b) et (d-e)) ou bien en « zigzag » dans le cas d'une stratégie de construction alternée (figures (c) et (f)).

1.6. Synthèse bibliographique

Le procédé de fusion laser sur lit de poudre (LBM) permet de fabriquer couche par couche des pièces métalliques à partir d'un lit de poudre et à l'aide d'un laser. Les caractéristiques des pièces obtenues par LBM dépendent fortement des paramètres de fabrication.

Outre l'effet déterminant des caractéristiques de la poudre, la stratégie de construction, la puissance et la vitesse du laser ainsi que de façon plus générale la densité d'énergie volumique ont été identifiés comme étant les plus influents. Ces paramètres déterminent les conditions de fabrication de la pièce, et en particulier les étapes de fusion et solidification. Leur valeur variant en fonction de la pièce réalisée, les caractéristiques du bain fondu (morphologie, dimensions, températures) sont amenées à évoluer. Le bain fondu généralement observé en LBM est très allongé dans la direction de balayage et d'assez petite taille. Par ailleurs, il existe une plage de valeurs de densité volumique d'énergie à respecter afin d'éviter la formation de défauts (porosité en mode *keyhole*, *balling*). Enfin, il a été observé que les dimensions du bain fondu ne sont pas constantes au cours de la fabrication, sa taille ayant tendance à augmenter lors de la construction des premières couches, et cela indépendamment des paramètres de fabrication appliqués.

Les caractéristiques des structures de solidification dépendent principalement du gradient thermique et de la vitesse de solidification. A cause des cinétiques de déplacement du bain très grandes en LBM, les vitesses de fusion et de solidification sont particulièrement importantes, générant des gradients thermiques et des vitesses de croissance des grains particulièrement élevés. En conséquence, dans le cas de la fabrication de pièces en aciers inoxydables austénitiques par LBM, on observe la formation de grains colonnaires majoritairement orientés dans la direction de fabrication de la pièce, formés par croissance épitaxiale à partir des grains présents initialement dans le substrat ou dans les couches inférieures. Par ailleurs une sous-structure cellulaire caractéristique est systématiquement observée à l'intérieur des grains.

Les structures de solidification précédemment décrites engendrent une anisotropie dans la pièce, pouvant être dommageable dans le cas où elle ne peut être contrôlée ou anticipée. La modélisation apparait donc comme un outil intéressant pour anticiper cette anisotropie liée aux structures de solidification. Différents modèles permettant la prédiction des structures de grains formées en LBM ont été présentés. Ils reposent principalement sur l'association de deux modèles : le premier décrit le procédé et fournit l'évolution des champs de températures en cours de fabrication, le deuxième décrit la solidification et donc prédit les structures de grains générées. Il existe une grande diversité de modèles et leur utilisation varie en fonction de l'échelle étudiée, de la méthodologie choisie et des phénomènes physiques pris en compte. Afin de choisir le modèle adapté à la problématique étudiée, il est nécessaire de trouver un compromis entre précision des résultats souhaitée et temps de calcul requis pour les obtenir. Enfin, la comparaison entre simulations numériques et résultats expérimentaux apparait comme une étape cruciale pour l'étude de la validité du modèle défini.

1.7. Problématique et articulation des étapes de la thèse

L'objectif principal de la thèse est de mettre en place un outil de prédiction des structures de solidification d'une pièce en acier 316L obtenue par LBM. La revue bibliographique présentée précédemment a révélé la diversité des modèles existants. Nous avons choisi d'étudier la formation des grains à l'échelle mésoscopique afin d'obtenir des temps de calcul plus courts que ceux requis dans la modélisation des microstructures. Ce choix a également été motivé par le fait que la connaissance de la structure interne du grain n'est pas essentielle pour notre étude. Une modélisation du problème à l'échelle de la pièce avait été exclue au préalable car trop imprécise.

Parmi les modèles disponibles à l'échelle mésoscopique, le modèle CAFE a montré de bons résultats dans de précédentes études appliquées au soudage. Pour rappel, ce modèle repose sur un couplage faible (chainage) entre un calcul thermique modélisant le procédé, effectué grâce à la méthode des éléments finis (EF) et un calcul de solidification réalisé *via* la méthode automate cellulaire (AC). De plus ce modèle offre un bon compromis entre performances informatiques (temps de calcul et mémoire de stockage) et précision des structures de grain simulées. Des études récentes appliquées à la fabrication additive par faisceau d'électrons ont également montré des résultats encourageants dans la simulation des structures de grains par la méthode CAFE. C'est l'ensemble de ces raisons qui ont motivé le choix du modèle CAFE pour prédire les structures de grains dans le cadre de cette thèse.

Pour la modélisation du procédé, nous avons fait le choix d'un modèle thermo-conductif, moins complexe et couteux en termes de temps de calcul que les modèles thermo-fluides. Les résultats obtenus dans la littérature avec ce type d'approche ont en effet montré qu'elle permettait d'obtenir des tailles de bain de fusion et des champs de températures proches de ceux obtenus expérimentalement.

La revue bibliographique a également révélé la nécessité de comparer simulations numériques et essais instrumentés afin d'étudier la validité du modèle défini. Pour cette raison mais aussi et surtout pour étudier la physique du procédé et identifier les phénomènes à prendre en compte dans notre modèle, une approche couplant essais instrumentés et modélisation numérique a été adoptée. Les essais permettront l'obtention d'informations liées au bain fondu et aux grains formés mais aussi l'étude des liens entre paramètres procédé et structures de grains formées. Il est important de remarquer que ces informations rempliront deux objectifs distincts et nous seront utiles à deux moments différents au cours de la thèse :

1. <u>*Avant*</u> la mise en place du calcul CAFE, afin d'appréhender la physique du procédé et pour étudier les liens entre paramètres procédé et structures de grains. L'étude préalable permet également la définition de la source de chaleur du modèle thermique ;
2. <u>*Après*</u> sa mise en place, pour comparaison des caractéristiques des grains expérimentaux et numériques.

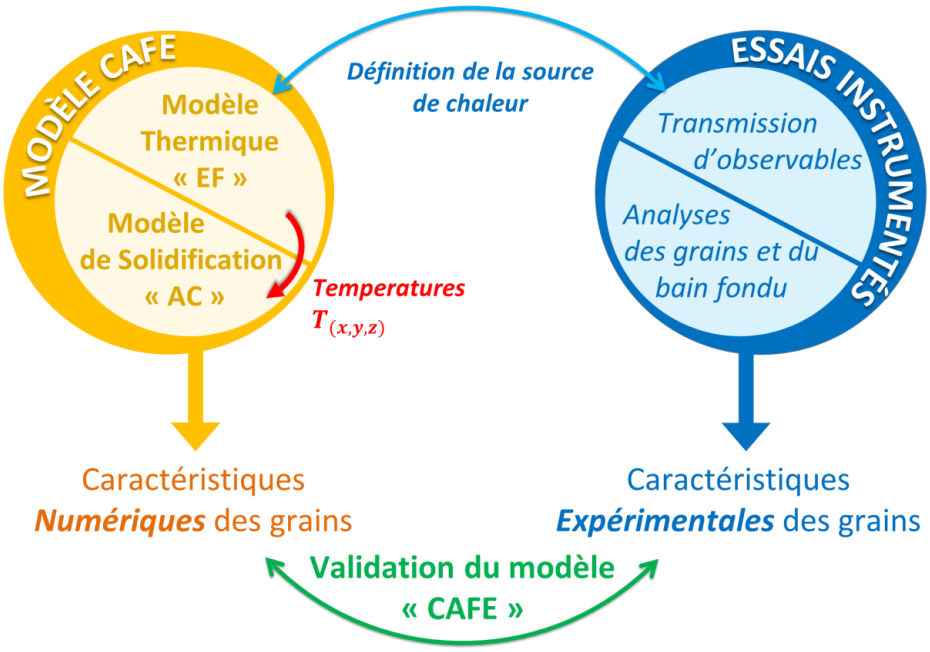


Figure 1.40. Organigramme présentant l'articulation des étapes principales de la thèse

Les observables expérimentaux (*i.e.* les caractéristiques du bain fondu) seront utiles pour la définition de la source de chaleur, et la comparaison des caractéristiques des grains permettra la validation ou l'identification d'axes d'amélioration du modèle CAFE préalablement défini. L'articulation entre ces étapes est schématisée sur la Figure 1.40.

A plus long terme, la mise en place du modèle de prédiction de grains permettra notamment de prédire le comportement mécanique des pièces réalisées par fabrication additive. En effet le comportement mécanique des pièces est directement conditionné par les caractéristiques des grains, comme l'ont montré diverses études [Denlinger 2017, Liverani 2017, Kong 2019, Sun 2019]. Par ailleurs, bien que dans le cas de cette étude l'interpolation au niveau des cellules concerne les champs thermiques, le modèle a été défini de façon à ce que d'autres champs puissent être transmis en fonction des applications choisies (modèle thermo-convectif par exemple). Enfin, ce modèle de prédiction des structures granulaires pourra aussi contribuer à faciliter le développer de nouvelles méthodes de contrôles non destructifs basées sur la modélisation du procédé de contrôle afin d'assister l'identification de défauts formés au cours de la fabrication.

Chapitre 2 Modèle CAFE

2.1. Présentation du modèle CAFE 49
2.2. Modèle thermique Éléments Finis 49
2.2.1. Phénomènes physiques pris en compte 50
2.2.2. Modélisation du procédé 53
2.3. Modèle AC 55
2.3.1. Modélisation des mécanismes physiques pris en compte 55
2.3.2. Initialisation du domaine d'étude 59
2.3.3. Définition des règles de transition 61
2.4. Couplage EF-AC 67
2.4.1. Transfert EF-AC 67
2.4.2. Données de sortie 69
2.5. Validation du modèle numérique sur cas test de la littérature 69
2.5.1. Germination et croissance d'un monocristal 70
2.5.2. Croissance compétitive 71
2.5.3. Conclusion 73
2.6. Conclusion du chapitre 73

2.1. Présentation du modèle CAFE

Pour modéliser la formation des structures de grains formées en fusion laser sur lit de poudre, nous avons choisi d'adopter la modélisation CAFE (*cf.* justification section 1.7). Rappelons que le terme CAFE provient de l'anglais *Cellular Automaton-Finite Element*, du fait que le modèle repose sur un couplage entre deux calculs :

- **Un calcul thermique** effectué grâce à la méthode des éléments Finis **(EF)** et permettant la modélisation du procédé LBM ;
- **Un calcul « des grains »**, réalisé à l'échelle mésoscopique et basé sur la méthode des Automates Cellulaires **(AC),** capable de prédire les caractéristiques des grains formés à l'issue de la fabrication d'une pièce lorsque sont intégrés dans le modèle les phénomènes physiques de solidification (germination, croissance dendritique).

Le modèle CAFE a été introduit pour la première fois par Gandin et Rappaz en 1994 afin de décrire la formation des grains en fonderie [Gandin 1994]. Ce premier modèle bidimensionnel a ensuite été amélioré en 1999 par les mêmes auteurs pour décrire, en 3 dimensions cette fois, la formation des structures de grain d'une aube de turbine obtenue par fonderie. Par la suite, les travaux utilisant le modèle CAFE se sont principalement intéressés au comportement mécanique des matériaux [Saluja 2012, Hewitt 2020, Li 2020] ou à la solidification de pièces métalliques [Guillemot 2004, Carozzani 2012, Chen 2016]. Les études menées sont définies en 2 ou 3 dimensions en fonction des cas et reposent principalement sur un couplage fort entre EF et AC ce qui signifie que la fraction solide et la chaleur latente de fusion sont prises en compte dans le modèle et transmises du calcul AC vers les EF. Afin d'améliorer les performances des calculs CAFE 3D, qui nécessitent d'importantes ressources de calcul (temps et mémoire de stockage), Carozzani a implémenté en parallèle son modèle au cours de sa thèse [Carozzani 2012]. Shijia Chen a développé au cours de sa thèse un modèle CAFE 3D couplé appliqué à l'étude des structures de grains formées en soudage [Chen 2014].

Nous avons vu dans le premier chapitre que les grains formés dans des pièces réalisées par procédé de fusion laser sur lit de poudre sont anisotropes, ce qui signifie que leurs caractéristiques varient en fonction de la direction considérée. Par conséquent, nous avons fait le choix de définir un modèle CAFE tridimensionnel pour cette étude de thèse, basé sur les travaux de modélisation de la solidification précédemment cités, adaptés au procédé de fusion laser sur lit de poudre. Par ailleurs, King et al. [King 2014] ayant montré qu'au cours du procédé LBM la chaleur latente résultant de la solidification d'un acier 316L joue un rôle négligeable par rapport à celle fournie au système par le laser, nous avons fait le choix d'un couplage faible entre EF et AC dans notre algorithme. Cela signifie que les températures obtenues par simulation du procédé sont transmises au calcul de solidification mais qu'à l'inverse, le calcul de solidification n'a aucune incidence sur les champs thermiques. Dans ce chapitre sont présentés les modèles éléments finis et automates cellulaires, leur couplage, ainsi que les étapes de validation numérique du modèle CAFE.

2.2. Modèle thermique Éléments Finis

Le modèle EF permet la modélisation et l'analyse des variations de températures au cours du procédé LBM. La nécessité d'intégration des transferts d'énergie et de masse dans la modélisation du procédé a été mise en avant dans la partie bibliographique, tout comme celle de modéliser le procédé en 3D plutôt qu'en 2D afin de correctement modéliser le bain fondu et la texture. Par ailleurs, nous avons vu qu'il existe un grand nombre de méthodes de modélisation du procédé, permettant différents niveaux de prise en compte des phénomènes physiques intervenant en LBM

(Figure 1.26). Ces travaux de thèse ayant pour objectif de mettre en place un modèle couplé, il nous est impossible de prendre en compte l'ensemble de ces phénomènes : seulement les principaux sont considérés à savoir la conduction et la convection. Le rayonnement sera néanmoins intégré indirectement *via* l'utilisation d'un coefficient d'échange équivalent. Ces trois raisons nous ont conduit à la définition d'un modèle tridimensionnel thermo-conductif effectué en utilisant la version 2019 du logiciel EF Cast3M [Cast3M 2019].

2.2.1. Phénomènes physiques pris en compte

Au cours du procédé LBM, le laser fournit de la chaleur au lit de poudre, qui peut être modélisée par une densité volumique de puissance apportée dans la zone d'interaction du laser avec le matériau, formant localement le bain liquide. Cette chaleur se dissipe ensuite par convection et rayonnement à partir des surfaces de la pièce, et par conduction dans les couches inférieures ou dans le substrat (Figure 1.26). Notons que les phénomènes de convection à l'intérieur du bain liquide formé peuvent aussi contribuer au transfert de chaleur, notamment en favorisant ou ralentissant la conduction de chaleur dans le reste de la pièce ou dans le substrat à partir des surfaces séparant le bain liquide du métal solide. Afin d'estimer la contribution relative de chacun de ces modes de transfert de chaleur, nous nous intéressons à certains nombres adimensionnels.

2.2.1.1. Nombre de Biot

Le nombre de Biot permet de caractériser le rapport du transfert thermique entre la surface d'un corps et son environnement, sur celui dû à la conduction dans le solide. Il est donné par la relation suivante :

$$Bi = \frac{hL_c}{\lambda} \tag{20}$$

où h est le coefficient de transfert thermique (W.m^{-2}.K^{-1}), L_c la longueur caractéristique du système (m) et λ la conductivité thermique du matériau (W.m^{-1}.K^{-1}). Dans le cas où le nombre de Biot est supérieur à 1 on parle de système mince, ce qui signifie que l'échange thermique de surface est plus important que l'échange thermique massique. A l'inverse, un nombre de Biot inférieur à 1 nous indique que l'influence de la conduction est prépondérante dans l'évolution de la température du solide.

2.2.1.2. Nombre de Péclet

Le nombre de Péclet thermique permet de comparer le transport thermique au sein d'un fluide effectué par convection vis-à-vis de celui assuré par diffusion. Il est calculé de la façon suivante :

$$Pe = \frac{L_c U}{\alpha} \tag{21}$$

où U correspond à la vitesse caractéristique de l'écoulement dans le fluide (m.s^{-1}) et α à la diffusivité thermique donnée en m^2.s^{-1}, calculée comme suit :

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p} \tag{22}$$

où ρ est la masse volumique du matériau (kg.m^{-3}), λ sa conductivité thermique (W.m^{-1}.°C^{-1}) et C_p sa capacité calorifique massique (J.kg^{-1}.°C^{-1}).

Une valeur élevée du nombre de Péclet traduit un transport de chaleur essentiellement effectué par convection, alors qu'une faible valeur du Péclet (<<1) correspond à un transfert de chaleur principalement conductif dans le bain liquide.

2.2.1.3. Vitesse d'écoulement du bain fondu

En vue de déterminer le nombre de Péclet, il est nécessaire d'estimer la vitesse caractéristique d'écoulement du fluide. Pour cela, nous utilisons l'expression de la somme des forces exercées sur la surface du bain, en faisant l'hypothèse qu'en LBM la force de Marangoni prédomine sur les autres. L'égalité suivante peut alors être écrite [Brochard 2009] :

$$f_M \sim \frac{\mu_D U}{L_c} \tag{23}$$

où μ_D est la viscosité dynamique du fluide donnée en kg.m^{-1}.s^{-1} et f_M la force de Marangoni définie telle que :

$$f_M = \frac{\partial \gamma}{\partial T} \nabla_S T \tag{24}$$

avec $\nabla_S T$ le gradient surfacique de température du bain et $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ donné en N.m^{-1}.°C^{-1} la variation avec la température du coefficient de tension de surface. La valeur de $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ est calculée en considérant l'expression proposée par Sahoo pour les aciers à basse teneur en soufre [Sahoo 1988]. Le gradient surfacique de température est quant à lui évalué en utilisant la relation suivante :

$$\nabla_S T = \frac{T_{Max} - T_{Sol}}{L_c} \tag{25}$$

avec T_{Max} la température maximale atteinte par le liquide et T_{Sol} la température du solidus. La valeur de température maximale a été fixée à 2000 °C [Cheng 2018]. En combinant les équations *(23)* à *(25)*, la vitesse d'écoulement du fluide peut s'écrire comme suit :

$$U = \frac{\partial \gamma}{\partial T} \frac{T_{Max} - T_{Sol}}{\mu_D} \tag{26}$$

2.2.1.4. Nombres adimensionnels appliqués au procédé LBM

Le nombre de Biot nous permet de comparer l'importance relative des transferts thermiques par conduction dans le volume du métal chauffé localement par le laser, par rapport aux échanges thermiques avec le milieu extérieur gazeux à travers les surfaces des pièces. Le nombre de Péclet thermique permet de comparer au sein du bain liquide l'influence relative sur le transfert de chaleur de la conduction et de la convection produite par les écoulements au sein du liquide.

Les valeurs utilisées pour déterminer ces grandeurs adimensionnelles ainsi que la vitesse caractéristique d'écoulement du fluide et les nombres de Péclet et de Biot calculés sont résumés dans le Tableau 2.1. Afin de calculer le coefficient de diffusivité, les propriétés du 316L liquide ont été utilisées (*cf.* Annexe 1 [Depradeux 2004]). Par ailleurs, la longueur caractéristique L_c a été fixée à 100 µm ce qui correspond à la profondeur du bain fondu généralement observée en LBM. La valeur de viscosité dynamique choisie est celle utilisée par Fan et al. dans l'étude d'un acier AISI-304 [Fan 2001].

La vitesse caractéristique calculée en utilisant l'équation (26) et les valeurs précédemment citées est de 12,8 m.s^{-1}. À titre indicatif, une étude expérimentale réalisée en 2015 par des chercheurs de l'Université d'Osaka, s'est intéressée aux vitesses d'écoulement du bain fondu formé au cours du soudage à l'arc d'un plateau de titane pur [Nakamura 2015]. En réalisant des observations *in situ* par rayons-X, cette étude réalisée avec une vitesse de déplacement d'arc de 17 mm.s^{-1}, a mesuré une vitesse d'écoulement moyenne dans le bain de 0,57 m.s^{-1}. La vitesse moyenne mesurée est donc plus de 20 fois inférieure à celle calculée dans notre étude. Dans l'étude expérimentale comme dans le cas de notre étude la vitesse caractéristique d'écoulement du fluide est 30 fois plus importante que la vitesse de déplacement de la source (une vitesse de déplacement laser de 400 mm.s^{-1} est considérée pour le procédé LBM).

Tableau 2.1. Grandeurs physiques retenues pour la fabrication par LBM d'un 316L et nombres adimensionnels calculés

Grandeurs	Symbole	Valeurs	Unités
Longueur caractéristique	L_c	1.10^{-4}	m
Conductivité thermique	λ	28,3	W.m^{-1}.°C^{-1}
Masse volumique	ρ	7,3.10^{3}	kg.m^{3}
Capacité calorifique	C_p	690	J.kg^{-1}.°C^{-1}
Coefficient de transfert thermique	h	10	W.°C^{-1}.m^{-2}
Gradient de tension de surface	$\left\lvert\frac{\partial\gamma}{\partial T}\right\rvert$	4.10^{-4}	N.m^{-1}.°C^{-1}
Température maximale du fluide	T_{Max}	2000	°C
Température de solidus	T_{Sol}	1397	°C
Viscosité dynamique du fluide	μ_D	5.10^{-2}	kg.m^{-1}.s^{-1}
Diffusivité thermique	α	5,6.10^{-6}	m².s^{-1}
Vitesse de l'écoulement	U	4,8	m.s^{-1}
Nombre de Péclet	Pe	86	-
Nombre de Biot	Bi	3,5.10^{-5}	-

Le nombre de Biot obtenu pour un coefficient de transfert thermique de 10 W.°C^{-1}.m^{-2} est très largement inférieur à 1 (Tableau 2.1). En recalculant le nombre de Biot avec un coefficient 100 fois supérieur à celui initialement choisi (h =10^{3}), le nombre de Biot est toujours largement inférieur à 1 (3,5.10^{-2}). L'obtention d'une faible valeur du nombre de Biot indique que la conduction domine sur les échanges de chaleur entre le solide et le milieu extérieur. Ce résultat nous permet de faire l'hypothèse que le système n'est pas directement sensible aux conditions aux limites appliquées aux surfaces du domaine maillé en contact avec l'environnement extérieur.

Le nombre de Péclet ne permet pas de considérer comme négligeable le mode de convection par rapport à celui de conduction au sein du bain liquide. Ce résultat peut poser problème, car dans le modèle thermo-conductif retenu nous ne pouvons modéliser l'effet des écoulements dans le métal liquide sur les transferts thermiques. Néanmoins, sa valeur dépendant directement de la vitesse

d'écoulement du fluide, elle-même fonction du gradient de tension de surface et de la viscosité dynamique du fluide, elle est amenée à varier fortement. Par exemple l'augmentation de μ_D par un facteur 10 entraine la diminution de la vitesse d'écoulement du fluide et donc du Péclet d'un facteur 10 également. Si à cela est combinée une diminution de $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ alors la valeur du Péclet aura diminué d'un facteur 100, donnant un résultat inférieur à 1. Par ailleurs, dans le cas du soudage TIG où le nombre de Péclet obtenu est également important (>>1) des études de modélisation du procédé par un modèle thermo-conductif ont montré que les résultats thermiques obtenus étaient suffisants pour une première approche [Kollár 2019]. Par ailleurs, cette difficulté peut être en partie surmontée grâce à l'utilisation de modèles de sources de chaleur complexes [Goldak 1984, Zhang 2019b], *via* l'augmentation artificielle de la conductivité du métal lorsque sa température devient supérieure à la température de liquidus [Tan 2015] et/ou au calage des paramètres de la source sur les dimensions du bain réel [Kollár 2019].

2.2.2. Modélisation du procédé

Comme énoncé en introduction de cette partie, nous avons fait le choix d'un modèle thermo-conductif dans le cadre de cette thèse. Cette option permet de prendre en compte de façon simplifiée les principaux phénomènes physiques intervenant au cours du procédé LBM tout en s'affranchissant de temps de calcul importants. Par ailleurs, le modèle est décrit ici de façon globale afin qu'il puisse être transposé à d'autres applications (autres procédés de FA , soudage multi-passes ou autre).

2.2.2.1. Equation de conservation de l'énergie

Les températures sont obtenues par résolution de l'équation de conservation de l'énergie, qui dans le cas d'un modèle conductif est donnée par l'équation de Fourrier :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = div\left(\lambda . \overrightarrow{\nabla T}\right) + q_v \tag{27}$$

où T est la température (°C), q_v est la contribution volumique de la source de chaleur (W.m^{-3}) (source dépendante du procédé, *cf.* paragraphes 4.1.4 et 5.1.4), ρ la masse volumique du matériau (kg.m^{-3}), λ sa conductivité thermique (W.m^{-1}.°C^{-1}), C_p sa capacité calorifique massique (J.kg^{-1}.°C^{-1}) et $\overrightarrow{\nabla T}$ le gradient thermique (°C.m^{-1}). Les valeurs de ρ, λ et C_p dépendent de la température et du matériau considérés (*cf.* paragraphe 2.2.2.2). Afin de résoudre l'équation (27), il est également nécessaire de préciser les champs de températures initiaux ainsi que les conditions aux limites. Ces conditions initiales et aux limites dépendent du système étudié.

2.2.2.2. Apport de poudre

L'apport de matière en LBM se fait par ajout de couches de poudre successives puis par fusion du lit de poudre par le faisceau laser (*cf.* paragraphe 1.2.1). Lors de la fabrication de pièces industrielles, la poudre influence fortement les transferts de chaleur au cours du procédé. Il est donc important au moment de la modélisation du procédé de prendre en compte la poudre. Des modèles discrets permettant de modéliser les grains de poudre individuellement ont été présentés dans le chapitre 1 (*cf.* paragraphe 1.5.2.1). Cependant, ces calculs nécessitent la prise en compte de nombreux phénomènes physiques dans le modèle et sont couteux en temps de calcul et en mémoire de stockage. Par conséquent, nous faisons l'hypothèse que le lit de poudre est un milieu continu auquel sont attribuées les propriétés thermiques de la poudre (*cf.* 2.2.2.5).

Seul le volume de matière est maillé dans cette étude et les transferts thermiques avec le milieu environnant sont alors modélisés par les conditions aux limites (*cf.* paragraphe 2.2.2.1). L'étape d'initialisation du système consiste à désactiver les éléments correspondant à la matière non présente au début du procédé. Ensuite, afin de modéliser l'apport de matière, les éléments correspondant au matériau déposé sont activés par bloc au fur et à mesure de la construction de la pièce. La Figure 2.1 permet d'illustrer ces étapes d'initialisation et d'apport de matière appliquées au procédé LBM. Au début de la fabrication d'une pièce par LBM, le seul matériau présent est le substrat. Par conséquent l'étape d'initialisation consiste à désactiver tous les éléments ne correspondant pas au substrat (Figure 2.1 (a)). Le dépôt de la couche de poudre est ensuite modélisé par l'activation d'un bloc d'éléments correspondant à la hauteur de poudre déposée (Figure 2.1 (b)).

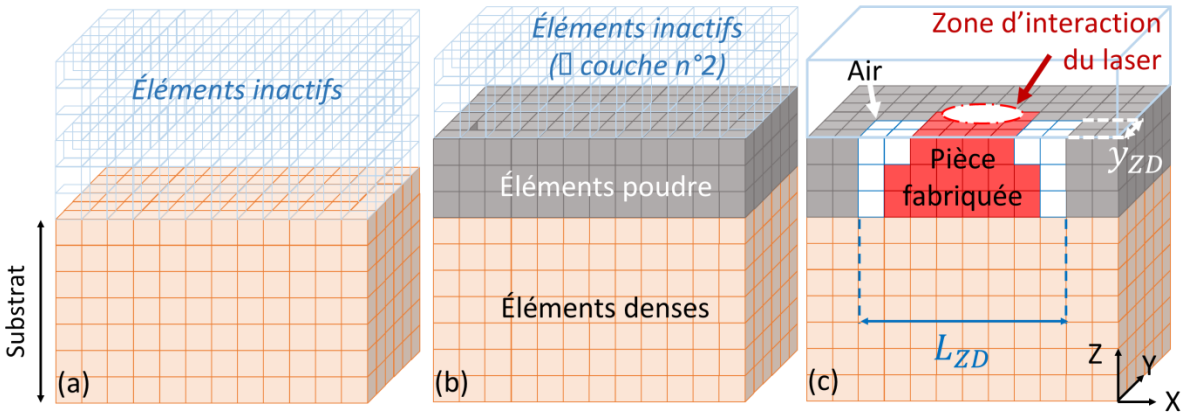


Figure 2.1. Représentation schématique dans le cas de la modélisation du procédé LBM, des étapes (a) d'initialisation, (b) d'apport de matière et (c) d'évolution des propriétés matériau

2.2.2.3. Transformation poudre – matériau dense

Au cours du procédé LBM, le bain fondu est formé grâce à l'énergie fournie par le laser et est alimenté par les grains de poudre situés à sa périphérie. La transformation de poudre à métal liquide a donc lieu lorsque les particules de poudre atteignent une température nécessaire à leur fusion, générant ainsi le bain fondu. Afin de modéliser la transformation de la poudre en un matériau dense, les propriétés des éléments concernés sont modifiées (*cf.* paragraphe 2.2.2.5) et des éléments appartenant initialement à la poudre sont alors rattachés à la zone définissant la pièce fabriquée (Figure 2.1 (c)).

2.2.2.4. Dénudation

Au cours de la fabrication de pièces par procédé LBM, une zone dénuée de poudre est observée autour du cordon formé : on parle de zone de dénudation. Cette zone vide de poudre est principalement due à l'éjection d'une partie de la poudre située en périphérie du bain vers l'extérieur du cordon et à l'alimentation du bain par d'autres grains de poudre (*cf.* paragraphe 1.2.3.2). Dans le cas de la modélisation du procédé LBM il est donc utile de modéliser ce phénomène. Pour cela, nous avons fait en sorte que les éléments du modèle correspondant initialement à la poudre et respectant certaines conditions géométriques puissent évoluer vers des éléments dits « air » (Figure 2.1 (c)). Les conditions de transformation ainsi que les modifications des propriétés matériau associées sont abordées dans la section 5.1.1.

2.2.2.5. Propriétés matériaux

Une fois l'apport de poudre modélisé et les différentes zones du maillage définies (substrat, pièce fabriquée, lit de poudre et zone de dénudation) il est nécessaire de spécifier les propriétés associées

aux différents matériaux présents dans le système. De cette façon, les éléments rattachés à une même zone auront des propriétés matériau identiques.

Dans cette étude, l'hypothèse est faite que les propriétés du substrat et de la pièce fabriquée sont identiques. Cette hypothèse est cohérente avec les travaux de Wang et al. [Wang 2016] qui ont montré que la densité relative de la pièce obtenue par procédé LBM est supérieure à 98 %. Par conséquent, trois milieux distincts sont définis pour une application LBM : la poudre, le matériau dense (substrat ou pièce fabriquée) et l'air.

Au début du calcul, les éléments actifs se voient attribuer les propriétés du substrat ou du lit de poudre en fonction de leur localisation dans le maillage. Ensuite, au cours du calcul thermique, les propriétés des éléments situés initialement dans le lit de poudre sont amenées à évoluer selon les règles qui auront été définies. Les propriétés indispensables à la caractérisation des matériaux sont :

- la capacité calorifique massique du matériau, C_p (J.kg-1.°C-1) ;
- sa conductivité thermique, λ (W.m-1.°C-1) ;
- sa masse volumique, ρ (kg.m-3) ;
- ses températures de liquidus et de solidus, T_{Liq} et T_{Sol} (°C).

Ces grandeurs physiques sont souvent thermo-dépendantes. Les valeurs des propriétés matériau utilisées dans le cadre de ces travaux de thèse sont discutées dans les sections 4.1.2 et 5.1.2.

2.3. Modèle AC

Afin de modéliser la formation des structures de grains formées au cours du procédé, nous avons retenu la méthode Automate Cellulaire (AC). La prédiction des structures de grains par modélisation AC présente notamment l'avantage de fournir une description détaillée des caractéristiques des grains incluant leurs dimensions, leur morphologie ainsi que leur orientation cristallographique, ce qui est rarement calculé avec les autres modèles. En plus, les AC ont montré leur capacité de prédiction de la solidification au cours de précédentes études effectuées sur des pièces de fonderie ou soudées (*cf*. section 2.1). Par ailleurs, l'utilisation des AC est adaptée à la prédiction du comportement mécanique des pièces (comportement en fatigue, fissuration à chaud ou autre), qui fait partie des perspectives de ces travaux de thèse.

Le modèle AC utilisé dans le cadre de cette thèse s'appuie sur celui proposé initialement par Gandin et Rappaz [Gandin 1994], focalisé sur l'évolution de l'enveloppe des grains au cours de la solidification. La version utilisée pour les travaux présentés dans ce manuscrit a été entièrement développée au cours de la thèse (de sa définition à son utilisation en passant par sa programmation) et constitue le tout premier modèle CAFE CEA appliqué à la solidification. Le modèle est codé en langage Fortran et compilé *via* le logiciel Cast3M. Dans un premier temps, la modélisation des mécanismes physiques pris en compte est présentée, puis l'algorithme AC associé est détaillé.

2.3.1. Modélisation des mécanismes physiques pris en compte

Les principaux phénomènes physiques intervenant au cours de la solidification, à savoir la fusion, la germination et la croissance dendritique ont été présentés dans le premier chapitre (paragraphe 1.4). Indépendamment du procédé utilisé, au cours de la fabrication en FA d'une pièce métallique, la matière subit une transformation solide-liquide : c'est le phénomène de fusion. Ensuite, en refroidissant, la matière se solidifie de nouveau suite au phénomène de germination et de croissance, dépendant des conditions thermiques du système et des caractéristiques des grains en présence. Par conséquent, le modèle défini doit être en mesure de prendre en compte les

caractéristiques des grains et de modéliser les phénomènes de fusion, de germination et de croissance dendritique.

2.3.1.1. Modélisation d'un grain issu de la solidification

Un grain est composé d'une microstructure dendritique monocristalline, c'est-à-dire d'un ensemble d'atomes organisés selon un réseau cristallin ayant une unique orientation cristallographique dans l'espace. Avec la méthode AC, un grain numérique est donc représenté spatialement par un regroupement de cellules adjacentes partageant les mêmes caractéristiques granulaires (*cf.* section 2.3.2). Nous avons vu dans le chapitre bibliographique qu'au cours de la solidification, les grains sont formés depuis l'état liquide par germination et croissance, ou par croissance par épitaxie des grains initialement présents à la frontière du domaine liquide (*cf.* paragraphe 1.4). Une fois formés, les grains croissent au sein du liquide dans toutes les directions de l'espace au cours du refroidissement, jusqu'à ne plus pouvoir progresser lorsqu'ils rencontrent d'autres grains et/ou les frontières du domaine métallique. Dans le cas du procédé LBM, les forts gradients et taux de solidification générés conduisent principalement à la formation d'un front de solidification dendritique. Les grains formés sont alors composés de dendrites dont les bras primaires sont orientés suivant les directions cristallographiques préférentielles de croissance de la structure cristalline.

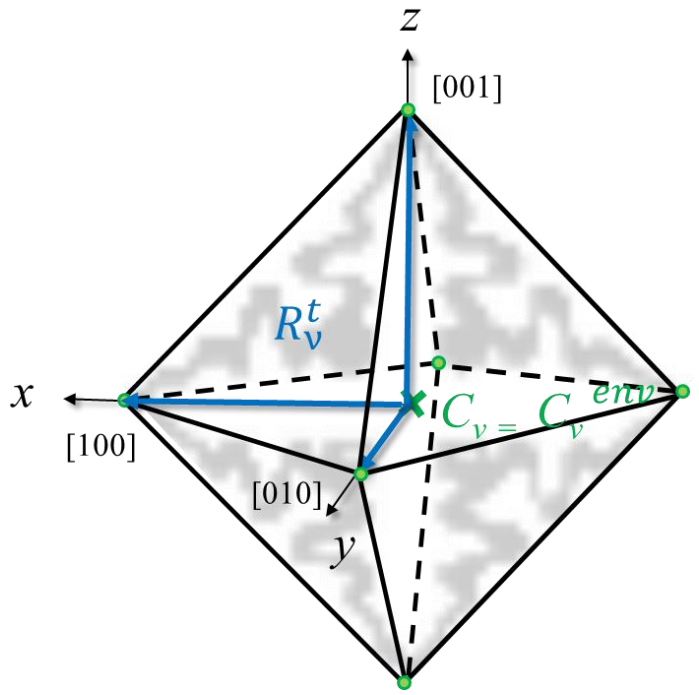


Figure 2.2. Représentation schématique de l'enveloppe octaédrique régulière formée dans la cellule ν suite à sa germination

Dans le but de modéliser précisément la formation des grains et afin de limiter l'influence de la géométrie des cellules sur la croissance granulaire, une enveloppe est attribuée à l'ensemble des cellules. Au cours de la solidification, les aciers inoxydables austénitiques forment un réseau cubique à faces centrées. Il est donc intéressant de choisir une enveloppe octaédrique régulière (Figure 2.2), dont les axes principaux représentent les directions cristallographiques <100> du cristal (directions préférentielles de croissance pour les métaux cubiques), et par conséquent les bras dendritiques primaires du grain. Afin de caractériser le grain formé, un indice unique n_{gr} ainsi qu'une orientation cristallographique donnée par les angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ sont attribués à l'enveloppe. Les angles d'Euler sont définis entre le réseau cristallin et celui de la pièce et sont donnés par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \varphi_1 = 2\pi\,(0{,}5 - u_1) + \pi \\ \phi = \arccos\,(1 - 2u_2) \\ \varphi_2 = 2\pi\,(0{,}5 - u_3) + \pi \end{cases} \quad \text{où} \quad \begin{matrix} \varphi_1 \in [0, 2\pi[\\ \phi \in [0,\ \pi] \\ \varphi_2 \in [0, 2\pi[\end{matrix} \tag{28}$$

où u_1, u_2 et u_3 sont compris entre 0 et 1 et choisis aléatoirement de manière uniforme. Les axes de l'enveloppe sont alors inclinés suivant l'orientation cristallographique du grain qu'elle représente (Figure 2.3 (b)). En plus de l'orientation cristallographique, l'enveloppe est caractérisée par son rayon R_v^t ainsi que par son centre C_v^{en} (Figure 2.2). Au début du calcul, l'enveloppe est centrée sur la cellule AC à laquelle elle est rattachée ($C_v^{en} = C_v$) et son rayon initial, $R_v^{t_0}$ est nul (Figure 2.3 (a)).

2.3.1.2. Modélisation de la fusion

La première transformation que subit la matière est la fusion. Dans le cas de la fabrication de pièces par LBM par exemple, la matière passe d'un état poudre ou solide (substrat) à un état liquide lors de la formation du bain fondu. La modélisation de la fusion est donc faite en considérant qu'une cellule AC v devient liquide lorsque sa température T_v dépasse celle du liquidus, T_{Liq}.

2.3.1.3. Modélisation de la germination

Seule la germination hétérogène est prise en compte dans le modèle AC. Pour rappel, la germination hétérogène consiste en l'activation de sites de germination présents lorsque ceux-ci refroidissent et atteignent une surfusion suffisamment élevée (*cf.* paragraphe 1.4.1). Deux étapes sont considérées afin de modéliser la germination hétérogène : la distribution de sites de germination dans le liquide, et l'attribution d'une orientation cristallographique aux sites ayant germé. L'attribution d'une orientation est effectuée de la même façon que détaillée dans le paragraphe 2.3.1.1 (équation (28)).

Afin de positionner les sites de germination dans la partie liquide du matériau, il est nécessaire dans un premier temps de calculer le nombre de sites de germination existants, N_{nucl}. Dans le cadre de cette thèse, seule la germination volumique est modélisée ce qui conduit, pour obtenir le nombre de sites de germination, à multiplier le volume de liquide en surfusion V_{Liq} par la densité moyenne de germination n_{nucl} :

$$N_{nucl} = V_{Liq} n_{nucl} \tag{29}$$

La densité moyenne de germination n_{nucl} est un paramètre qui peut être estimé pour un matériau donné par l'analyse expérimentale des microstructures de solidification.

À chaque site est ensuite attribuée une surfusion de germination critique ΔT_{nucl}, à partir de laquelle le site peut germer. Cette surfusion est calculée selon une distribution probabiliste décrite dans la thèse de Carozzani [Carozzani 2012] par la relation suivante :

$$\Delta T_{nucl} = \Delta T_{moy} + \sqrt{-2.\ln(a_1)}.\cos(2.\pi.a_2)\Delta T_\sigma \tag{30}$$

où a_1 et a_2 sont deux nombres aléatoires uniformément compris entre 0 et 1, ΔT_{moy} la moyenne des surfusions de germination et ΔT_σ l'écart type de ces surfusions. Les valeurs de ΔT_{moy} et ΔT_σ retenues sont de 3 K et 0,5 K respectivement et issues de cette même thèse [Carozzani 2012].

Une fois une valeur de surfusion critique associée à chaque site, N_{nucl} cellules situées dans la partie liquide en surfusion (*i.e.* $T_{Liq} \geq T_v$) sont sélectionnées aléatoirement afin de représenter des sites

potentiels de germination. Si plusieurs sites sont situés dans une même cellule, seul celui avec la surfusion la plus faible est conservé.

2.3.1.4. Modélisation de la croissance

Comme énoncé précédemment, les grains modélisés possèdent une enveloppe capable de croitre afin de reproduire la croissance du grain. Les axes de l'octaèdre représentant les bras dendritiques primaires, ses sommets correspondent aux pointes de dendrites du cristal. Le modèle de croissance granulaire repose donc sur la prédiction de la croissance en pointe de dendrite. Pour cela une cinétique de croissance dendritique est définie comme suit.

La vitesse de croissance des sommets de l'enveloppe et donc des pointes de dendrites est calculée selon l'équation du modèle KGT présentée dans le paragraphe 1.4.2.3 et rappelée ci-dessous :

$$v_d(\Delta T_\nu) = a_n {\Delta T_\nu}^n \tag{31}$$

où ΔT_ν est la surfusion de la cellule ν, et a_n et n sont deux paramètres. Ils peuvent être calculés numériquement à partir des équations (9) à (18) (*cf.* paragraphe 1.4.2.2) dans lesquelles sont entrées les propriétés physiques de l'acier 316L ainsi que les gradients thermiques obtenus numériquement à l'issue des simulations du procédé LBM. Le calcul des valeurs de a et n adaptées à la configuration étudiée dans le cadre de cette thèse est détaillé dans la section 4.2.2.

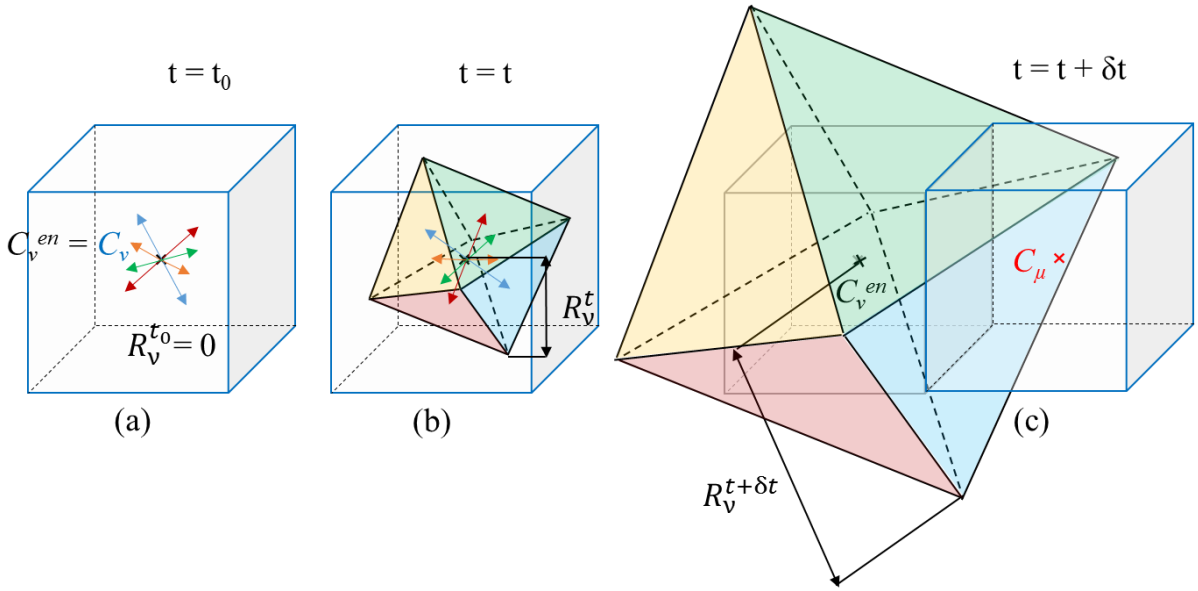


Figure 2.3. Enveloppe de la cellule ν à différents instants : (a) directement après germination, (b) après croissance du grain germé et (c) au moment de la capture de la cellule voisine μ

Une fois la vitesse de croissance connue, l'extension de l'enveloppe $\Delta R_\nu^{t+\delta t}$ au cours du pas de temps δt est calculée comme suit :

$$\Delta R_\nu^{t+\delta t} = v_d(\Delta T_\nu)\delta t \tag{32}$$

avec δt le pas de temps automate cellulaire ou micro pas de temps en seconde (*cf.* paragraphe 2.4.1.4). Dans le cadre de cette étude nous avons fait le choix d'un octaèdre régulier, donc l'extension de l'enveloppe est la même dans toutes les directions. Le rayon de l'enveloppe obtenu après croissance est alors donné par la relation suivante :

$$R_v^{t+\delta t} = R_v^t + \Delta R_v^{t+\delta t} \tag{33}$$

où R_v^t correspond au rayon de l'enveloppe au début du micro pas de temps (Figure 2.3 (b) et (c)).

2.3.2. Initialisation du domaine d'étude

Une fois la physique du modèle définie, l'algorithme automate cellulaire associé est construit. Pour rappel, la méthode AC repose sur quatre principes de base : la discrétisation spatiale du domaine en cellules, la définition d'un voisinage, l'attribution d'état et de variables aux cellules et finalement, la définition de règles de transition. Les trois premiers principes sont des étapes d'initialisation et sont donc détaillés dans cette partie. Les règles de transition quant à elles sont décrites dans la partie 2.3.3.

2.3.2.1. Discrétisation spatiale du domaine étudié

Le système étudié est discrétisé en éléments réguliers de mêmes dimensions appelés cellules. Les cellules choisies dans le cadre de cette étude effectuée en 3D sont des cubes dont la taille varie entre un et dix microns, ordonnés en une structure régulière parallélépipédique de 280 µm de largeur, 1000 µm de longueur et de 150 µm de hauteur (Figure 2.5). À chaque cellule est attribué un indice v permettant son identification unique.

2.3.2.2. Définition du voisinage

Une fois le réseau de cellules caractérisé, le voisinage est décrit. Le voisinage correspond au nombre de cellules considérées aux environs d'une cellule d'intérêt, qui joueront un rôle dans l'application des règles de transition. Plusieurs degrés de voisinage existent, allant du 1er au 3ème ordre, représentés par différentes couleurs sur la Figure 2.4. Les premiers voisins partagent une face avec la cellule (6 voisins), les deuxièmes une arrête (12 voisins) et les troisièmes un coin (8 voisins). Dans cette étude sont considérés les voisins de 1er, 2ème et 3ème ordres, totalisant ainsi 26 voisins.

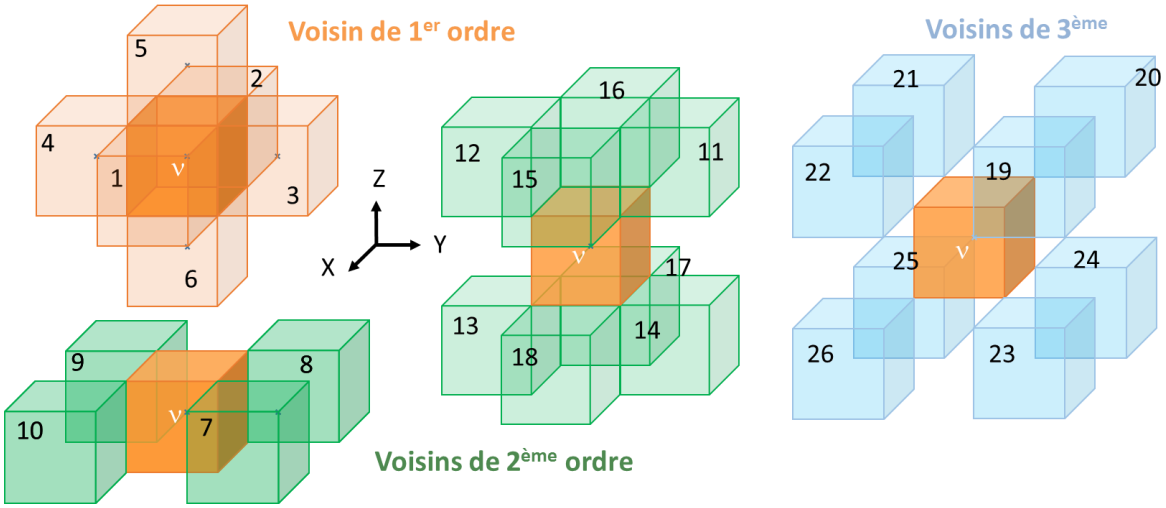


Figure 2.4. Représentation schématique des voisins de la cellule v représentée en orange

2.3.2.3. Attribution d'état et de variables aux cellules

Une fois le domaine discrétisé en cellules et le voisinage défini, plusieurs variables sont attribuées aux cellules afin de les caractériser. Les principales sont la température T_v, l'état de la cellule caractérisé par un indice I_v, le cas échéant le numéro du grain de rattachement n_{gr}, l'orientation cristallographique de ce grain caractérisée par les trois angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)_v$, sa vitesse de croissance v_d, et les caractéristiques de l'enveloppe du grain (*i.e.* son rayon R_v^t et les coordonnées de

son centre, C_ν). Dans le cadre de cette étude appliquée à la réalisation de pièces par procédé LBM, cinq états sont définis :

- I_ν = 0 : cellule **liquide**, si la cellule est localisée dans la zone fondue ;
- I_ν = 1 : cellule « **pâteuse** », pour une cellule située à l'interface solide/liquide. Ces cellules sont susceptibles de croître en intégrant un grain voisin ou par le phénomène de germination ;
- I_ν = 2 : cellule **solide**, ce qui signifie que la cellule ne peut plus croître ;
- I_ν = 3 : cellule dite « **fantôme** », non prise en compte dans le calcul (cellule non rattachée à un élément fini ou non située dans une zone métallique, *i.e.* représentant l'air par exemple ;
- I_ν = 4 : cellule **poudreuse**, dans le cas d'une cellule localisée dans le lit de poudre.

Dans le cas où ce modèle serait utilisé pour d'autres procédés sans poudre (WAAM, soudage multicouche ou autre), l'état 4 peut correspondre à de l'air par exemple, ou à un matériau représentant le matériau déposé.

Ces états et variables sont ensuite amenés à évoluer au cours du calcul en fonction des règles de transition définies dans l'algorithme de calcul (Figure 2.7) et décrites dans la partie 2.3.3. À titre d'exemple, une cellule correspondant à la pièce fabriquée et initialement située dans le lit de poudre subit trois changements d'état au cours du calcul : une transformation de l'état poudre à l'état liquide (I_ν = 4 → 0) au moment du passage du laser, puis au cours du refroidissement elle évolue de liquide à pâteuse puis de pâteuse à solide (I_ν = 0 → 1 → 2).

2.3.2.4. Initialisation des grains

Indépendamment du procédé utilisé, les matériaux initialement présents se trouvent à l'état solide (dense ou poudre). Par conséquent, il est nécessaire de modéliser la structure granulaire initialement présente, à savoir celle du substrat et du lit de poudre dans le cas du procédé LBM. Pour cela, deux types d'initialisation aléatoires sont prévus dans ce modèle AC. Tout d'abord, les cellules peuvent être initialisées individuellement si l'hypothèse est faite que chaque cellule correspond à un grain (Figure 2.5 (a)).

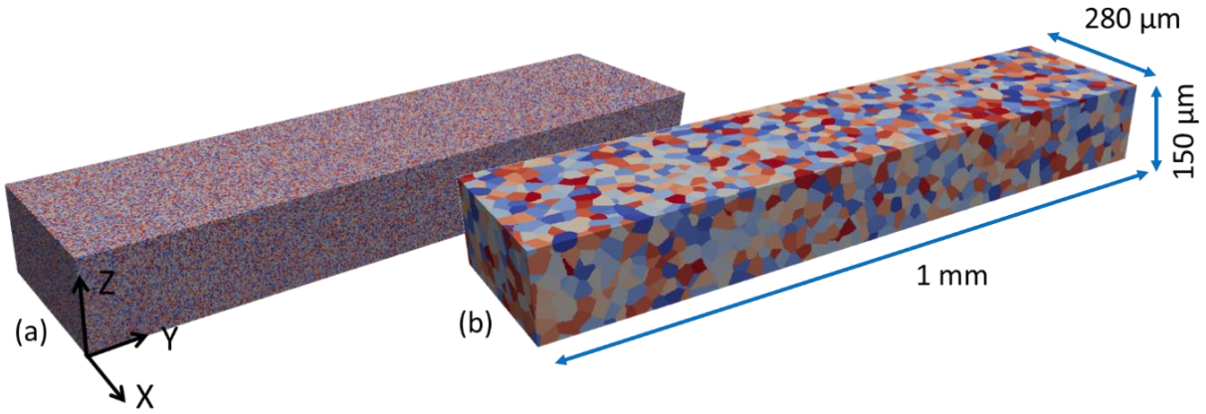


Figure 2.5. Initialisation aléatoire des cellules (a) individuellement, (b) en utilisant les partitions de Voronoï. Sur cette figure les grains sont représentés de différentes couleurs

Cependant, dans le cas où la taille des cellules serait relativement petite par rapport à celle des grains présents dans le système et pour pouvoir modéliser de façon réaliste la structure initiale, il est important de pouvoir regrouper des cellules entre elles au moment de l'initialisation. C'est le cas en fusion laser sur lit de poudre, où les cellules de l'ordre du micron sont plus petites que les grains

présents dans le substrat et que les particules de poudre (plusieurs dizaines de microns). Pour cela, différentes méthodes peuvent être envisagées parmi lesquelles la croissance de germes positionnés dans le domaine initial, ou encore l'utilisation de cellules de Voronoï. Dans le cadre de cette étude, le substrat étant composé de grains considérés équiaxes, et le lit de poudre de particules à géométrie supposée sphérique, nous utilisons une partition de Voronoï [Aurenhammer 1991] pour modéliser les distributions initiales de grains dans le substrat, et de particules dans le lit de poudre (Figure 2.5 (b)), car moins coûteuse en temps de calcul que la solidification de germes. Cette partition en cellules de Voronoï est effectuée sur un maillage éléments finis comparable à celui utilisé pour le calcul thermique, centré sur la zone d'intérêt (autour de la zone fondue).

Dans le cas où plusieurs milieux discontinus existeraient à l'état initial ou dans celui ou plusieurs tailles de grains seraient présentes dans un même milieu, plusieurs partitions de Voronoï peuvent être effectuées. Dans le cas du procédé LBM, le lit de poudre et le substrat sont donc partitionnés séparément à cause des différentes tailles de grains les caractérisant mais aussi puisqu'il n'y a pas de continuité entre ces deux milieux. Les valeurs des diamètres moyens des cellules de Voronoï sont déterminées grâce au diamètre de grains équivalent moyen mesuré expérimentalement dans le substrat et au diamètre moyen des particules de poudre (*cf.* chapitre 3).

Une fois la géométrie initiale de la structure granulaire définie et dans l'optique de caractériser les grains formés, les propriétés suivantes sont attribuées aux cellules :

- Un indice, ν, permettant d'identifier chaque cellule individuellement ;
- Un numéro de grain de rattachement, n_{gr}^{ν}, potentiellement commun à plusieurs cellules dans le cas où une partition de Voronoï aurait été utilisée ;
- Une orientation cristallographique $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)_\nu$, directement liée au grain de rattachement.

En fonction de la configuration simulée, plusieurs possibilités sont envisageables pour le choix des valeurs des angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$: elles peuvent être imposées, ce qui est utile en particulier dans le cas de vérification de cas tests (*cf.* paragraphe 2.5), ou bien choisies aléatoirement tel que défini dans la section 2.3.1.1. Par ailleurs, l'orientation cristallographique peut être adaptée en fonction de la dimension du modèle (2D ou 3D). Dans le cas de modèles à deux dimensions, deux des trois angles d'Euler sont nuls afin de fixer l'axe cristallographique des grains dans la direction non modélisée.

2.3.3. Définition des règles de transition

Les règles de transition consistent à faire évoluer l'état et les caractéristiques des cellules au cours du calcul afin de modéliser les phénomènes physiques pris en compte. Ces règles se basent principalement sur les propriétés de la cellule considérée ainsi que sur celles des cellules voisines. Les règles de transition liées aux modèles de fusion, de germination et de croissance granulaire définis dans la partie 2.3.1 sont décrites ci-après, et l'algorithme des règles de transition est présenté sur la Figure 2.7.

2.3.3.1. Fusion

Une cellule ν non liquide (*i.e.* à l'état pâteux, solide ou poudre, I_ν = 1,2 ou 4 respectivement) dont la température T_ν devient supérieure à celle du liquidus T_{Liq} au cours du pas de temps, devient liquide (I_ν = 0). Lors du passage à l'état liquide, les changements suivants sont effectués pour la cellule :

- Suppression de son information cristallographique : elle n'est plus rattachée à un grain et $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)_\nu$, et n_{gr} prennent les valeurs par défaut ;

- Réinitialisation de l'enveloppe de la cellule : la cellule AC n'étant plus rattachée à une cellule de Voronoï (*i.e.* à un grain), son enveloppe est recentrée sur le centre de la cellule et son rayon devient nul (*cf.* paragraphe 2.3.1.1).

Tableau 2.2. Règles de transition liées à la fusion pour une cellule d'indice ν voisine d'une cellule d'indice μ

État initial de la cellule	Conditions de transition	État final de la cellule
I_ν = 1, 2 ou 4	$T_\nu > T_{Liq}$	$I_\nu = 0$
I_ν = 2 ou 4	$\exists\ I_\mu = 0$	$I_\nu = 1$

.

Lorsqu'une cellule devient liquide, les cellules voisines sont également amenées à changer d'état. C'est le cas des voisines initialement à l'état solide ou poudre (I_ν = 2 ou 4 respectivement) qui vont devenir pâteuses (I_ν = 1) afin de pouvoir croître (*cf.* paragraphe 2.3.3.3). Ce changement d'état permet dans le cas du procédé LBM de modéliser la croissance épitaxiale à partir des particules de poudre ou depuis les grains présents initialement dans le substrat. Ces deux règles de transition sont résumées dans le Tableau 2.2.

2.3.3.2. Germination

Au cours d'un pas de temps AC, si une cellule ν liquide ($I_\nu = 0$) dans laquelle se trouve un site de germination atteint une surfusion ΔT_ν ($\Delta T_\nu = T_{Liq} - T_\nu$) supérieure à la surfusion critique de germination ΔT_{nucl} (*cf.* paragraphe 2.3.1.3), alors le liquide se transforme en un germe solide, formant un nouveau grain (Tableau 2.3). La cellule devient alors pâteuse ($I_\nu = 1$), et un nouveau grain est créé tel que défini dans la partie 2.3.1.1. Ces cellules sont désormais capables de croitre.

Tableau 2.3. Règle de transition liée à la germination

État initial de la cellule	Conditions de transition	État final de la cellule
I_ν = 0	Présence d'un site de germination dans ν $\Delta T_\nu > \Delta T_{nucl}$	$I_\nu = 1$

2.3.3.3. Croissance d'un grain

Les cellules pâteuses ($I_\nu = 1$), c'est-à-dire les cellules ayant germé ou celles situées au niveau de l'interface solide/liquide, possèdent une enveloppe capable de s'étendre. La cinétique de croissance en pointe de dendrite est présentée dans la partie 2.3.1.4. Une fois la vitesse de croissance en pointe de dendrite connue, la modélisation de la croissance repose sur deux étapes : la capture des cellules voisines et la transmission de l'information cristallographique à la cellule capturée. Le modèle de formation de grain détaillé ci-après est basé sur les travaux de Gandin et al. [Gandin 1997], et l'algorithme de calcul est récapitulé sur la Figure 2.7.

Capture

Au cours de la croissance de l'enveloppe, l'octaèdre est amené à englober le centre d'une cellule voisine μ (Figure 2.3 (c)). Dans le cas où cette cellule est liquide (I_μ = 0), on parle de « capture ». Cette étape est cruciale dans la modélisation de la croissance granulaire puisqu'elle permet la transmission de l'information cristallographique aux cellules situées dans le voisinage, permettant ainsi de modéliser la formation d'un grain. En effet, l'ensemble des cellules ayant la même

orientation cristallographique et le même indice de grain constitue un grain. Pour être candidate à la capture au cours d'un pas de temps AC δt, la cellule μ doit remplir trois conditions :

- être liquide au début du pas de temps AC (${I_\mu}^t$ = 0) ;
- avoir une température inférieure à celle de liquidus après δt ($T_\mu^{t+\delta t} < T_{Liq}$) ;
- avoir au moins une cellule voisine ν à l'état pâteux ($I_\nu = 1$).

Si ces conditions sont remplies, la position du centre de la cellule μ, C_μ à la fin du pas de temps AC est étudiée vis-à-vis de la position de l'enveloppe de sa voisine ν (Figure 2.3 (c)). Pour cela, les coordonnées de C_μ sont étudiées dans le repère octaédrique local associé à l'enveloppe de ν en utilisant la matrice de rotation de Bunge [Bunge 1982], qui permet le passage du repère global au repère de l'octaèdre. Elle est définie telle que :

$$g_\nu = \begin{pmatrix} cos\varphi_1.\cos\varphi_2 - sin\varphi_1.\sin\varphi_2.cos\phi & sin\varphi_1.\cos\varphi_2 + cos\varphi_1.\sin\varphi_2.cos\phi & sin\varphi_2.sin\phi \\ -cos\varphi_1.\sin\varphi_2 - sin\varphi_1.\cos\varphi_2.cos\phi & -sin\varphi_1.\sin\varphi_2 + cos\varphi_1.\cos\varphi_2.cos\phi & \cos\varphi_2.sin\phi \\ \sin\varphi_1.sin\phi & -\cos\varphi_1.sin\phi & cos\phi \end{pmatrix} \quad (34)$$

où $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ sont les trois angles d'Euler associés au grain auquel est rattachée l'enveloppe. Les coordonnées de C_μ dans le repère de l'enveloppe sont alors calculées comme suit :

$$\begin{pmatrix} x_\mu^\nu \\ y_\mu^\nu \\ z_\mu^\nu \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x(C_\mu) \\ y(C_\mu) \\ z(C_\mu) \end{pmatrix}_{B_\nu} = g_\nu \begin{pmatrix} x(C_\mu) - x(C_\nu^{en}) \\ y(C_\mu) - y(C_\nu^{en}) \\ z(C_\mu) - z(C_\nu^{en}) \end{pmatrix} \quad (35)$$

avec C_ν^{en} le centre de l'enveloppe de la cellule ν et B_ν la base associée à cette enveloppe. Une fois les coordonnées locales connues, la condition pour que C_μ ait été englobé au cours du pas de temps est donnée par la relation suivante :

$$|x_\mu^\nu| + |y_\mu^\nu| + |z_\mu^\nu| \leq R_\nu^{t+\delta t} \quad (36)$$

Les conditions de capture sont résumées dans le Tableau 2.4. Dans le cas où la cellule aurait été capturée par plusieurs de ses voisines, nous conservons en tant que cellule capturante celle qui capture en 1er la cellule.

Tableau 2.4. Règles de transition liées à la croissance d'une cellule d'indice v voisine d'une cellule d'indice μ et à la capture de cette dernière

Etat initial de la cellule	Conditions de transition	Etat final de la cellule
I_μ = 0	$T_\mu^{t+\delta t} < T_{Liq}$ $\exists\ I_\nu = 1$ tel que $\lvert x_\mu^\nu\rvert + \lvert y_\mu^\nu\rvert + \lvert z_\mu^\nu\rvert \leq R_\nu^{t+\delta t}$	$I_\mu = 1$
I_ν = 1	$\nexists$ voisin μ tel que I_μ = 0	I_ν = 2

Transmission des caractéristiques du grain

Une fois capturée, la cellule initialement liquide devient une cellule capable de croître appartenant au même grain que la cellule capturante (avec le même indice de grain). Par conséquent, les changements suivants sont effectués :

$$I_\mu = 1 \tag{37}$$

$$(\varphi_1, \phi, \varphi_2)_\mu = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)_\nu \tag{38}$$

$$n^\mu{}_{gr} = n^\nu{}_{gr} \tag{39}$$

Par ailleurs, afin que la cellule puisse à son tour contribuer à la croissance du grain, une enveloppe lui est attribuée. La création d'une enveloppe dans le cas d'une cellule capturée diffère de celle d'une cellule ayant germé (*cf.* paragraphe 2.3.3.2). Les principales étapes de construction de l'enveloppe sont illustrées sur la Figure 2.6 et détaillées ci-après :

a) Identification de la face capturante de l'octaèdre, F_{cap}, en comparant les signes des coordonnées de C_μ dans la base B_ν avec ceux des octants de l'octaèdre.

b) Identification de S_A, sommet de l'enveloppe le plus proche de C_μ. Pour cela, considérant $\overrightarrow{n^{cap}}$ la normale à F_{cap} et $S_i(_{i=\,l,m,n})$ ses sommets, le poids de chacun des trois sommets est calculé de la façon suivante :

$$\begin{cases} (\overrightarrow{S_m C_\mu} \wedge \overrightarrow{S_n C_\mu}).\overrightarrow{n^{cap}} = B_l \\ (\overrightarrow{S_n C_\mu} \wedge \overrightarrow{S_l C_\mu}).\overrightarrow{n^{cap}} = B_m \\ (\overrightarrow{S_l C_\mu} \wedge \overrightarrow{S_m C_\mu}).\overrightarrow{n^{cap}} = B_n \end{cases} \tag{40}$$

La plus grande valeur de B_i correspond au sommet le plus proche. Dans la suite du développement, ce sommet sera noté S_A (Figure 2.6 (a)).

c) Calcul des coordonnées de H_μ, projeté orthogonal de C_μ sur F_{cap}

$$\overrightarrow{C_\nu^{en} H_\mu} = \frac{B_l}{B_T}\overrightarrow{C_\nu^{en} S_l} + \frac{B_m}{B_T}\overrightarrow{C_\nu^{en} S_m} + \frac{B_n}{B_T}\overrightarrow{C_\nu^{en} S_n} \tag{41}$$

où $B_T = B_l + B_m + B_n$.

d) Calcul du rayon initial de l'enveloppe de la cellule μ, $R_\mu^{t_0}$, donné par la relation :

$$R_\mu^{t0} = \frac{1}{\sqrt{6}}\max(L_I, L_J) \tag{42}$$

avec L_I et L_J calculées comme suit :

$$\begin{cases} L_I = \min(IS_A, \sqrt{3}l_{CA}) + \min(IS_B, \sqrt{3}l_{CA}) \\ L_J = \min(JS_A, \sqrt{3}l_{CA}) + \min(JS_C, \sqrt{3}l_{CA}) \end{cases} \tag{43}$$

avec l_{CA} la longueur d'une cellule et I et J projetés orthogonaux de H_μ sur les segments $[S_A S_B]$ et $[S_A S_C]$ respectivement. Les longueurs IS_A, JS_A, IS_B et JS_C sont données par les relations suivantes :

$$\begin{cases} IS_A = \left| \overrightarrow{S_A H_\mu} . \dfrac{\overrightarrow{d_{AB}}}{\left\| \overrightarrow{d_{AB}} \right\|} \right| \\ JS_A = \left| \overrightarrow{S_A H_\mu} . \dfrac{\overrightarrow{d_{AC}}}{\left\| \overrightarrow{d_{AC}} \right\|} \right| \\ IS_B = \sqrt{2}.R_\nu^{t+\delta t} - IS_A \\ JS_C = \sqrt{2}.R_\nu^{t+\delta t} - JS_A \end{cases} \tag{44}$$

où $\overrightarrow{d_{AB}}$ et $\overrightarrow{d_{AC}}$ sont les vecteurs directeurs des segments $[S_A S_B]$ et $[S_A S_C]$ (Figure 2.6 (a)) et $R_\nu^{t+\delta t}$ le rayon de la cellule capturante ν.

e) Enfin, le centre de la nouvelle enveloppe C_μ^{en} est positionné et converti dans le système de coordonnées globales (Figure 2.6 (b)) :

$$\overrightarrow{C_\nu^{en} C_\mu^{en}} = (R_\nu^{t+\delta t} - R_\mu^0) \frac{\overrightarrow{C_\nu^{en} S_A}}{\left\| \overrightarrow{C_\nu^{en} S_A} \right\|} \tag{45}$$

$$\begin{pmatrix} x_{C_\mu^{en}} \\ y_{C_\mu^{en}} \\ z_{C_\mu^{en}} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x(C_\mu^{en}) \\ y(C_\mu^{en}) \\ z(C_\mu^{en}) \end{pmatrix} = {g_\nu}^{-1}. \begin{pmatrix} x^\nu_{C_\mu^{en}} \\ y^\nu_{C_\mu^{en}} \\ z^\nu_{C_\mu^{en}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x(C_\nu^{en}) \\ y(C_\nu^{en}) \\ z(C_\nu^{en}) \end{pmatrix} \tag{46}$$

où ${g_\nu}^{-1}$ est la matrice de rotation inverse, c'est-à-dire la transposée de g_ν.

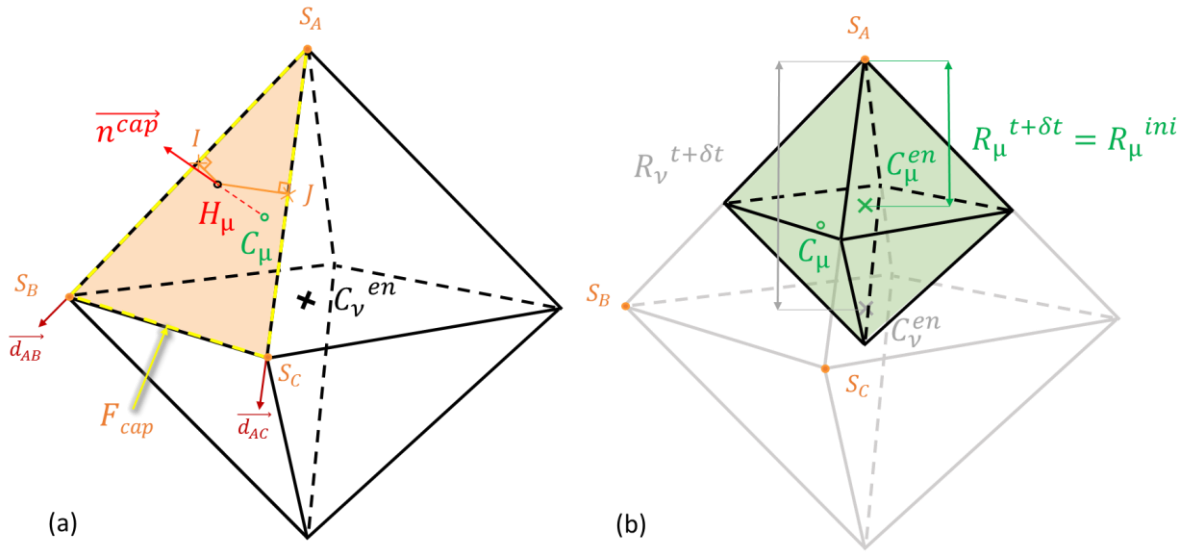


Figure 2.6. Représentation schématique : (a) de l'arrêt de croissance de l'enveloppe de la cellule ν suite à la capture de la cellule voisine μ et (b) de la formation de l'enveloppe de la cellule μ après capture par la cellule ν

Une cellule pâteuse arrête de croître dans deux configurations :

- Elle n'a plus de voisin liquide et ne peut donc plus transmettre son orientation cristallographique ;
- Le rayon de son enveloppe atteint une valeur critique fixée à deux fois la distance du voisin le plus éloigné soit une longueur de $2\sqrt{3}l_{CA}$, où l_{CA} est la longueur d'une cellule.

Dans ces deux cas, son état évolue de pâteux à solide (Tableau 2.4). Par ailleurs, son enveloppe est repositionnée au centre de la cellule et son rayon est de nouveau nul.

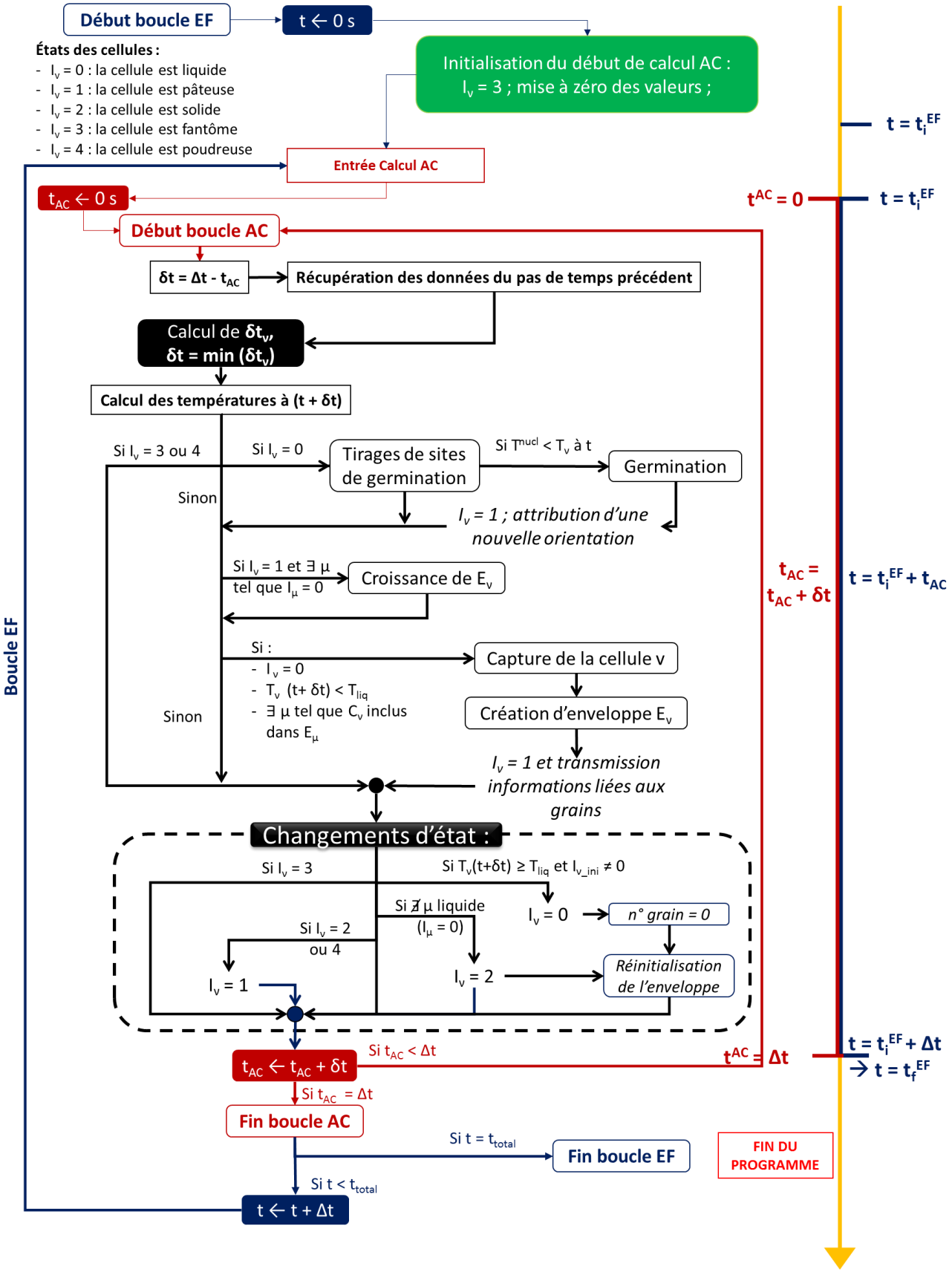


Figure 2.7. Algorithme de résolution du modèle Automate Cellulaire

2.4. Couplage EF-AC

Comme expliqué en début de ce chapitre, deux modèles sont définis puis couplés (faiblement) dans la méthodologie CAFE : un modèle thermique utilisant la méthode des éléments finis, et un modèle de formation des grains basé sur les automates cellulaires. Dans cette section sont présentés la transmission des températures calculées par la simulation EF vers les cellules AC, le calcul du micro pas de temps ainsi que les données calculées lors d'un calcul couplé CAFE.

2.4.1. Transfert EF-AC

Le transfert des températures vers les cellules AC est une étape cruciale du modèle CAFE puisque le calcul de formation des grains ne peut s'effectuer sans la connaissance des températures (*cf.* paragraphe 2.3). Le transfert des températures calculées par EF aux cellules AC se décompose en deux étapes principales : la mise en relation du maillage éléments finis avec la grille automates cellulaires, et l'interpolation des températures sur les cellules.

2.4.1.1. Superposition des domaines

Le maillage utilisé dans le modèle thermique est défini indépendamment de la grille d'automates cellulaires employée dans le calcul de solidification. Néanmoins, la grille AC doit être incluse dans le maillage EF de façon à ce que chacune des cellules de la grille soit rattachée à un élément fini.

Afin de relier les domaines EF et AC, une boucle sur les éléments finis est effectuée et permet de repérer l'ensemble des cellules appartenant à chaque élément, c'est-à-dire toutes celles dont le centre est inclus dans un élément EF. Le numéro de l'EF associé est ensuite stocké par la cellule et servira pour l'interpolation des températures.

2.4.1.2. Interpolation des températures

Les températures obtenues à l'issue du calcul thermique ont été calculées au niveau des nœuds du maillage éléments finis. Il est donc nécessaire d'interpoler ces températures nodales au niveau des cellules de la grille AC. Le maillage EF ainsi que la grille AC étant fixes au cours du calcul, le rattachement des cellules aux éléments finis est effectué une seule fois en début de calcul. L'étape d'interpolation des températures se fait ensuite à chaque début de pas de temps thermique. Le choix a été fait dans cette étude d'interpoler les températures au niveau du centre des cellules et non des pointes de dendrites. Nous avons considéré que les cellules étant de très petites dimensions, les variations de température au sein même d'une cellule pouvaient être négligées. Dans le cas d'une cellule ν rattachée à un élément contenant n noeuds, la température $T_{\nu}^{(t)}$ du centre de la cellule C_ν est donnée par la relation suivante :

$$T_{\nu}^{t} = \sum_{i=1}^{n} N_n(C_\nu) T_n^t \tag{47}$$

où T_n^t est la température au temps t du $n^{\text{ième}}$ nœud de l'élément, et $N_n(C_\nu)$ la fonction de forme du nœud n.

2.4.1.3. Transfert des « états » EF

Nous avons vu en partie 2.2.2 que différents milieux sont représentés dans le calcul EF (poudre, solide dense, air). Afin de prendre en compte la formation de la zone de dénudation dans le calcul AC, et donc la transformation d'éléments finis poudre à l'état air, le milieu de rattachement de chaque EF est transmis au calcul AC sous forme d'un chiffre (équivalent aux indices d'états attribués aux AC). Une cellule initialement à l'état poudre (I_ν = 4) appartenant à un élément fini devenu air

évolue alors vers l'état fantôme (I_ν = 3). Tout comme lors du passage d'une cellule de l'état solide à l'état liquide (*cf*. paragraphe 2.3.3.1), le passage à l'état fantôme s'accompagne par la suppression de son information cristallographique ainsi que par la réinitialisation de l'enveloppe de la cellule.

2.4.1.4. Micro pas de temps

Deux pas de temps différents sont définis dans le modèle CAFE : Δt, pas de temps macroscopique utilisé pour le calcul thermique à l'échelle de l'élément fini, et δt, pas de temps microscopique employé pour le calcul de formation des grains. La valeur du pas de temps macroscopique est définie par l'EF et choisie suite à une étude de convergence effectuée sur le calcul thermique élément fini. Celle de δt au contraire varie constamment et doit être suffisamment petite afin de correctement modéliser les phénomènes physiques considérés. Pour cela un micro pas de temps est calculé pour les différents types de cellules :

- *Cas d'une cellule pâteuse* (I_ν = 1) : au cours d'un pas de temps AC, il est important de limiter la croissance de l'enveloppe de la cellule à ses voisins proches afin d'empêcher une propagation trop rapide et donc non réaliste du grain. Par conséquent, le micro pas de temps retenu pour l'ensemble des cellules pâteuses est donné par la relation suivante :

$$\delta t_1 = \frac{l_{CA}}{v_{max}(\Delta T_\nu)} \tag{48}$$

  où l_{CA} correspond à la longueur d'une cellule, et $v_{max}(\Delta T_\nu)$ à la vitesse de croissance dendritique maximale atteinte parmi toutes les cellules capables de croître.
- *Cas des cellules devenant liquide au cours du pas de temps :* les cellules liquides étant des candidates à la capture, il est judicieux de faire en sorte que la fin du pas de temps corresponde au moment du passage de la cellule à l'état liquide. Le micro pas de temps retenu pour ces cellules est calculé comme suit :

$$\delta t_2 = \min\left(\Delta t\,;\ \frac{T_{Liq} - \left(T_{EF}^{i}\right)_\nu}{\left(T_{EF}^{f}\right)_\nu - \left(T_{EF}^{i}\right)_\nu} - t_{AC}^{i}\right) \tag{49}$$

  avec $\left(T_{EF}^{i}\right)_\nu$ et $\left(T_{EF}^{f}\right)_\nu$ les températures de la cellule ν calculées en début et fin de pas de temps EF respectivement, et t_{AC}^{i} le temps de calcul AC courant ($\sum \delta t$).
- *Cas des cellules restantes :* pour les cellules fantômes (I_ν = 3), les cellules à l'état solide ou poudre (I_ν = 2 ou 4) ne dépassant pas la température de liquidus, ainsi que pour les cellules restant liquides (I_ν = 0), le pas de temps le plus grand possible peut être choisi. Dans ce cas, le micro pas de temps est identique pour toutes les cellules et donné par la relation suivante :

$$\delta t_3 = \Delta t - t_{AC}^{i} \tag{50}$$

Une fois le micro pas de temps déterminé pour chaque type de cellule, la valeur minimale est retenue :

$$\delta t = \min(\delta t_1, \delta t_2, \delta t_3) \tag{51}$$

Le pas de temps macroscopique est donc divisé en pas de temps microscopiques, ce qui signifie que le calcul de formation des grains est effectué plusieurs fois entre deux pas de temps thermiques.

2.4.2. Données de sortie

Une fois le calcul CAFE effectué, les résultats obtenus sont sauvegardés tous les Δt et sortis au format *Visualization ToolKit* (VTK) ce qui permet de les visualiser facilement par la suite *via* le logiciel Paraview. Dans les fichiers VTK sont stockés pour chaque cellule : son état, le numéro de grain de rattachement, les trois angles d'Euler ainsi que la température obtenue après interpolation.

2.5. Validation du modèle numérique sur cas test de la littérature

Une fois la mise en place du modèle CAFE effectuée, il est important de réaliser une étape de validation du modèle avant de l'appliquer à une configuration de fabrication additive. Cette étape consiste à reproduire des cas tests identifiés dans la littérature dans le but de valider les différentes étapes définies dans l'algorithme de formation des grains. Les configurations des trois cas tests utilisées pour l'étape de validation sont détaillées dans le Tableau 2.5. Les champs de températures imposés dans chacune des études ont été définis par éléments finis puis transmis au modèle AC afin d'effectuer un calcul couplé CAFE.

Tableau 2.5. Résumé des conditions appliquées dans les cas tests étudiés

Configurations	Conditions thermiques	Informations cristallographiques
Germination et croissance d'un monocristal 2D [Gandin 1996]	$G = 250\ K.m^{-1}$ Orienté verticalement $\dot{T} = -0{,}1\ K.s^{-1}$	$\phi = 30°\ ;\ \varphi_1 = \varphi_2 = 0°$
Germination et croissance d'un monocristal 3D [Gandin 1997]		$(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = (20°, 20°, 20°)$
Croissance épitaxiale à partir de germes d'orientations cristallines aléatoires [Rai 2016]		$(\varphi_1, \phi, \varphi_2)_v$, choisis aléatoirement

Avant toute chose, il est important de préciser que les configurations thermiques utilisées dans ces cas tests sont très éloignées de celles habituellement observées au cours des procédés de soudage ou de fabrication additive. En effet, dans le cas de ces procédés, le taux de croissance et le gradient ne sont pas constants au cours du temps et les valeurs de gradients obtenues sont plutôt de l'ordre du million de $K.m^{-1}$. La croissance en pointe de dendrite sera donc beaucoup plus rapide, marquant davantage la compétition de croissance.

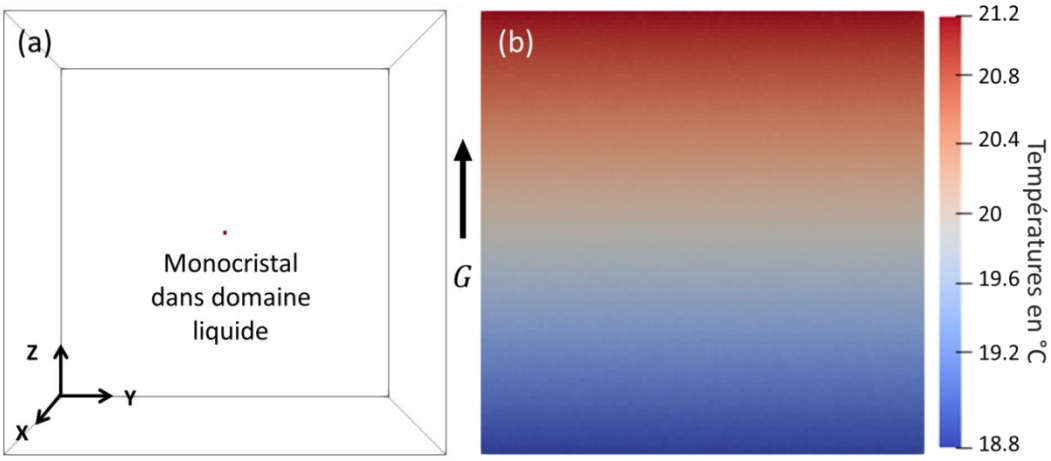


Figure 2.8. (a) Monocristal centré dans la grille cubique AC et (b) champ de températures après refroidissement interpolé sur la grille AC

2.5.1. Germination et croissance d'un monocristal

Le premier cas test retenu pour l'étape de validation a été présenté en 1996 par Gandin et al. en 2D [Gandin 1996], puis en 1997 en 3D [Gandin 1997]. Il consiste à simuler la croissance d'un monocristal positionné au centre d'un volume liquide de forme cubique soumis à un gradient thermique uniforme de 250 K.m^{-1} dans la direction verticale et à un taux de refroidissement constant de 0,1 K.s^{-1} (Figure 2.8). Pour ces cas test, le site de germination placé au centre du domaine possède une surfusion de germination fixée à 2K, et le modèle de croissance retenu est donné par la loi $v = \mathrm{A}\Delta\mathrm{T}^2$ avec $A = 10^{-4} m.s^{-1}K^{-1}$.

2.5.1.1. Monocristal 2D

La modélisation 2D [Gandin 1996] décrit la germination puis la croissance de l'enveloppe d'un monocristal 2D positionné au centre d'une grille carrée de 10 x 10 mm^2 et dont les directions <01> sont désorientées de 30° par rapport à la direction du gradient thermique (axe vertical). Ce cas test permet d'étudier la croissance des directions <01> correspondant aux bras dendritiques primaires en fonction de l'orientation du cristal par rapport à la direction du gradient thermique.

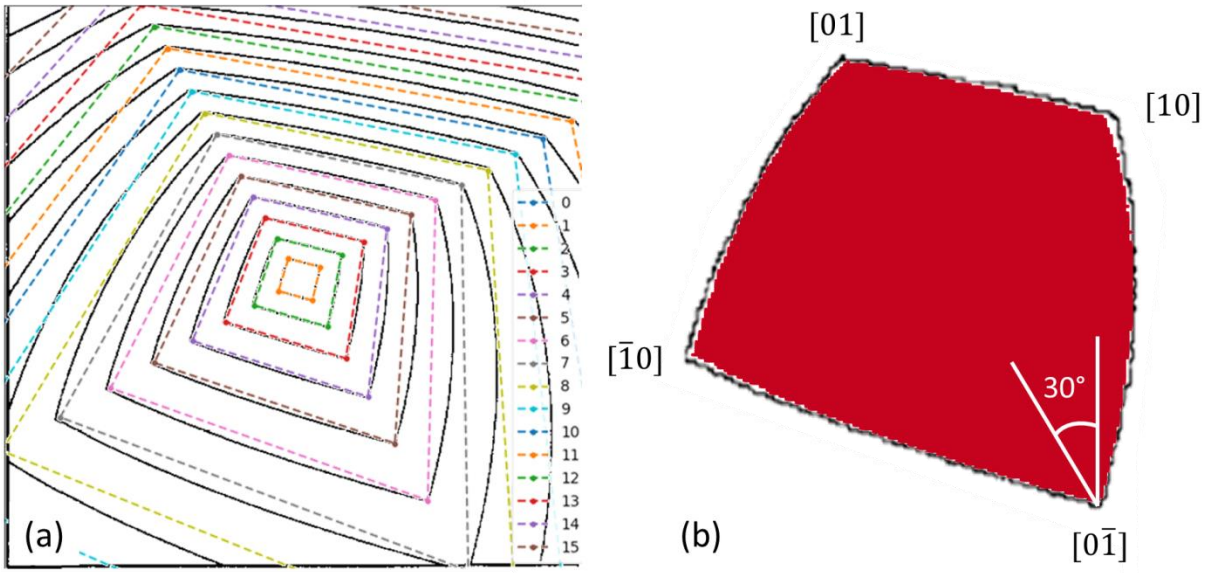


Figure 2.9. Comparaison des enveloppes d'un monocristal (a) calculées analytiquement par Gandin et al. [Gandin 1996] (traits pleins) et en utilisant l'algorithme AC développé dans cette thèse (traits pointillés) et (b) calculée analytiquement (contour noir, correspondant à la solution analytique reprogrammée dans la thèse) et obtenue par simulation CAFE (géométrie représentée en rouge)

L'évolution de l'enveloppe du grain délimitée par ses sommets correspondant aux extrémités des quatre bras dendritiques primaires orientés dans les directions <01> du cristal est calculée analytiquement en reprenant les résultats de Gandin et al. [Gandin 1996], et numériquement en utilisant l'algorithme de germination et croissance développé dans ce chapitre. D'autre part, un calcul CAFE est également réalisé avec notre modèle à partir des conditions thermiques définies dans le cas test.

La Figure 2.9 (a) montre l'évolution de l'enveloppe du monocristal calculée toutes les secondes analytiquement (traits pleins) et celle calculée avec le modèle AC défini dans le cadre de cette thèse (traits pointillés). Nous pouvons voir que les résultats sont identiques. Sur la Figure 2.9 (b) sont superposées les enveloppes de grains à un instant donné obtenues analytiquement (contour plein noir) et par simulation CAFE (géométrie représentée en rouge).

Bien que les résultats analytiques et de simulation soient proches, nous pouvons tout de même remarquer des différences au niveau de la position des sommets représentant les directions $[0\bar{1}]$ et $[10]$. En effet ces sommets sont légèrement plus hauts (de 2 µm), et plus centrés (de 1 µm et 3 µm dans les directions $[10]$ et $[0\bar{1}]$ respectivement) dans la simulation CAFE que dans les résultats analytiques. Cette observation peut s'expliquer par le fait que la vitesse de croissance au sein d'une cellule est calculée par rapport à la surfusion en son centre et non par rapport aux surfusions au niveau des pointes de dendrites. La vitesse de croissance est donc identique pour les quatre directions <01>. Par conséquent, cette vitesse de croissance est sous-estimée pour les directions <$0\bar{1}$> pour lesquelles la surfusion est plus importante que celle au centre de la cellule, et surestimée pour les directions <01>, pour lesquelles la surfusion en pointe de dendrite est inférieure à celle au centre de la cellule.

La réduction de la taille des cellules ainsi que la diminution du micro pas de temps sont deux solutions proposées pour réduire l'écart observé entre enveloppe analytique et simulée. Une autre proposition faite par Carozzani dans sa thèse consiste à interpoler la température au niveau des pointes de dendrites [Carozzani 2012]. Cette méthode nécessite de calculer les températures et extensions des rayons de chaque sommet de l'octaèdre qui n'est alors plus régulier.

2.5.1.2. Monocristal 3D

Une fois la validation du cas test 2D effectuée, l'étude du monocristal a été faite en 3D en se basant cette fois sur les travaux réalisés en 1997 par Gandin et Rappaz [Gandin 1997]. Le monocristal est situé au centre d'une grille d'AC cubique et soumis aux mêmes conditions thermiques que précédemment (Figure 2.8). Les trois angles d'Euler sont fixés à 20° dans cette étude.

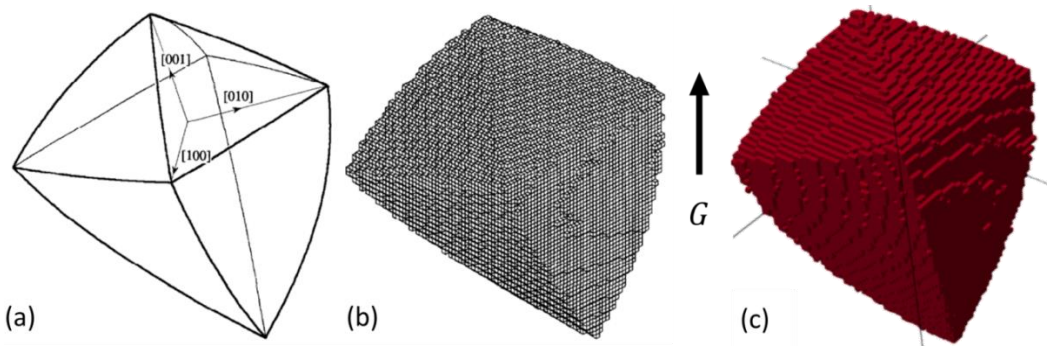


Figure 2.10. Résultats de croissance d'un monocristal obtenu par Gandin et Rappaz [Gandin 1997] (a) analytiquement et (b) numériquement, et (c) obtenu numériquement en utilisant le modèle CAFE présenté dans cette étude

L'enveloppe granulaire 3D que nous avons obtenue par notre modélisation CAFE après refroidissement (Figure 2.10 (c)) est similaire à celles calculées analytiquement et numériquement par Gandin et Rappaz dans le cas test (Figure 2.10 (a et b)). Comme dans le cas 2D nous pouvons observer que la croissance du grain est plus rapide dans la direction opposée au gradient thermique (*i.e.* –Z) du fait d'une valeur de surfusion plus élevée dans cette direction. Cette observation confirme la capacité de l'algorithme à prendre en compte l'influence de l'orientation cristallographique et du gradient thermique sur la croissance des grains. Les étapes définies dans l'algorithme de croissance et de capture peuvent donc être considérées valides.

2.5.2. Croissance compétitive

La troisième étude identifiée dans la littérature pour servir de cas test a été effectuée par les chercheurs de l'Université de Erlangen [Rai 2016]. Elle vise à étudier la solidification de germes étant

aléatoirement orientés et positionnés dans la partie basse d'une géométrie rectangulaire. Tout comme dans le cas des deux études de la croissance d'un monocristal précédemment citées, le domaine étudié est soumis à un gradient thermique vertical de 250 K.m^{-1} et à un taux de refroidissement de 0,1 K.s^{-1}.

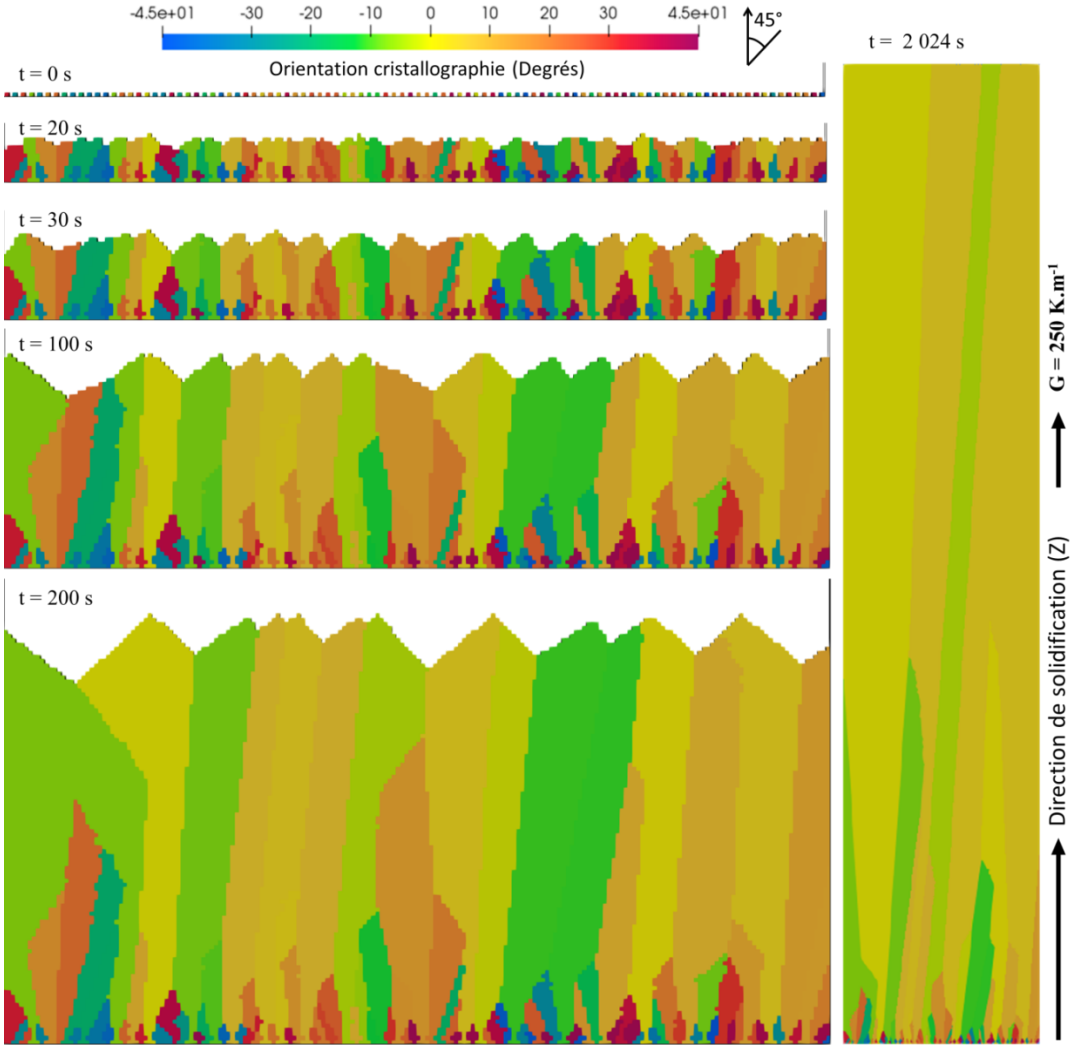


Figure 2.11. Evolution des grains formés à partir des germes générés sur la partie inférieure [Rai 2016]

Avant refroidissement du système, une ligne de germes d'orientations cristallographiques aléatoires est générée au niveau de la partie inférieure de la grille AC, toutes les 2 cellules (100 germes pour une largeur de 200 cellules). L'évolution des grains au cours du refroidissement est visible sur la Figure 2.11. Nous pouvons remarquer que les grains faiblement désorientés par rapport au gradient thermique (ceux dont l'orientation cristallographique, caractérisée par l'angle entre les directions <01> du grain et l'axe vertical, est proche de zéro) bloquent progressivement la progression de ceux plus fortement désorientés (représentés en couleurs sombres). En effet nous pouvons observer que dès la sixième rangée de cellules dans l'axe vertical, plus de 20 grains sur les 100 initialement présents ont terminé leur croissance (soit plus d'un cinquième), interrompus par la progression des grains adjacents. En conséquence, le nombre de grains continuant de croître en fin de solidification (*i.e.* au niveau du haut de la Figure 2.11, t = 2024 s) est largement inférieur au nombre de grains présents initialement dans la pièce (diminution de 96 %). La structure résultante est alors composée de grands grains colonnaires quasiment alignés avec la direction du gradient thermique. $\dot{T}$ et G étant bien plus faibles dans ce cas test que dans le cas des procédés de fabrication additive ou de soudage,

il faut s'attendre à ce que la compétition de croissance entre les grains se déroule encore plus rapidement dans le cas de simulation de solidification au cours de ces procédés.

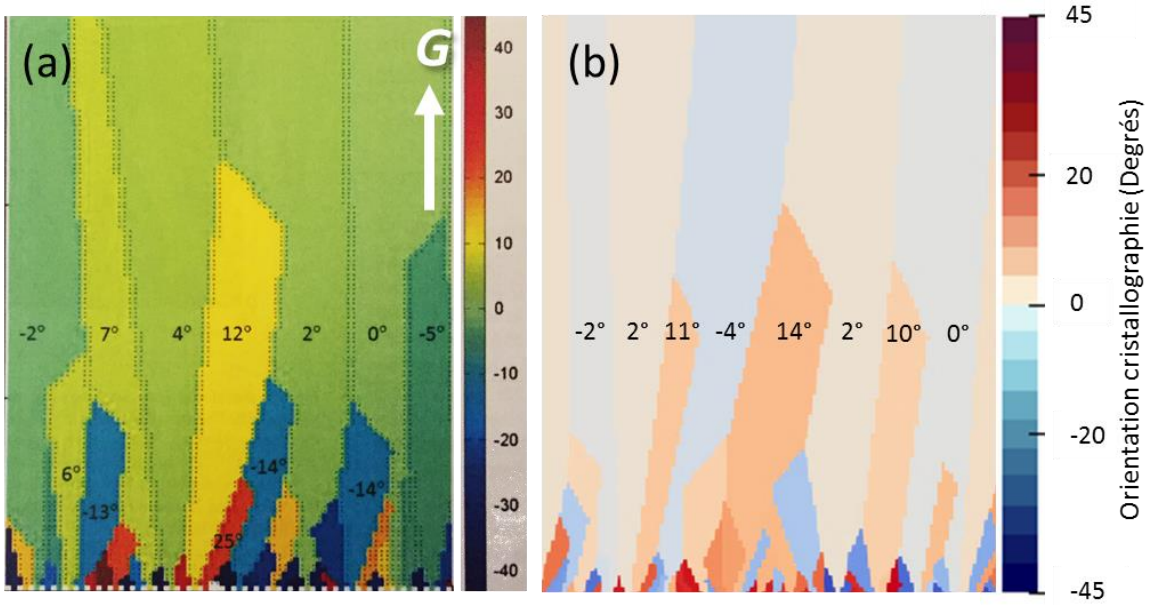


Figure 2.12. Résultats numériques montrant la compétition de croissance entre des cristaux, obtenus (a) par Rai et al. [Rai 2016] et obtenus (b) en utilisant le modèle CAFE défini dans la thèse

Les résultats obtenus avec le modèle CAFE défini dans cette thèse sont conformes à ceux calculés par Rai et al. (Figure 2.12). En effet, bien que les résultats ne soient pas parfaitement identiques à cause du tirage aléatoire initial des orientations, l'arrêt de la croissance des grains fortement désorientés par rapport au gradient thermique est retrouvé, conduisant à la diminution significative du nombre de grains continuant de croître en fin de solidification. De ce fait, ces résultats montrent la capacité de notre modèle à prédire la croissance compétitive des grains.

2.5.3. Conclusion

Suite aux comparaisons effectuées avec les cas test identifiés dans la littérature, la capacité du modèle CAFE à prédire la croissance granulaire a été démontrée. Par ailleurs, cette étape de validation numérique a permis de tester le bon fonctionnement du chainage mis en place entre éléments finis et automates cellulaires. Dès lors, les calculs CAFE tels que définis dans le cadre de ces travaux de thèse peuvent être effectués sur des configurations LBM.

2.6. Conclusion du chapitre

Les modélisations du procédé et de la solidification ont été définies et présentées dans ce chapitre, puis leur couplage a été mis en place et détaillé afin de construire le modèle CAFE 3D. Après sa construction, une étape de validation du modèle sur des cas test issus de la littérature a été réalisée permettant de valider le couplage et de démontrer la capacité du modèle à simuler la formation des structures de grains au cours de la solidification. Néanmoins, les conditions thermiques imposées aux domaines étudiés au cours des cas test sont particulièrement éloignées des conditions obtenues au cours des procédés de FA ou de soudage. Il est donc nécessaire de tester le modèle sur des configurations plus physiques. Pour atteindre cet objectif, des essais instrumentés de fabrication d'éprouvettes par LBM vont être menés. Ces essais permettront à la fois d'étudier les conditions thermiques propres à ce procédé en fonction des paramètres procédés utilisés, et d'observer et d'analyser les structures de grain obtenues. Ces travaux sont présentés dans le chapitre suivant.

Chapitre 3 Étude expérimentale

3.1. Dispositifs expérimentaux 77
3.1.1. Banc d'essai instrumenté LBM 77
3.1.2. Machine industrielle SLM 79
3.1.3. Bilan des caractéristiques des dispositifs 80
3.2. Matériaux et poudres étudiés 80
3.3. Fabrication des spécimens 81
3.3.1. Fabrication des éprouvettes monocouches 81
3.3.2. Fabrication des éprouvettes multicouches 85
3.4. Techniques de caractérisation des échantillons 87
3.4.1. Préparation des échantillons 87
3.4.2. Microscopie optique 88
3.4.3. Microscopie électronique à balayage 88
3.5. Etude des zones fondues 89
3.5.1. Dimensions et géométrie du bain de fusion 90
3.5.2. Influence des paramètres opératoires 95
3.6. Etude des structures de grain formées 99
3.6.1. Résultats obtenus 99
3.6.2. Analyses et discussion 110
3.6.3. Conclusion 113

Cette troisième partie introduit l'aspect expérimental des travaux de thèse. De nombreux phénomènes physiques interviennent au cours de la fabrication d'une pièce par procédé LBM : l'interaction laser-matière, la thermique des échanges, la mécanique des fluides au niveau du bain, ou encore les mécanismes régissant la solidification. Cette étude expérimentale a donc pour principal objectif d'appréhender la physique du procédé ainsi que l'influence de certains paramètres opératoires sur les phénomènes physiques observés. Deux campagnes d'essais sont réalisées pour cela : la première sur un banc d'essai académique, permettant l'instrumentation du procédé et ainsi l'étude de son comportement *in-situ,* la deuxième sur une machine industrielle. L'originalité des essais réalisés sur le banc d'essai instrumenté repose sur le fait que nous nous intéressons à la confection de monocordons fabriqués sur lit de poudre, ce qui permet d'étudier la physique du procédé de la toute première couche obtenue. Les essais effectués sur machine industrielle quant à eux se rapprochent des conditions de fabrication de pièces industrielles en cumulant des cordons sur de nombreuses couches, permettant l'étude de l'effet des cycles de fusion-solidification successifs sur la pièce fabriquée.

Les résultats expérimentaux obtenus à l'issue des essais sont basés sur les vidéos de bain réalisées *in-situ* ainsi que sur l'analyse métallographique des échantillons effectuée *post-mortem*. En plus de l'étude de la physique du procédé, ces résultats sont utiles pour l'étape de calibration de la source thermique définie lors de la modélisation du procédé (4.1.5 et 5.1.5) ainsi que pour celle visant à comparer les structures de grains expérimentales et numériques une fois les simulations effectuées (Chapitre 4 et Chapitre 5). Dans ce chapitre sont présentés : les installations expérimentales employées pour réaliser les essais, les matériaux utilisés, le détail des deux campagnes d'essais, les techniques de caractérisation des échantillons et enfin l'étude des résultats relatifs au bain fondu et aux caractéristiques des structures de grain formées.

3.1. Dispositifs expérimentaux

Deux dispositifs expérimentaux sont utilisés au cours de cette thèse : un banc d'essai instrumenté LBM permettant d'observer la formation du bain fondu lors de la réalisation de monocordons, et une machine industrielle SLM Solution non instrumentée capable de fabriquer des pièces multicouches. Ces deux dispositifs sont présentés ci-après.

3.1.1. Banc d'essai instrumenté LBM

La première installation utilisée au cours de la thèse est rattachée à la plateforme laser du laboratoire Procédés et Ingénierie en Mécanique et Matériaux (PIMM – UMR 8006) de l'Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers (ENSAM/CNRS). C'est un banc d'essai de type LBM, composé des éléments suivants (identifiés sur la Figure 3.1) :

- **Une table de déplacement** linéaire grande vitesse (v_{max} = 1 m.s^{-1}) ;
- **Un chariot de déplacement,** solidaire de la table et permettant la fixation du substrat ;
- **Un laser Ytterbium-YAG** de 10 kW de la marque TRUMPF®, opérant à une longueur d'onde de 1030 nm et avec un diamètre focal de 150 µm. Le laser est positionné verticalement au-dessus du banc et son transport est assuré *via* une fibre optique de 200 µm de diamètre. C'est un laser continu dont la distribution spatiale est uniforme (*top hat*). Sa puissance minimale est fixée à 320 W ;
- **Un laser d'éclairage** CAVILUX® de longueur d'onde 810 nm qui permet d'éclairer la zone d'intérêt au cours des essais ;

- **Une caméra rapide** Photron UX100® assurant le suivi de la formation et de l'évolution du bain fondu. Elle est orientée à 60° par rapport à l'horizontale et équipée de deux filtres :
    - un filtre passe bas à 950 nm permettant d'atténuer la lumière du laser incident.
    - un filtre passe bande à large bande (40 nm) centré sur la longueur d'onde du laser d'éclairage.

  Cette caméra permet d'observer un champ allant jusqu'à 6 mm de longueur et 2 mm de largeur. Elle peut prendre jusqu'à 10 000 images par seconde ;
- **Une enceinte de protection** étanche solidaire du chariot une fois fixée. Elle est équipée de vitres en quartz permettant le passage des faisceaux laser (tir et éclairage) ainsi que l'observation du bain avec la caméra rapide ;
- **Une protection gazeuse** assurée par l'arrivée d'un flux d'argon directement dans l'enceinte (débit 15 $L.min^{-1}$). Cette protection permet d'assurer un taux d'oxygène inférieur à 1 000 ppm.

Ce banc instrumenté original permet la réalisation de lignes de fusion sur substrat ou de cordons monocouches (ou monocordons), ainsi que l'observation au cours des essais, grâce à la caméra rapide, de la surface du bain fondu formé et de sa dynamique. Pour cela, le charriot sur lequel est fixé le substrat, recouvert le cas échéant d'un lit de poudre, se déplace, passant sous le laser, ce qui provoque la fusion du substrat dans le cas des lignes de fusion, ou de la poudre permettant alors l'obtention d'un monocordon. Une étape de synchronisation est nécessaire afin de coordonner le passage du substrat sous l'axe du laser avec le tir. Une temporisation est également requise afin de prendre en compte la phase d'accélération du chariot et ainsi garantir une vitesse constante du substrat au moment du déclenchement du tir laser. Le protocole ainsi que sa validation sont présentés en détails dans la thèse de V. Gunenthiram [Gunenthiram 2018].

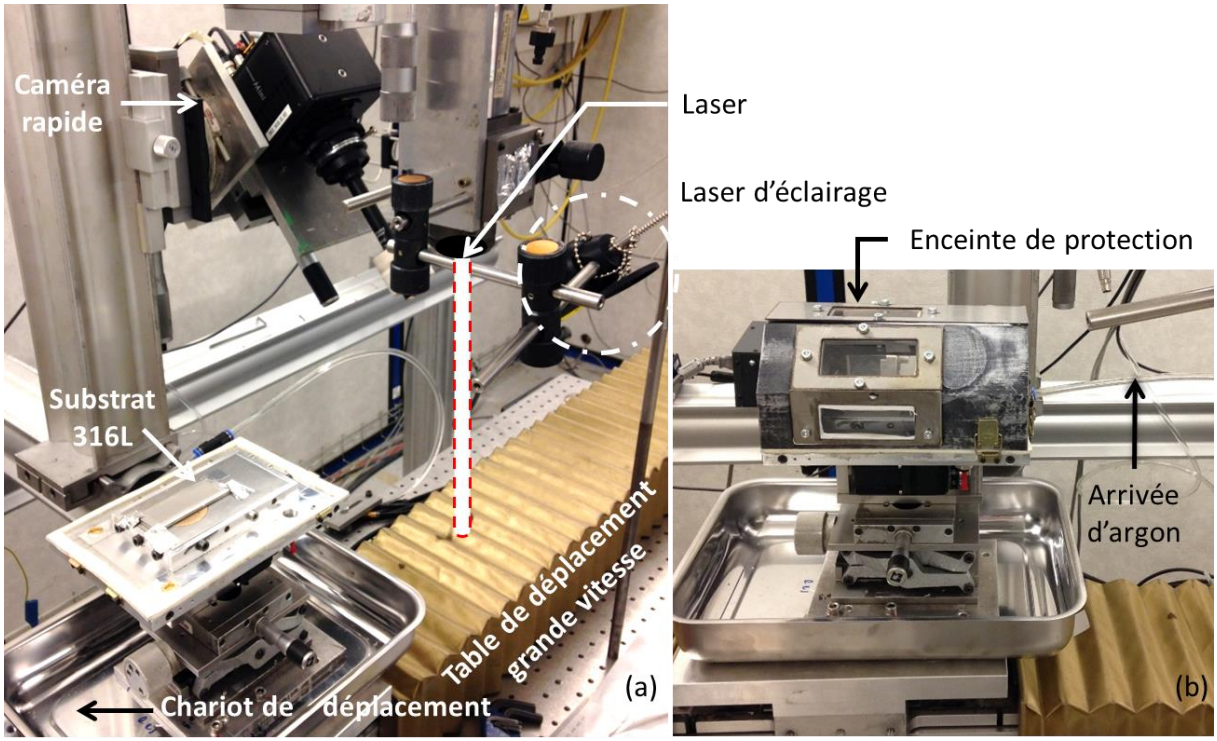


Figure 3.1. Installation de fusion laser sur lit de poudre (PIMM-ENSAM) : (a) vue globale sur laquelle le faisceau laser est représenté de façon schématique en blanc et rouge pointillé, (b) protection gazeuse de l'installation

3.1.2. Machine industrielle SLM

La seconde installation employée au cours de la thèse repose également sur la technologie de fusion laser sur lit de poudre. C'est une machine SLM Solutions® 280 HL appartenant à la Plateforme Technologique Fabrication Additive Pro3D rattachée à l'université de Montpellier (Figure 3.2). La SLM 280 étant utilisée dans l'industrie, elle présente l'avantage de pouvoir expérimenter une très large gamme de paramètres opératoires (stratégie de fabrication, paramètres laser) mais aussi celui de pouvoir réaliser des pièces multicouches. Elle est composée des éléments suivants :

- Une chambre de fabrication d'un volume de 280 × 280 × 365 mm^3 (soit un volume de 28,616 dm^3) ;
- Un laser fibre de la société IPG de diamètre focal variant entre 80 et 115 µm, opérant à une puissance maximale de 400 W et se déplaçant *via* un goniomètre ;
- Un racleur permettant à la fois d'approvisionner la chambre de fabrication en poudre mais aussi de l'étaler pour former le lit de poudre. La hauteur de la couche de poudre déposée varie entre 20 et 90 µm ;
- Un système d'inertage à l'argon de la chambre, limitant l'oxydation de la pièce en cours de fabrication. Le débit d'argon est de 5 $L.min^{-1}$.

Figure 3.2. Machine SLM 280 HL de la plateforme Pro3D [Pro3D 2020]

3.1.3. Bilan des caractéristiques des dispositifs

Les deux dispositifs expérimentaux utilisés au cours de la thèse ont été présentés séparément dans les parties précédentes. Afin de comparer les principales caractéristiques de chacun, leurs paramètres de fabrication sont résumés dans le Tableau 3.1.

Tableau 3.1. Plages d'utilisation des principaux paramètres du banc d'essai instrumenté du laboratoire PIMM et de la machine industrielle SLM 280 HL

Paramètres	Banc d'essai instrumenté	Machine SLM 280 HL
Puissance du laser (P)	320 W < P < 1 kW	P < 400 W
Vitesse de la table de déplacement (v)	200 mm.s^{-1} < v < 1 m.s^{-1}	v < 10 m.s^{-1}
Diamètre du spot laser (φ)	150 µm	80-115 µm
Hauteur de couche (t)	50 µm	20-90 µm
Gaz de protection	Argon	Argon

Le banc d'essai instrumenté du laboratoire PIMM permet la réalisation de géométries monocouches correspondant aux premières passes construites sur les plateaux dans le cas de machines industrielles. La campagne effectuée sur ce banc offre donc la possibilité d'observer l'ensemble des phénomènes intervenant au cours du procédé sur une échelle millimétrique.

3.2. Matériaux et poudres étudiés

Le matériau étudié dans le cadre de cette étude est un acier inoxydable austénitique 316L. Son utilisation courante dans les applications nucléaires ainsi que sa fréquente utilisation en fabrication additive ont motivé ce choix. Le matériau se présente sous deux états distincts : sous forme de poudre ou sous forme de pièces denses (tôle ou plateau) correspondant au substrat sur lequel seront déposées les couches de poudre.

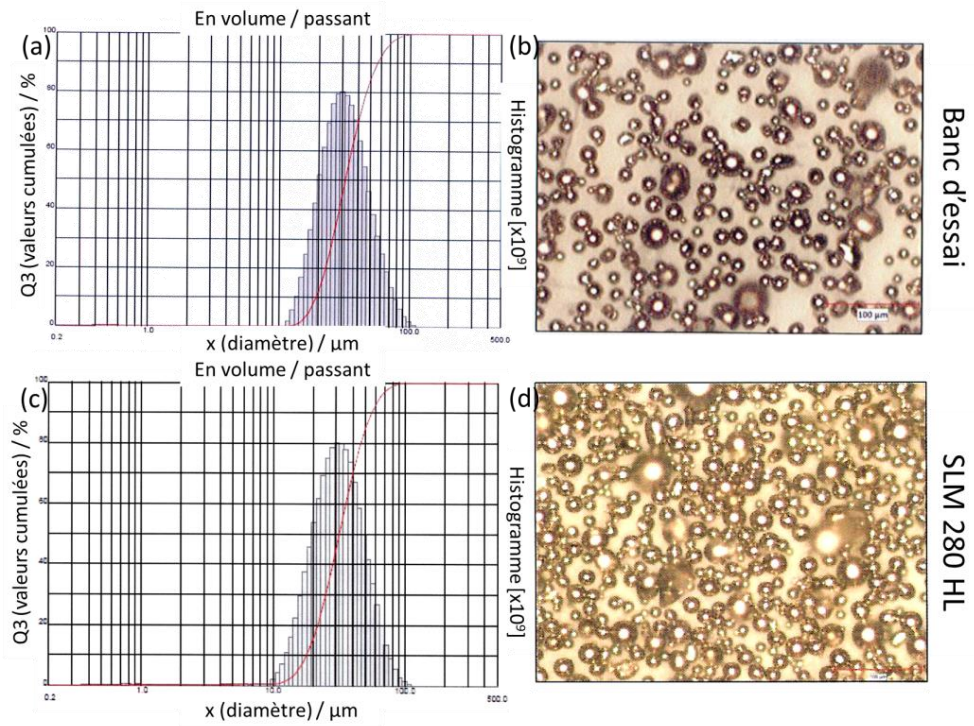


Figure 3.3. (a et c) Distributions granulométriques initiales des particules de poudre et (b et d) forme des particules de poudre à grossissement x200 pour les poudres utilisées pour : (a-b) le banc d'essai instrumenté et (c-d) la machine SLM 280 HL

Chaque installation utilisant son propre lot de poudre 316L, deux compositions légèrement différentes sont utilisées en fonction de l'installation exploitée, chacune fournie par la société SLM Solutions. La poudre utilisée pour le banc d'essai et celle servant pour la machine industrielle sont toutes deux composées de particules de forme sphérique (Figure 3.3 (b) et (d)) et leurs distributions granulométriques, présentées sur les images (a) et (c) de la Figure 3.3, sont très proches. Leur densité apparente est de 4,52 g.cm^{-3} pour celle du banc d'essai et de 4,47 g.cm^{-3} pour celle de la SLM. Les substrats disponibles dans l'installation instrumentée et dans la machine industrielle sont également deux aciers inoxydables austénitiques. Leur composition chimique ainsi que celle des deux types de poudre sont présentées dans le Tableau 3.2.

Tableau 3.2. Compositions chimiques des substrats et des poudres utilisés pour chacune des installations expérimentales (banc d'essai instrumenté et machine SLM 280 HD)

	Éléments (% wt)	**Cr**	**Ni**	**Mo**	**Mn**	**Si**	**N**	**O**	**C**	**Fe**
Banc d'essai instrumenté	Poudre 316L	17.7	12.7	2.31	0.89	0.61	0.09	0.028	0.18	Balance
	Substrat 316L	17.3	12.0	2.36	1.89	0.33	0.047	0.0025	0.024	Balance
SLM 280 HL	Poudre 316L	16.72	12.14	2.38	1.24	0.54	0.0	-	0.02	Balance
	Substrat	24.8	19.5	0.48	0.58	1.44	0.065	-	0.07	Balance

3.3. Fabrication des spécimens

Comme précisé en introduction, deux campagnes d'essais sont réalisées au cours de la thèse : la première effectuée sur le banc d'essai instrumenté du laboratoire PIMM visant à réaliser des cordons monocouches, et la deuxième menée sur la machine industrielle SLM 280 HL pour la construction de pièces multicouches (cordons superposés dans la direction de construction verticale). Pour rappel, l'objectif de ces essais est d'étudier la formation du bain fondu et des structures de grain au cours du procédé de fusion laser sur lit de poudre.

3.3.1. Fabrication des éprouvettes monocouches

3.3.1.1. Objectifs

Cette première campagne d'essais réalisée sur le banc d'essai instrumenté du laboratoire PIMM, a pour objectif d'observer la physique au cours du procédé LBM et d'appréhender l'influence des variations des paramètres procédés sur les conditions de solidification. Pour cela, nous avons choisi d'étudier une configuration élémentaire à savoir un cordon simple composé d'une seule couche. Le choix d'un unique cordon permet de s'affranchir de l'influence de la stratégie de construction (distance inter-cordon, stratégie de balayage) ainsi que de celle du cyclage thermique sur les structures de grain formées. Une étape importante de cette étude consiste à quantifier expérimentalement la structure de grains dans un plan de coupe ainsi qu'à la caractériser cristallographiquement. Ces informations nous permettent d'observer d'éventuelles caractéristiques dominantes identifiables dès la première couche fabriquée et nous renseignent sur les liens existants entre paramètres opératoires et conditions de solidification.

3.3.1.2. Géométries des éprouvettes fabriquées

Deux types de cordons différents sont réalisés au cours de cette campagne expérimentale :

- *Des lignes de fusion*, obtenues suite à un tir laser directement sur le substrat (sans poudre) ;

- *Des monocordons*, formés suite au tir laser sur une couche de poudre préalablement déposée sur le substrat.

V. Gunenthiram dans sa thèse a mis en évidence le fait que le laser interagit essentiellement avec le bain liquide et non avec les particuliers de poudre [Gunenthiram 2018], ces dernières venant alimenter le bain fondu par capillarité une fois celui-ci formé. Afin de s'affranchir de l'influence de l'apport de poudre dans le bain liquide, les lignes de fusion sont réalisées dans un premier temps. Les cordons obtenus (lignes de fusion et monocordons) mesurent 3 cm de longueur et sont fabriqués sur des substrats 316L de 3 mm d'épaisseur, 3 cm de largeur et 7,5 cm de longueur (Figure 3.7) dont la composition chimique est détaillée dans le Tableau 3.2.

3.3.1.3. Préparation de l'installation

Afin de préparer le banc d'essai, plusieurs étapes sont nécessaires. Tout d'abord dans le cas de la fabrication des monocordons, la poudre est déposée manuellement sur le substrat. Pour cela deux couches de scotch représentant une épaisseur totale de 50 microns sont collées pour former une bordure au niveau des contours de la face supérieure du substrat, puis la poudre est déposée dans le volume laissé libre au milieu du substrat et étalée grâce à une lame de rasoir. Cette méthode habituellement employée au laboratoire PIMM permet de former une couche de poudre d'approximativement 50 µm d'épaisseur. Une deuxième étape consiste à fixer le substrat sur le chariot de déplacement à l'aide de scotch métallique (Figure 3.1 (a)). L'ensemble de ces étapes est présenté de façon plus détaillée dans la thèse de V. Gunenthiram [Gunenthiram 2018].

3.3.1.4. Paramètres opératoires

Plusieurs paramétries, c'est-à-dire combinaisons de paramètres opératoires, sont testées au cours des essais monocouches. La puissance du laser P, et la vitesse de déplacement de la table v sont les deux paramètres procédés variant au cours des essais. Le choix des paramètres P et v a été fait en utilisant la densité volumique d'énergie E, souvent considérée en FA lors de la fabrication de pièces. Dans le cas de l'étude de simples cordons elle s'exprime souvent de la façon suivante [Liu 2015]:

$$E = \frac{4\,P}{\pi.v.\varphi^2} \tag{52}$$

où φ correspond au diamètre focal du faisceau laser, donné en µm. Pour un diamètre de faisceau donné, la densité d'énergie volumique est alors proportionnelle au rapport P/v. Les constructeurs de machines LBM recommandent des valeurs de puissances et de vitesses permettant de maximiser la densité relative finale de la pièce fabriquée. Les valeurs adaptées au banc d'essai instrumenté ont donc été calculées à partir de celles recommandées pour la machine SLM 280 et des caractéristiques du spot laser de la machine. La valeur calculée de densité d'énergie volumique de référence est aux alentours de 70 J.mm^{-3}.

Une fois cette valeur de référence fixée, deux combinaisons de puissance et vitesse ont été définies en s'appuyant sur le retour d'expérience des chercheurs du PIMM utilisant habituellement le banc d'essai. Trois autres paramétries ont ensuite été choisies afin d'étudier l'influence de P et v sur le bain et sur les structures de grains obtenues. Les cinq paramétries retenues sont rassemblées dans le Tableau 3.3. Les paramétries 1 et 3 correspondent à la valeur de densité d'énergie volumique de référence, obtenue avec deux combinaisons de puissance et vitesse. Les paramétries 1 et 2, ainsi que les paramétries 3 et 4, permettent d'observer l'influence d'une augmentation de la vitesse lorsque la puissance reste constante. Les paramétries 2, 4 et 5 quant à elles, permettent d'observer l'influence de l'augmentation de la puissance lorsque la vitesse reste constante.

Tableau 3.3. Détail des différentes paramétries appliquées au cours des essais monocouches

Paramétries	P (W)	v (mm.s^{-1})	φ (µm)	E (J.mm^{-3})
1ère	320	250	150	72,43
2ème	320	400	150	45,27
3ème	400	310	150	73,02
4ème	400	400	150	56,59
5ème	600	400	150	84,88

3.3.1.5. Déroulement des essais

Une fois l'installation mise en place et les paramètres opératoires définis, les essais monocouches sont effectués. Ils consistent à réaliser des lignes de fusion et des monocordons avec chacune des paramétries, à l'exception de la cinquième qui n'est appliquée que sur les monocordons. Afin d'évaluer la répétabilité des essais, trois tirs sont effectués pour chaque paramétrie, à la fois pour les lignes de fusion et pour les monocordons. Exceptionnellement, un ou deux cordons supplémentaires sont réalisés lorsqu'un problème de synchronisation avec la caméra rapide est observé au cours de la fabrication des cordons précédents.

3.3.1.6. Observations in-situ

L'observation des vidéos faites au cours de la réalisation des lignes de fusion met en évidence la formation d'un bain de géométrie relativement stable. En effet, l'irradiation du laser se faisant sur la partie liquide avant, nous pouvons constater que le bain a une forme de goutte d'eau, couramment observée dans le cas du soudage. Lorsque les parties arrières droite et gauche du bain se solidifient, le centre du cordon apparait parfois de façon marquée (Figure 3.4). Bien que la géométrie du bain ne varie pas fondamentalement au cours du procédé, la surface libre du liquide montre néanmoins des oscillations importantes. Sur la Figure 3.4 sont présentées deux images extraites d'une des vidéos capturée au cours de la réalisation d'une des lignes de fusion réalisée avec une puissance de 400 W et une vitesse de 310 mm.s^{-1}. Sur l'image (a) nous pouvons observer le contour du bain en forme de goutte d'eau nettement défini, arrondi et régulier à l'avant au niveau de la zone d'impact du laser, et pointu à l'arrière. Sur la figure (b) la forme de goutte d'eau est également observée, tout comme la pointe à l'arrière du bain, mais la zone arrondie précédemment observée dans la zone d'interaction du laser n'est pas retrouvée. A la place, une zone ovale relativement difforme est constatée. Néanmoins, aucune projection de métal n'est observée au cours de la fabrication des lignes de fusion.

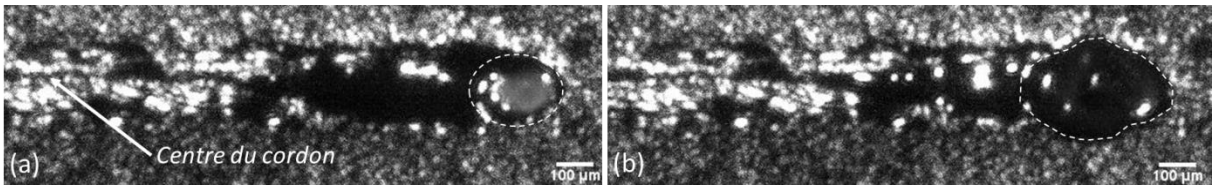


Figure 3.4. Images extraites des vidéos effectuées in-situ durant la réalisation de ligne de fusion à 400 W et 310 mm.s^{-1} montrant le bain fondu avec une surface libre : (a) stable et (b) oscillante

Dans le cas des essais avec poudre, les vidéos du bain montrent un bain plus difficilement identifiable et beaucoup plus agité que dans le cas des lignes de fusion. En effet, si nous nous intéressons aux images présentées sur la Figure 3.5, extraites des vidéos filmant la réalisation d'un monocordon effectué à 400 W et 400 mm.s^{-1}, nous pouvons constater des variations du bain assez importantes au sein d'un même cordon. Par ailleurs, bien que nous puissions remarquer que le faisceau laser semble toujours interagir avec la partie avant du bain liquide, celle-ci ainsi que le proche voisinage du bain paraissent plus irradiés que dans le cas des lignes de fusion. Par ailleurs, le centre du cordon n'est

plus identifiable comme c'était le cas pour les lignes de fusion. L'étude des vidéos monocordons met également en avant le fait que des particules de poudre situées aux abords du bain sont projetées, soit vers l'extérieur ou soit vers l'intérieur du bain permettant ainsi de l'alimenter. De plus, l'observation du cordon obtenu en fin d'essai montre que celui-ci est libre de particules de poudre au niveau de sa surface mais aussi sur ses côtés (observation de la zone de dénudation).

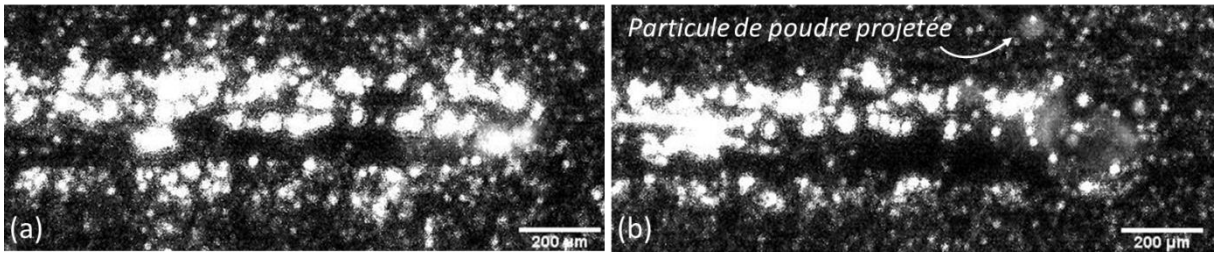


Figure 3.5. Images extraites des vidéos effectuées in-situ durant la réalisation de monocordons à 400 W et 400 mm.s^{-1} montrant le bain fondu avec une surface libre : (a) relativement stable et (b) oscillante

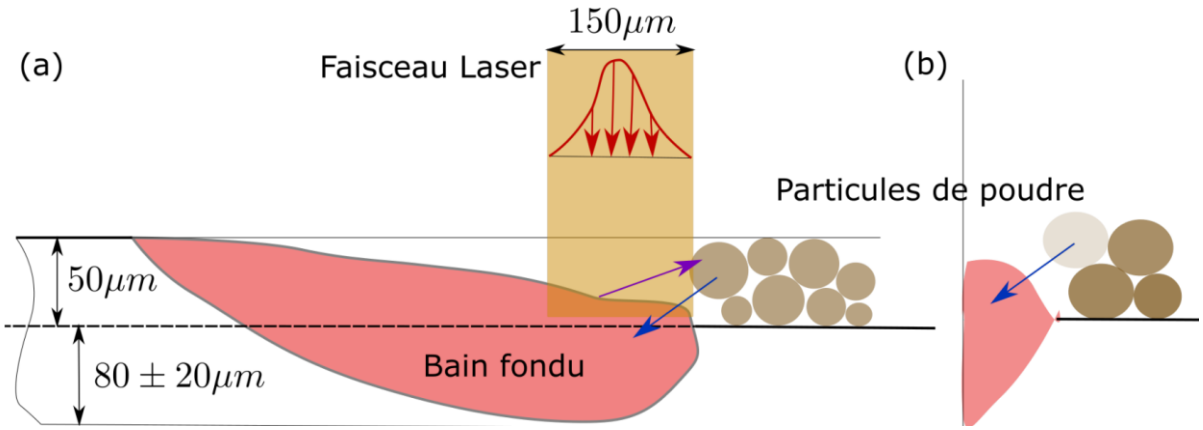


Figure 3.6. Représentations schématiques de l'alimentation du bain en coupes (a) longitudinale et (b) transverse

Grâce à ces différentes constatations, un schéma illustrant l'alimentation du bain peut être proposé, visible sur la Figure 3.6. La coupe longitudinale du bain est représentée sur la Figure 3.6 (a). Le faisceau interagissant avec l'avant du bain liquide, l'énergie qu'il fournit est en partie absorbée par le bain et en partie réfléchie vers les particules de poudre situées aux abords directs du bain (flèche violette). Ces particules de poudre, situées à l'avant du bain (Figure 3.6 (a)) ou sur ses côtés (Figure 3.6 (b)), viennent ensuite alimenter le bain pour la plupart (flèches bleues) contribuant ainsi à l'augmentation du volume du bain fondu formé.

3.3.1.7. Cordons réalisés

A l'issue des essais, deux substrats contenant les lignes de fusion et deux autres contenant les monocordons sont obtenus. Ces plaques comprennent à elles quatre 35 cordons (lignes de fusion et monocordons confondus), parmi lesquels 25 ont été filmés par caméra rapide au cours des essais.

Ces 25 cordons correspondent aux trois cordons produits pour chacune des quatre paramétries sur tôle pleine (sans poudre) et sur lit de poudre, auxquels s'ajoute l'unique monocordon qui a pu être filmé pour la 5ème paramétrie. Les dix autres cordons correspondent à des tirs n'ayant pas été filmés ou à certains tirs mal positionnés. Les cordons obtenus à l'issue des essais sont visibles sur la Figure 3.7, sur laquelle les croix représentent les 10 cordons non conformes (problème de vidéos ou de positionnement).

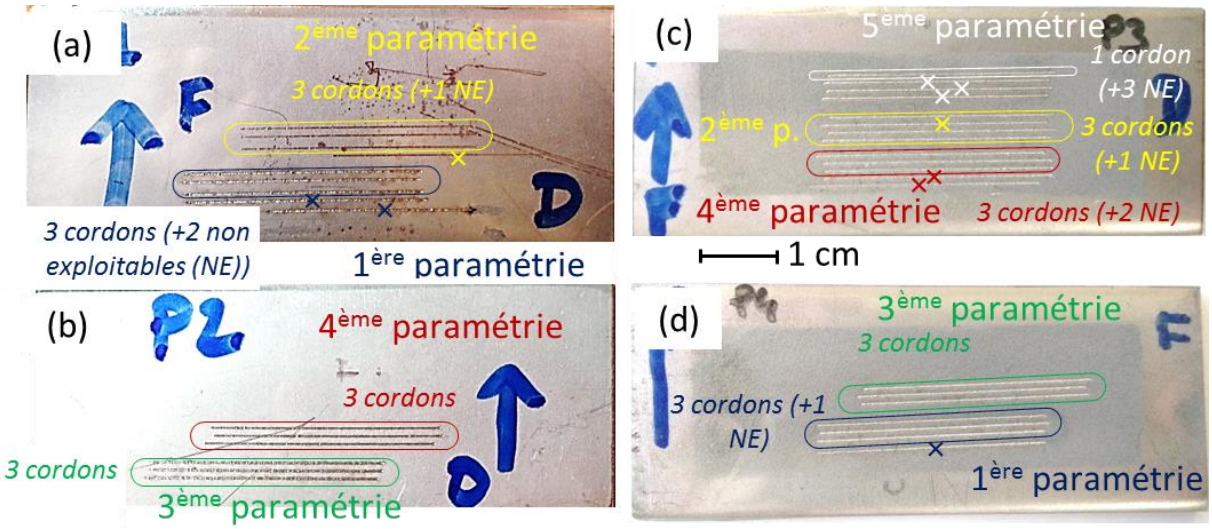


Figure 3.7. (a-b) Lignes de fusion et (c-d) monocordons, formés à l'issue des essais monocouches réalisés sur le banc d'essai de fusion laser sur lit de poudre du laboratoire PIMM

3.3.2. Fabrication des éprouvettes multicouches

La deuxième campagne d'essais est effectuée sans instrumentation, sur la machine industrielle SLM 280 HL de la plateforme Pro3D (*cf.* section 3.1.2). Cette seconde campagne d'essais a pour objectif principal d'étudier les structures de grains 316L formées au cours du procédé LBM dans le cas d'une configuration plus industrielle où les cordons sont cumulés et dans laquelle le matériau peut subir plusieurs cycles de fusion-solidification. Cette configuration permet notamment de voir si certaines observations faites sur les géométries monocouches sont retrouvées sur les pièces multicouches, nous renseignant ainsi sur l'influence du cyclage thermique sur les grains formés.

3.3.2.1. Géométries des éprouvettes fabriquées

Toujours dans l'objectif de limiter le nombre de paramètres opératoires intervenant dans les essais (distance inter-cordon et stratégie de fabrication), nous avons choisi une géométrie constituée d'un seul cordon par couche. La réalisation de voiles (ou murs) constitués de plusieurs cordons superposés risquant de générer des éprouvettes déformées ou voilées en raison de la faible largeur des cordons obtenus en LBM, la géométrie des éprouvettes construites dans le cas de cette campagne est sous forme d'un carré « vide » (Figure 3.8). L'empilement de couches superposées permet alors de former un parallélépipède rectangle d'une hauteur de 18 mm (Figure 3.8), qu'on qualifiera de « cube creux » dans la suite du document pour plus de simplicité, et dont les faces seront appelées « voiles ».

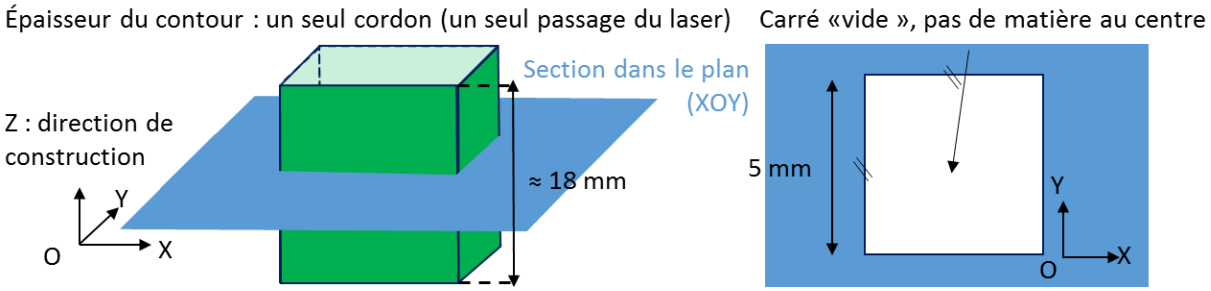


Figure 3.8. Représentation schématique des maquettes réalisées sur la machine industrielle SLM 280 HL

Des cubes creux de différentes longueurs de voiles ont été construits afin d'identifier les pièces les plus régulières, ainsi éligibles pour la caractérisation des grains formés. L'épaisseur du voile étant

relativement faible (quelques centaines de microns), les éprouvettes sont en effet susceptibles de subir des déformations sous l'effet des contraintes résiduelles produites par le procédé. En particulier, les contraintes de compression générées dans les couches inférieures par la contraction volumique des dernières couches déposées lors de leur refroidissement peuvent conduire à l'apparition du phénomène de flambage, contrariant la fabrication de la pièce et rendant complexe son analyse métallographique future. Aussi, six dimensions de cubes creux ont été testées, dont la longueur de voile varie de 5 à 10 mm (Figure 3.9). Quatre exemplaires de chaque géométrie sont réalisés afin de pouvoir ensuite étudier les grains formés dans toutes les directions de l'espace.

3.3.2.2. Préparation de l'installation

Contrairement au banc d'essai instrumenté, la fabrication de pièces sur la SLM 280 HL ne demande aucune étape de préparation particulière, d'autant plus qu'aucune instrumentation n'est mise en place. Le plateau, en acier inoxydable austénitique (Tableau 3.2), est déjà positionné dans la chambre de fabrication et la poudre 316L (Tableau 3.2) préalablement versée dans le bac d'approvisionnement, est automatiquement déposée par le système de dépôt de poudre de la machine. La hauteur de poudre déposée à chaque couche est fixée à 50 µm, pour se placer dans des conditions proches de celles employées dans les cordons monocouches. Pour obtenir une pièce de 18 mm de hauteur, 360 couches sont donc nécessaires.

3.3.2.3. Paramètres opératoires

Nous avons retenu les valeurs de puissance et de vitesse conseillées pour garantir l'obtention d'une pièce dense et correctement réalisée sur une machine SLM 280 HL, qui sont de 100 W et 300 mm.s^{-1} respectivement (Tableau 3.4). Ces valeurs correspondent à une densité volumique d'énergie de 70 J.mm^{-3} environ, comme pour les paramétries 1 et 3 des essais monocouches (Tableau 3.3).

Tableau 3.4. Détail de la paramétrie appliquée au cours des essais multicouches

Paramétries	**P (W)**	**v (mm.s^{-1})**	**φ (µm)**	**VED (J.mm^{-3})**
A	100	300	78	69,76

3.3.2.4. Pièces obtenues

A l'issue des essais, quatre séries de cubes creux de différentes largeurs sont fabriquées (Figure 3.9). Seules les pièces de largeurs 5 à 7 mm sont conservées pour cette étude, les autres présentant des faces voilées (non planes) soit vers l'intérieure soit vers l'extérieur, observation représentative du phénomène de flambage.

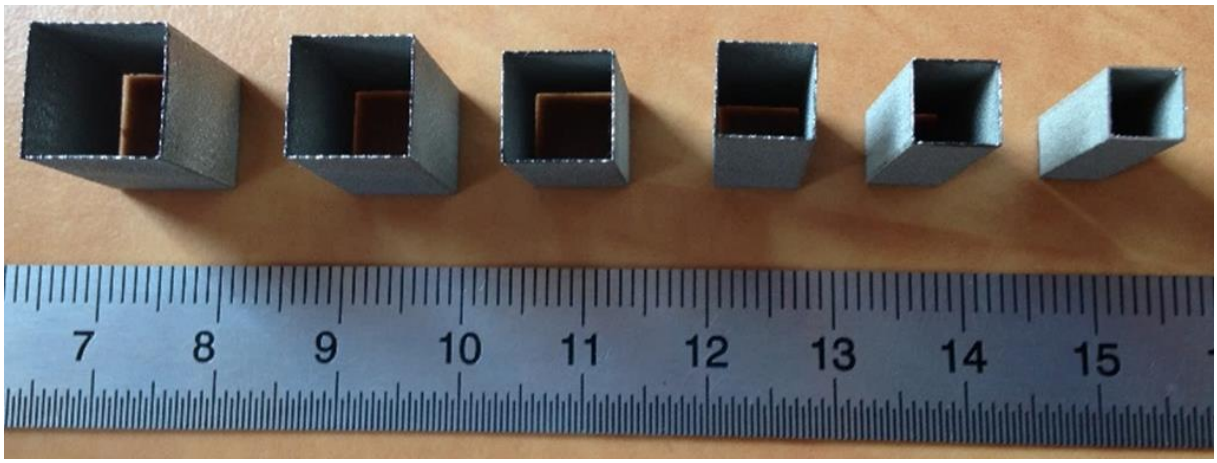


Figure 3.9. Cubes creux fabriqués à l'issue de la campagne multicouche. De gauche à droite, cubes de largeur de voile 10, 9, 8, 7, 6 et 5 mm

3.4. Techniques de caractérisation des échantillons

Les caractéristiques essentielles des structures de grains sont associées à plusieurs échelles :

- Macroscopique : à cette échelle sont déterminées les dimensions et la géométrie de la zone fondue, données déterminantes dans la formation des structures de grains ;
- Mésoscopique : la taille et l'orientation cristallographique des grains sont étudiées à cette échelle ;
- Microscopique : cette échelle correspond aux informations relatives à la taille des bras dendritiques primaires et secondaires ou des cellules, ainsi qu'aux inclusions et précipités divers observés dans la structure granulaire.

Les méthodes de caractérisation à ces différentes échelles utilisées dans le cadre de ces travaux de thèse sont détaillées ci-après.

3.4.1. Préparation des échantillons

Afin d'observer les pièces fabriquées dans les trois directions principales de construction, les échantillons sont découpés, enrobés puis polis. Les pièces obtenues étant particulièrement fines (de l'ordre de la centaine de microns) dans l'épaisseur des voiles pour les cubes creux, et dans la largeur des cordons pour les monocouches, il est primordial de les découper avec précaution et de façon adaptée. Deux méthodes de découpe sont appliquées en fonction du type d'échantillon considéré. Pour la découpe des cubes creux, une scie à fil diamanté verticale W 3500B de la société ESCIL ayant un fil de diamètre 0,3 mm est utilisée. Bien que nécessitant des temps de découpe importants (plusieurs heures pour une coupe horizontale), ce type de découpe progressive permet de ne pas contraindre la pièce à découper, évitant ainsi d'engendrer des déformations. Par ailleurs le diamètre du fil de découpe étant très petit, la coupe obtenue est nette et précise et la perte de matière limitée. Les zones fondues (ZF) et les structures de grains étant observées dans les 3 directions principales des cubes creux, les pièces sont découpées transversalement (coupe transverse) et dans la direction normale (coupe horizontale) à la direction de construction (Figure 3.10).

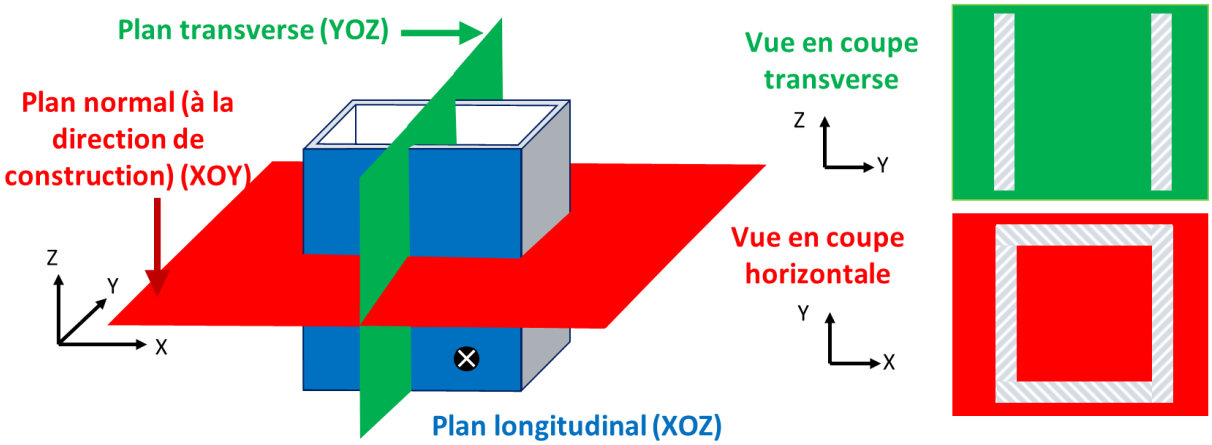


Figure 3.10. Représentation schématique des différents plans de coupe appliqués aux cubes creux

Les monocouches étant moins fragiles et plus longs que les multicouches, leur découpe est effectuée à l'aide d'une micro tronçonneuse STRUERS Secotom utilisant une meule en carbure de silicium d'épaisseur 500 µm. Pour les deux types d'échantillons, le plan de coupe transverse est centré sur la demi-largeur du voile ou la demi-longueur des cordons afin de se situer dans la zone stationnaire du cordon et pour s'éloigner le plus possible des coins. Les cordons ayant une largeur d'une ou deux

centaines de microns seulement, l'obtention de la coupe longitudinale est rendue possible par découpe du substrat au plus proche du bord du cordon dans sa longueur, puis par polissage de la coupe obtenue jusqu'à la demi-largeur.

Une fois découpés, les échantillons (monocouches et multicouches) sont ensuite enrobés soit dans une résine Epoxy transparente pour ceux observés uniquement par microscopie optique par la suite, soit dans une résine conductrice permettant une observation au microscope électronique à balayage (MEB, partie 3.4.3). Dans les deux cas, les échantillons sont enrobés à froid afin de limiter la pression exercée sur la pièce mais aussi l'échauffement des échantillons au cours de la polymérisation des résines.

Suite à l'enrobage, les échantillons sont polis manuellement avec un papier abrasif de grade 1 200 (SiC), puis automatiquement à l'aide de draps de polissage et de suspensions diamantées de 6, 3 et 1 µm. En fonction des échantillons préparés, le polissage à 1 µm peut être effectué manuellement. Une fois l'état de surface satisfaisant, les échantillons sont préparés pour une analyse future au microscope optique (*cf.* 3.4.2) ou pour une observation au MEB (*cf.* 3.4.3) en fonction des résultats souhaités.

3.4.2. Microscopie optique

L'observation des échantillons au Microscope Optique (MO) permet le recueil des caractéristiques du bain fondu (géométrie et dimensions) ainsi qu'une première étude des structures de grains (taille de grains et croissance épitaxiale des grains initialement présents dans le substrat) et des sous-structures obtenues. Les échantillons analysés au MO sont plongés au préalable pendant 15 secondes dans une solution d'eau régale (1 volume de HNO_3 pour 2 volumes d'HCl), après avoir subi les différentes étapes de préparation décrites dans le paragraphe précédent (*cf.* partie 3.4.1). L'attaque à l'eau régale permet de révéler les zones fondues ainsi que les joints de grains du métal. Les analyses par microscopie optique sont réalisées sur un Microscope REICHERT JUNG MeF3 permettant des grossissements allant de x50 à x1000.

3.4.3. Microscopie électronique à balayage

Afin de caractériser cristallographiquement les structures de grains, certains échantillons sont observés grâce à un MEB équipé d'un système d'analyse de diffraction d'électrons rétrodiffusés (*Electron Back Scatter Diffraction* - EBSD). Cette technique d'analyse permet de déterminer l'orientation cristallographique des grains grâce à l'interaction entre les électrons rétrodiffusés, générés suite à la diffraction du faisceau d'électrons primaires sur l'échantillon, et un écran phosphorescent positionné dans la chambre du MEB. Les électrons rétrodiffusés dépendant de l'orientation cristallographique des grains, leur impact sur l'écran de phosphore varie, permettant ainsi la différenciation des grains.

Les échantillons observés au MEB sont préparés selon les étapes décrites dans la partie 3.4.1 puis soumis à une étape de finition effectuée en utilisant une solution de suspension à la silice colloïdale (solution OPS) de 0,06 µm. Les analyses par MEB sont réalisées sur une machine JEOL JSM-IT300 équipée d'un capteur EBSD. Les cartographies EBSD ont été obtenues avec une tension de 20 kV et le post-traitement des données est effectué grâce au logiciel CHANNEL 5 (Oxford Instrument).

Suite à une analyse EBSD, des figures de pôles sont obtenues. Ces figures permettent la mise en relation des directions $\{hkl\}$ des grains observés avec les directions principales de l'échantillon (longitudinale, transversale et normale). On distingue deux types de figures de pôles : les figures directes sur lesquelles sont représentées les directions $\{hkl\}$ des grains dans le référentiel de

l'échantillon (Figure 3.11 (a-c)), et les figures de pôles inverses (*Inverse Pole Figure* - IPF) indiquant la position d'une des directions de l'échantillon dans le référentiel du cristal. Dans le cas des matériaux appartenant au système cubique, les IPF correspondent au triangle standard délimité par la projection des directions [001], [011] et [111] dans le plan équatorial du cristal (Figure 3.11 (d)). Ces données ainsi que les cartographies des grains colorées selon les couleurs du triangle standard IPF nous renseignent sur l'orientation des structures de grains formées ainsi que sur la présence éventuelle d'une texture dans le matériau.

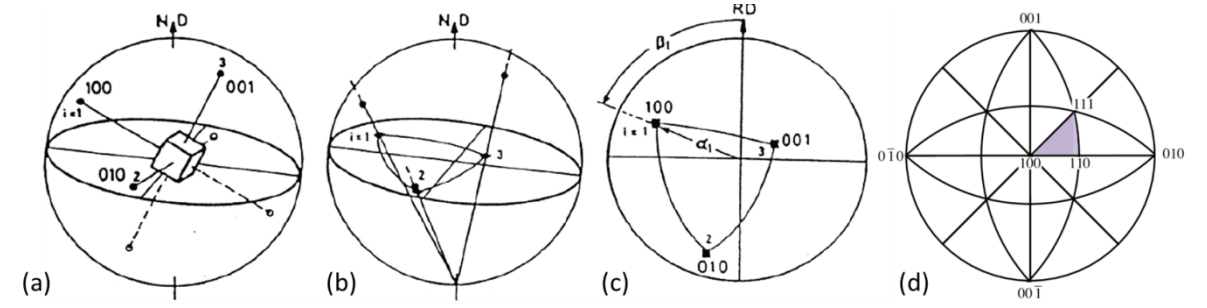


Figure 3.11. Détail des étapes permettant de tracer une figure de pôle représentant les directions {001} d'un cristal : (a) positionnement du cristal au centre de la sphère représentant les directions principales de l'échantillon, (b) projection des directions [100], [010] et [001] sur le plan équatorial de la sphère et (c) figure de pôle {100} obtenue à l'issue de la projection [Solas 2017]. (d) Représentation du triangle standard obtenu dans le plan équatorial pour un système cubique [Tucker 2013]

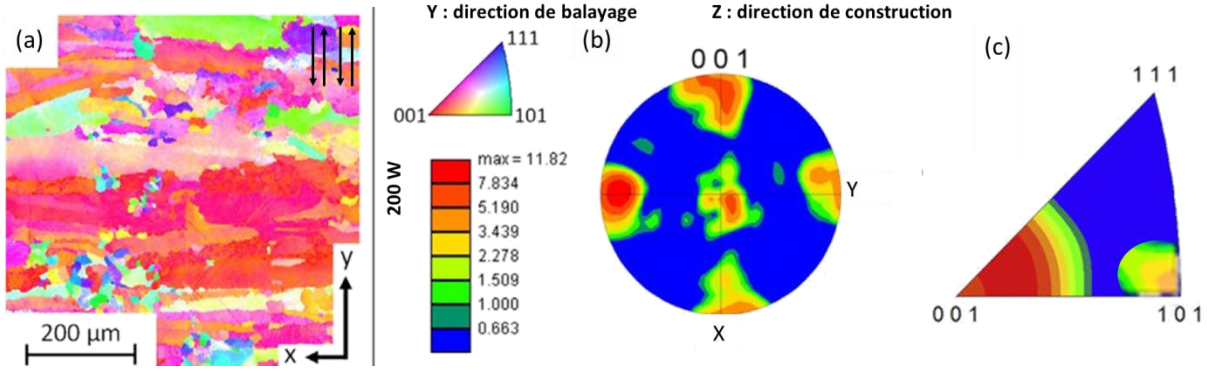


Figure 3.12. (a) Cartographie EBSD décrivant la distribution des plans $\{hkl\}$ d'une éprouvette en acier 316L fabriquée par LBM (observation d'une coupe normale à la direction de construction) par rapport à la direction verticale de l'échantillon (Z) et (b) figure de pôle associée [Kurzynowski 2018].

A titre d'exemple, l'observation de la cartographie EBSD présentée sur la Figure 3.12 (a) représente la distribution des plans $\{hkl\}$ par rapport à la direction de construction (Z) d'une pièce en acier 316L fabriquée par LBM, issue des travaux de Kurzynowski et al. [Kurzynowski 2018]. Nous pouvons remarquer que les grains sont majoritairement colorés en rouge, ce qui signifie que l'axe Z est principalement aligné avec les directions {001}. Nous pouvons également remarquer sur la figure de pôle associée (Figure 3.12 (b)) que les densités d'orientations maximales pour les directions {001} sont obtenues au centre (axe Z) et au niveau des extrémités des axes X et Y, confirmant l'alignement des grains avec l'axe de construction de la pièce.

3.5. Etude des zones fondues

Nous avons vu dans le chapitre bibliographique que le gradient thermique et la vitesse de croissance (G et V respectivement) gouvernent la formation des structures de grains, et que ces deux grandeurs

physiques dépendent elles-mêmes des caractéristiques géométriques du bain fondu (*cf.* 1.2.4). Pour ces raisons, nous nous intéressons dans cette partie à l'étude des caractéristiques morphologiques et dimensionnelles du bain fondu pour les différentes paramétries retenues. Par ailleurs, cette étude nous permettra de comparer les résultats obtenus pour les lignes de fusion (*i.e.* sans poudre) et pour les monocordons (*i.e.* avec poudre) et nous renseignera sur l'évolution du bain dans le cas de pièces multicouches. Enfin, l'étude géométrique du bain fondu nous permettra de recueillir des informations concernant les transferts de chaleur intervenant au cours du procédé.

3.5.1. Dimensions et géométrie du bain de fusion

3.5.1.1. Lignes de fusion et cordons monocouches

L'observation par microscopie optique des coupes transverses des lignes de fusion et des cordons monocouches permet de déterminer la largeur et la profondeur de la zone fondue. Pour chaque paramétrie, les largeurs et profondeurs de tous les cordons sont mesurées. Une seule coupe étant faite dans chaque cordon, au niveau de la zone stationnaire, trois mesures sont ainsi effectuées pour chaque paramétrie. Ensuite les valeurs moyennes et les écarts types sont calculés pour chaque configuration. Pour les lignes de fusion la profondeur du bain est mesurée à partir de la surface du plateau (Figure 3.13 (a)), tandis que pour les cordons monocouches elle correspond à la hauteur totale du cordon (Figure 3.13 (b)). Les valeurs mesurées sont données dans le Tableau 3.5. L'incertitude liée à la méthode de mesure est d'environ 10 µm.

Tableau 3.5. Dimensions du bain fondu mesurées sur les lignes de fusion (LF) et les monocordons (Mo) pour les différentes paramétries. RF correspond au rapport de forme égal à la profondeur sous substrat sur la largeur et σ à l'écart type

	Largeur (µm)		Profondeur (µm)		Longueur (µm)		RF	P (W)	v (mm.s^{-1})	E (J.mm^{-3})
	Moyenne	σ	Moyenne	σ	Moyenne	σ				
LF	266	13,2	107	13,9	630	60	0,40	320	250	72
Mo	227	13,1	135	28,9	674	64	0,38			
LF	211	5,5	60	2,5	500	70	0,29	320	400	45
Mo	187	13,9	130	12,3	-	-	0,34			
LF	269	15,1	125	2,1	872	89	0,46	400	310	73
Mo	250	6	178	5,1	1023	105	0,47			
LF	225	14,3	88	1,7	710	68	0,39	400	400	57
Mo	222	8,5	139	8,8	947	109	0,41			
Mo	242	11,4	205	25,7	1300	120	0,57	600	400	85

Le post-traitement des vidéos de la surface du bain, obtenues grâce à l'instrumentation optique mise en place sur le banc d'essai (*cf.* 3.1.1), permet également de déterminer la longueur du bain fondu (Figure 3.15). Les mesures de longueur de bain sont faites *via* le logiciel ImageJ, en calculant la moyenne des valeurs obtenues pour 40 images pour chaque cordon, soit 120 images pour une même configuration. Les longueurs calculées sont également résumées dans le Tableau 3.5. L'incertitude de mesure liée à la méthode utilisée pour déterminer ces valeurs est de 50 µm environ.

Les microscopies optiques des coupes transverses des lignes de fusion et des monocordons, en partie visibles sur la Figure 3.13 et la Figure 3.14, montrent un bain arrondi de forme caractéristique des bains obtenus par mode de conduction (*cf.* 1.2.3.6). Cependant, cette forme est plus ou moins arrondie en fonction des paramètres appliqués. Sur la Figure 3.14 représentant les différentes lignes de fusion en coupe transverse, la zone fondue formée pour les densités volumiques d'énergie les plus élevées (figures (a) et (c)), est moins arrondie et plus « pénétrée » que celle formée pour des

valeurs de E plus basses (figures (b) et (d)). Les observations par caméra indiquent quant à elles que le bain, arrondi à l'avant et pointu à l'arrière, est très allongé (Figure 3.15). Ces observations géométriques sont cohérentes avec les résultats obtenus dans la littérature dans le cas de bain fondu formé par conduction (*cf.* 1.2.3.6). Enfin, dans le cas des configurations monocordons, une observation récurrente liée au bain est la présence de particules de poudre non fondues à l'intérieur de la zone fondue (Figure 3.16). L'étude des rapports de forme (RF) (Tableau 3.5), correspondant au rapport entre la profondeur du bain sous substrat et sa largeur, montre des valeurs proches pour une même paramétrie entre les résultats des lignes de fusion et ceux des monocordons. De plus, nous pouvons constater que pour des énergies volumiques plus élevées, les rapports de forme augmentent. Cette constatation révèle que l'augmentation de l'énergie apportée influence d'avantage la profondeur du bain que sa largeur.

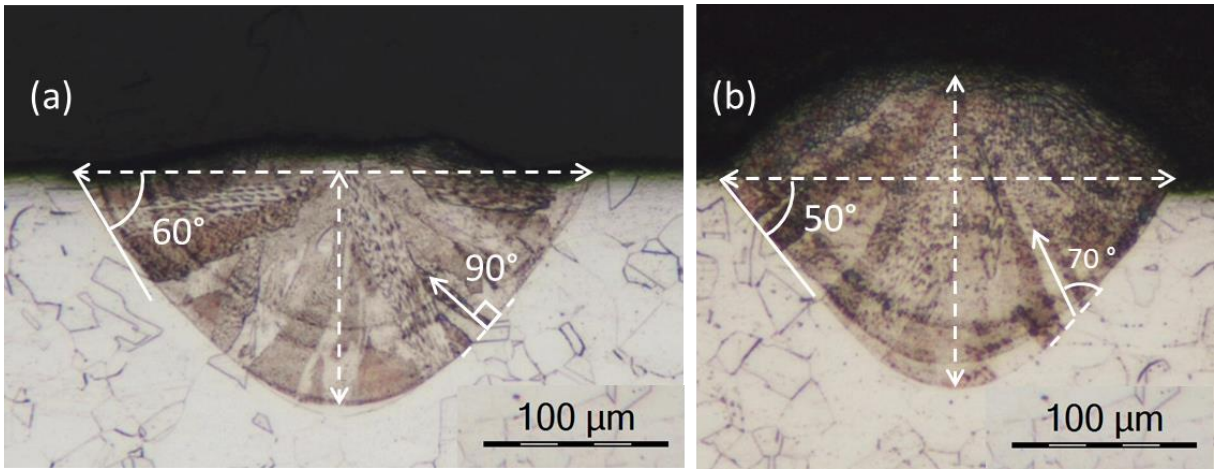


Figure 3.13. Images obtenues par microscopie optique (x200) des sections transverses d'échantillons réalisés à 400 W et 310 mm.s^{-1} : (a) ligne de fusion et (b) cordon monocouche. Les traits pointillés représentent les largeurs et profondeurs des zones fondues considérées.

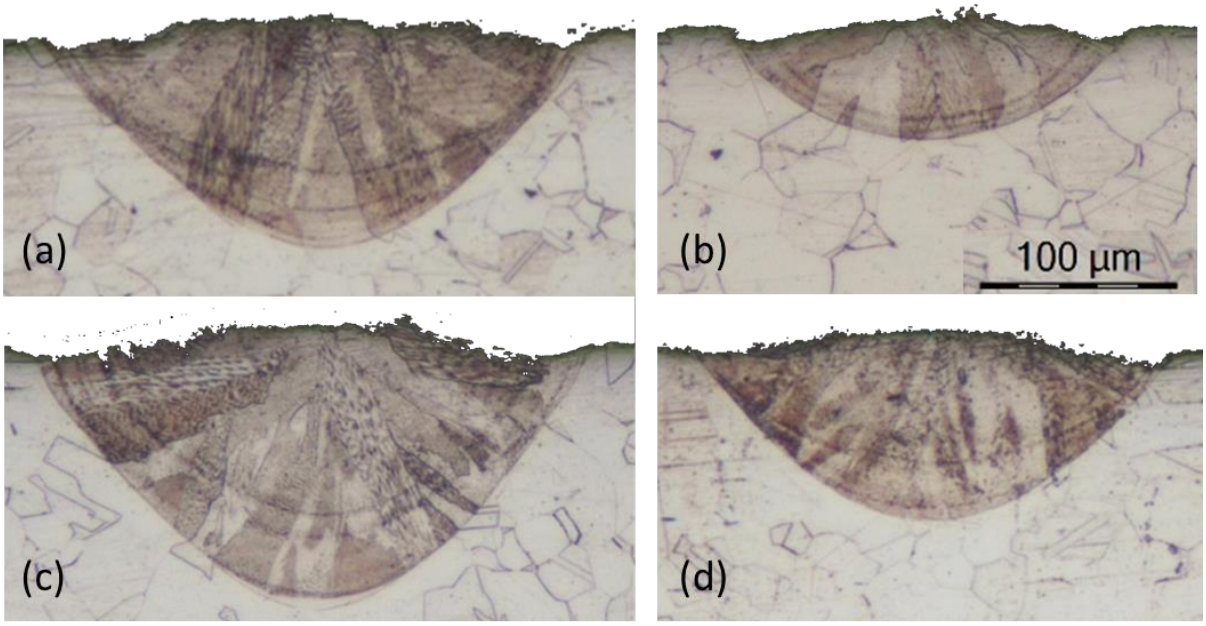


Figure 3.14. Microscopies optiques (x200) des coupes transverses des lignes de fusion obtenues pour des puissances et vitesses de : (a) 320 W et 250 mm.s^{-1}, (b) 320 W et 400 mm.s^{-1} (c) 400 W et 310 mm.s^{-1} et (d) 400 W et 400 mm.s^{-1}.

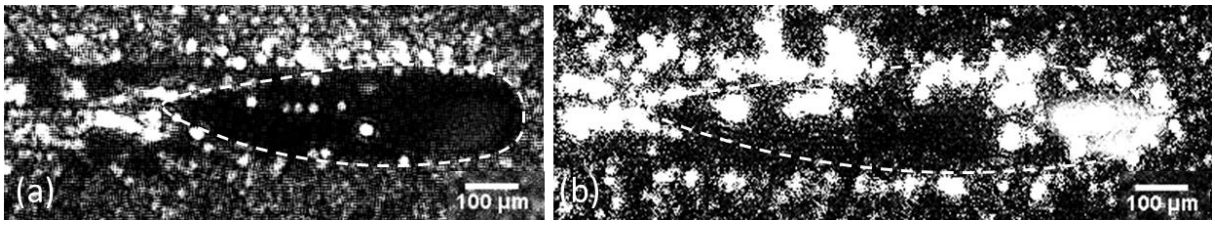


Figure 3.15. Images du bain fondu extraites des vidéos enregistrées par caméra rapide, dans le cas d'essais réalisés à 400 W et 400 mm.s^{-1} : (a) ligne de fusion, (b) cordon monocouche. Les traits pointillés représentent le contour estimé du bain fondu

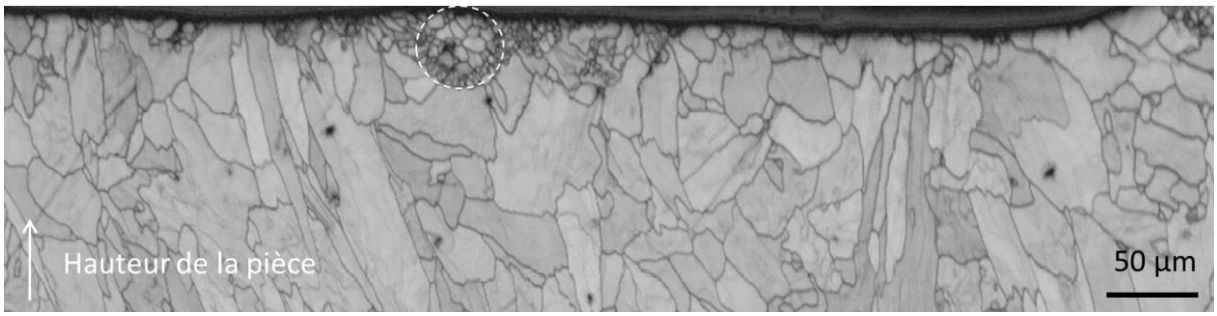


Figure 3.16. Particule de poudre (cercle pointillé) partiellement fondue observée au MEB au niveau de la surface supérieure de la coupe longitudinale d'un monocordon

Tableau 3.6. Variation des dimensions du bain fondu entre lignes de fusion et monocordons

P (W)	v (mm.s^{-1})	E (J.mm^{-3})	Δ largeur	Δ profondeur	Δ longueur
320	250	72	-15%	26%	7%
320	400	45	-11%	117%	
400	310	73	-7%	42%	17%
400	400	57	-1%	58%	33%

Toutefois, des différences de caractéristiques sont constatées entre lignes de fusion et monocordons, provenant de l'interaction entre la poudre et la surface liquide. En effet, la poudre en rejoignant le bain change la thermique locale du liquide, modifiant potentiellement les gradients de température et donc l'effet Marangoni, principal responsable des écoulements dans le bain.

En comparant les dimensions du bain fondu des lignes de fusion et des monocordons réalisés pour une même paramétrie, nous pouvons remarquer que les largeurs des zones fondues mesurées pour les lignes de fusion sont supérieures à celles des monocordons, mais que leurs profondeurs sont inférieures (Tableau 3.6), et cela dans le cas des quatre paramétries testées. Ce résultat est assez cohérent avec le mode de conduction de chaleur du laser. Dans le cas des lignes de fusion, la zone fondue est entièrement située dans le substrat. La chaleur fournie par le laser en surface du bain est donc transmise par conduction à travers le substrat de façon relativement isotrope (Figure 3.13 (a)). Dans le cas des monocordons, le phénomène de « dénudation » accompagnant la fusion de la poudre entraine la formation d'un volume gazeux autour du cordon. La chaleur apportée par le laser en surface de bain ne peut donc être transmise latéralement par conduction en raison de l'absence de matière. Elle se fait donc principalement en profondeur, jusqu'au substrat, dans lequel elle peut ensuite se dissiper dans toutes les directions. Le bain formé observé est alors moins large et plus profond. Toutefois, il est important de signaler que les phénomènes de convection dans le bain liquide ont une grande importance sur les transferts thermiques, pouvant ainsi avoir une forte

influence sur les formes de bains obtenues comme l'ont signalé plusieurs auteurs [Bertoli 2017, Zhang 2019b].

La longueur de bain est également plus grande dans le cas des monocordons que dans celui des lignes de fusion, conduisant à des volumes de bain liquide significativement plus élevés dans les monocordons que dans les lignes de fusion. Ce résultat peut avoir plusieurs interprétations.

Tout d'abord, en raison de la formation d'une zone de dénudation autour du monocordon déjà citée (cf. 1.2.3.2), l'évacuation de l'énergie est limitée dans la partie supérieure des cordons. L'énergie effective stockée par le bain, à paramétrie égale, devrait donc être plus élevée dans les monocordons que celle reçue par le substrat nu.

Une autre explication possible aux variations de volume du bain liquide provient du fait que l'interaction du laser avec la surface plane du substrat lors de la fabrication des lignes de fusion diffère de celle observée en présence de poudre au voisinage du bain. Nous savons que l'énergie apportée au bain provient principalement de l'interaction laser/fluide, et qu'une partie de l'énergie fournie par le laser est réfléchie par le bain. Dans le cas des monocordons, cette puissance perdue par réflexion peut en partie avoir été réfléchie sur les particules de poudre situées aux abords directs du bain. Les macrographies et les observations indiquent en effet que la surface du bain est bombée dans la configuration avec apport de matière (monocordon), favorisant les réflexions du laser sur les grains de poudre adjacents. Ainsi, lorsque certaines de ces particules de poudre viennent ensuite alimenter le bain au cours du procédé, elles restituent alors au bain une partie de l'énergie réfléchie. Cette énergie restituée contribue alors à l'augmentation du volume de métal fondu.

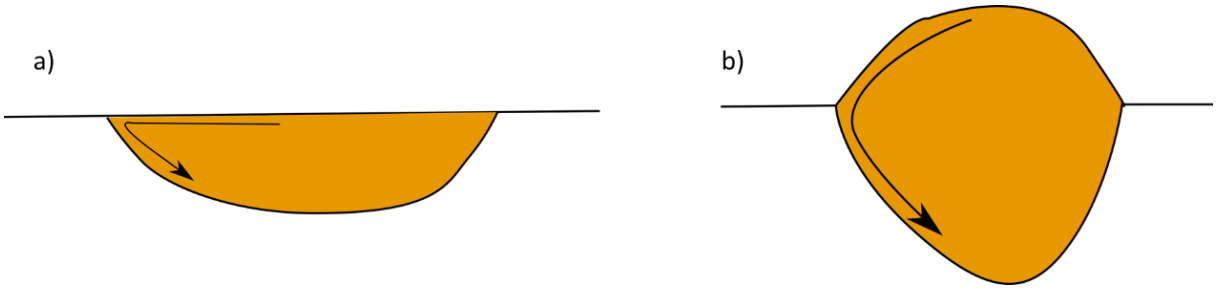


Figure 3.17. Représentation schématique en coupe transverse des écoulements liquides dans le bain pour (a) la ligne de fusion, (b) le monocordon

Cependant, le volume de liquide formé dépend également de la distribution de chaleur au sein des parties liquides, distribution liée aux écoulements complexes au sein du fluide. Dans le cas des monocordons, il semblerait que ces écoulements se fassent préférablement en profondeur que vers l'extérieur, générant ainsi un bain plus profond et long que dans le cas des lignes de fusion (Tableau 3.5). Les écoulements sont principalement gouvernés par l'effet Marangoni, piloté par la dépendance de la tension de surface vis-à-vis de la température ainsi que par le gradient de température le long de cette interface, qui peut être différent dans les lignes de fusion et les monocordons. Les macrographies visibles sur la Figure 3.13 montrent en effet que la surface libre de la ligne de fusion est quasiment plane (Figure 3.13 (a)) alors que celle du monocordon présente une courbure importante (Figure 3.13 (b)), ce qui peut modifier l'évolution des tensions de surface le long de l'interface liquide/gaz. L'effet Marangoni produit généralement, dans la plupart des alliages, un écoulement centrifuge, depuis la surface au centre du cordon, la plus chaude, vers sa périphérie plus froide (Figure 3.17). La géométrie de la surface du bain peut ainsi avoir une influence sur la trajectoire et le flux associés à ces écoulements.

L'angle au sein du bain liquide marquant le changement de trajectoire de l'écoulement au niveau de la ligne triple est en effet plus important dans le cas des monocordons que dans celui des lignes de fusion (Figure 3.17). Les écoulements dans la profondeur du bain engendrent alors dans ce dernier cas des pertes de charge, réduisant les vitesses d'écoulement du fluide et donc les transferts de chaleur dans la profondeur du bain, contribuant à expliquer sa forme moins pénétrée.

Les variations de profondeur et de longueur de bain entre monocordons et lignes de fusion étant bien plus marquées lorsque la vitesse est plus grande, et les variations de largeur un peu moindres, l'augmentation du volume du bain liquide des monocordons par rapport aux lignes de fusion est donc plus importante à haute vitesse. Ce résultat confirme les hypothèses précédemment formulées sur le rôle des écoulements sur la taille et la forme du bain, les écoulements Marangoni étant plus rapides lorsque la vitesse du laser augmente [King 2014].

Nous pouvons donc aboutir aux conclusions suivantes concernant les bains liquides formés lors de la fabrication des lignes de fusion et des monocordons :

- Quelle que soit l'énergie employée, les largeurs de bain obtenues dans les deux types de cordons (avec et sans poudre) sont très proches ;
- Du fait de la réflexion d'une partie de la puissance laser sur les particules de poudre situées aux alentours du bain, l'énergie absorbée par le bain semble plus importante dans le cas des monocordons, conduisant à des volumes de bains plus élevés pour une même puissance et vitesse ;
- L'énergie semble également distribuée plus en profondeur dans la configuration monocordon, probablement en raison de l'amplification des effets de tensions superficielles liés à la courbure de l'interface, et par conséquent à l'augmentation des effets Marangoni, mais aussi parce que la courbure de l'interface observée pour les monocordons génère un angle plus important au niveau de la ligne triple du bain, favorisant ainsi la diminution des pertes de charges et donc l'amélioration des transferts d'énergie en profondeur.

3.5.1.2. Evolution du bain dans les dépôts multicouches

L'étude des cubes creux nous renseigne sur l'évolution des dimensions du bain au cours de l'accumulation de passes successives. Tout d'abord, nous pouvons remarquer qu'à chaque nouvelle couche fabriquée, une partie de la couche précédente est refondue, ce qui garantit une bonne continuité de la matière (Figure 3.18 et Figure 3.19).

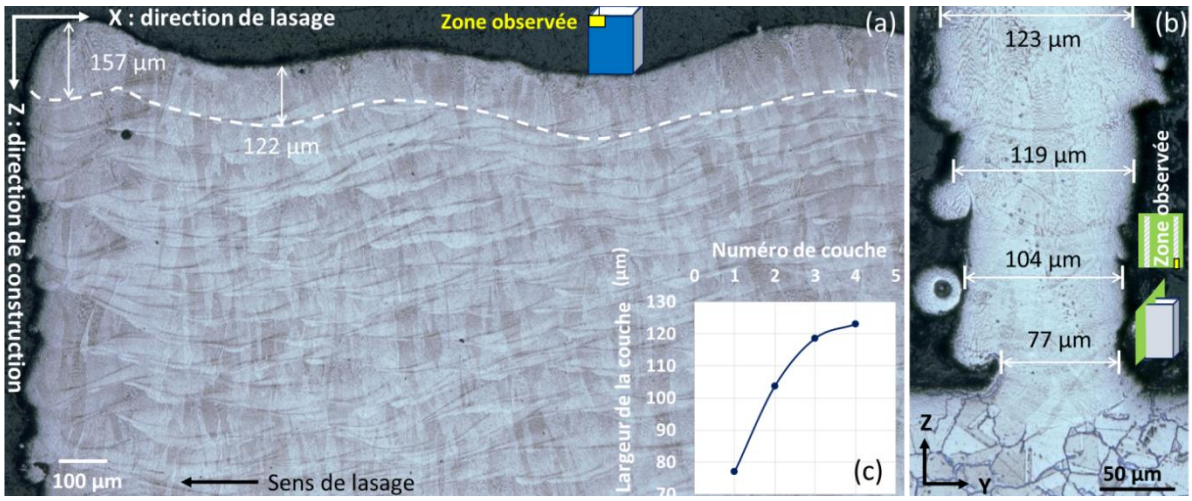


Figure 3.18. Microscopies optiques des cubes creux : (a) en vue de face (x300) et (b) en coupe transverse (x500). (c) Evolution de la largeur des premières couches fabriquées.

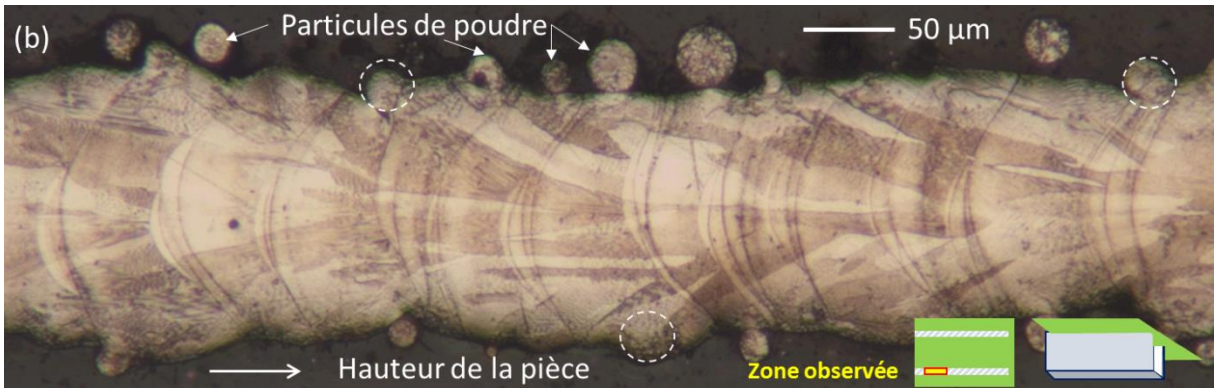


Figure 3.19. Particules de poudre partiellement fondues observées au microscope optique dans la coupe transverse d'un cube creux.

D'autre part, nous pouvons observer que la largeur de la zone fondue (ZF) augmente dans la hauteur de la pièce au niveau des premières couches fabriquées (Figure 3.18 (b)). Cependant, tout comme l'ont déjà observé Liu et al. [Liu 2018b], cette augmentation diminue progressivement, conduisant à une stabilisation relative de la largeur du monocordon (Figure 3.18 (c)). Par ailleurs, en observant les faces du cube creux (Figure 3.18 (a)) nous avons constaté que les cordons ondulent et ce dès les premières couches fabriquées. De plus, sur cette même figure il apparait clairement que les ZF sont plus larges et profondes au niveau des coins du cube creux que dans le reste de la pièce. Ce phénomène pourrait être lié à une modification du régime thermique au niveau des coins, due à une moins bonne évacuation de la chaleur apportée par le laser du fait du changement de géométrie, ou à la diminution de la vitesse de déplacement du laser au moment du changement de direction. Enfin, comme dans le cas des monocordons, la présence de particules de poudre non fondues à l'intérieur de la zone fondue ou en surface des cubes creux est observée (Figure 3.18 (b) et Figure 3.19).

3.5.2. Influence des paramètres opératoires

Dans cette partie sont étudiées les variations des caractéristiques du bain fondu en fonction des valeurs de vitesse, de puissance et de densité volumique d'énergie appliquées aux lignes de fusion et aux cordons monocouches fabriqués.

3.5.2.1. Influence de la vitesse de déplacement

Sur la Figure 3.20 sont représentées les dimensions du bain fondu mesurées pour les lignes de fusion en fonction de la vitesse. Nous pouvons constater qu'à puissance égale, la largeur, la profondeur et la longueur du bain diminuent lorsque la vitesse augmente. Cependant, la variation de profondeur du bain est plus marquée (-44 % lorsque la vitesse passe de 250 $mm.s^{-1}$ à 400 $mm.s^{-1}$ pour une puissance de 320 W) que la diminution de largeur et de longueur du bain (-20 % pour la même variation de vitesse). Cet effet plus marqué sur la profondeur du bain pourrait s'expliquer par le fait que des dimensions caractéristiques du bain plus petites lorsque la vitesse augmente entrainent l'obtention d'un nombre de Péclet plus faible (*cf.* section 2.2.1.2), ce qui signifie que les transferts par convection perdent en influence par rapport à la conduction.

Les tendances observées pour l'évolution des dimensions du bain fondu lorsque la vitesse de déplacement augmente dans les monocordons sont assez similaires (Figure 3.21), conformément aux tendances attendues et à ce qui est observé dans la littérature [Bertoli 2017, Cheng 2018, Zhang 2019b]. Cependant, si la diminution de largeur avec l'augmentation de vitesse est du même ordre que celle observée pour les lignes de fusion, la diminution de longueur et de profondeur est bien plus faible. Nous pouvons même observer que la profondeur reste quasiment constante pour une

puissance de 320 W lorsque la vitesse passe de 250 à 400 mm.s^{-1}. Ces résultats semblent confirmer que les phénomènes physiques intervenant lors de l'établissement du cordon en LBM sont assez différents de ceux observés sur un substrat massif. Nous avons déjà évoqué dans la section précédente le fait que les multi-réflexions du laser sur les particules de poudre pouvaient augmenter la transmission d'énergie au bain, permettant ainsi de former un volume de liquide plus important pour une même puissance et vitesse de déplacement.

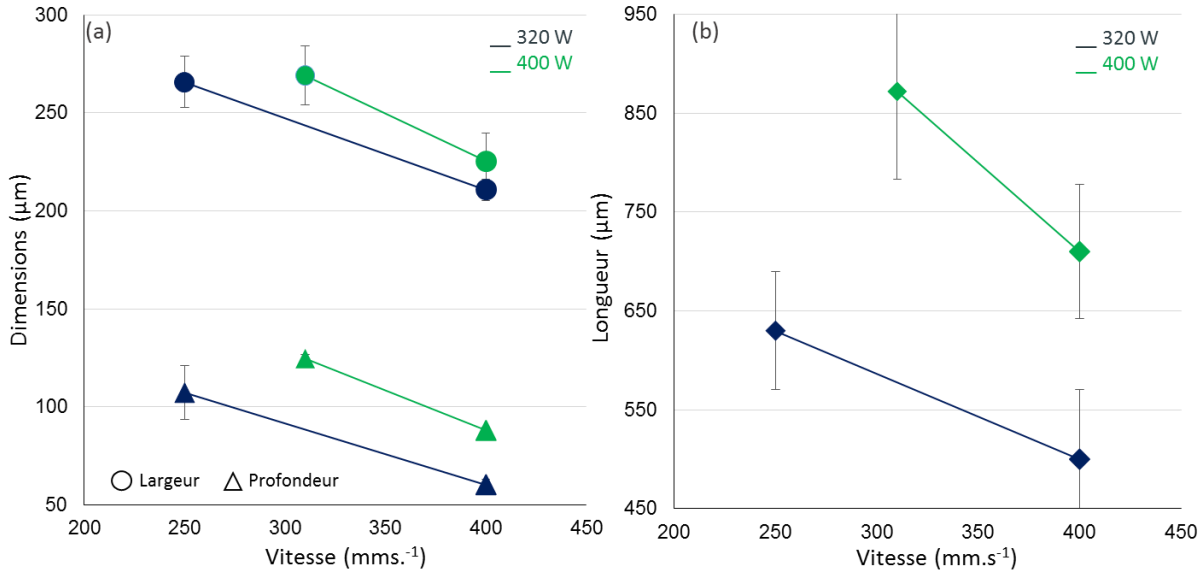


*Figure 3.20. Évolution en fonction de la vitesse : (a) des largeurs et profondeurs du bain, (b) de la longueur du bain, dans le cas des **lignes de fusion***

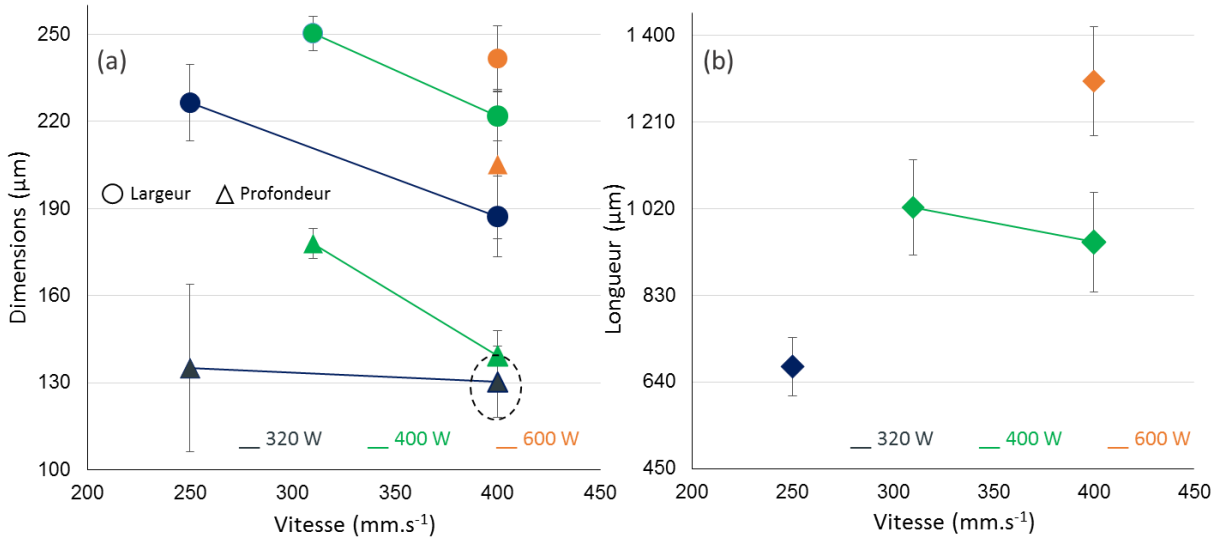


*Figure 3.21. Evolution en fonction de la vitesse de : (a) la largeur et la profondeur, (b) la longueur du bain fondu dans le cas des **cordons monocouches***

3.5.2.2. Influence de la puissance laser

L'influence de la puissance du laser sur les caractéristiques de bains formés peut être observée en comparant les résultats obtenus à la vitesse de déplacement de 400 mm.s^{-1}.

Sur la Figure 3.22 (a), nous pouvons constater les mêmes tendances lorsque la puissance augmente à vitesse constante que lorsque la vitesse diminue à puissance constante : une augmentation de la

largeur, de la profondeur et de la longueur du bain fondu des lignes de fusion. On observe toutefois, même si le nombre de conditions étudiées n'est pas suffisant pour attester la tendance, que la puissance semble modifier autant la profondeur que la largeur du bain (augmentation de plus de 40 % lorsque la puissance passe de 320 à 400 W), contrairement à ce qui est observé pour la vitesse de déplacement.

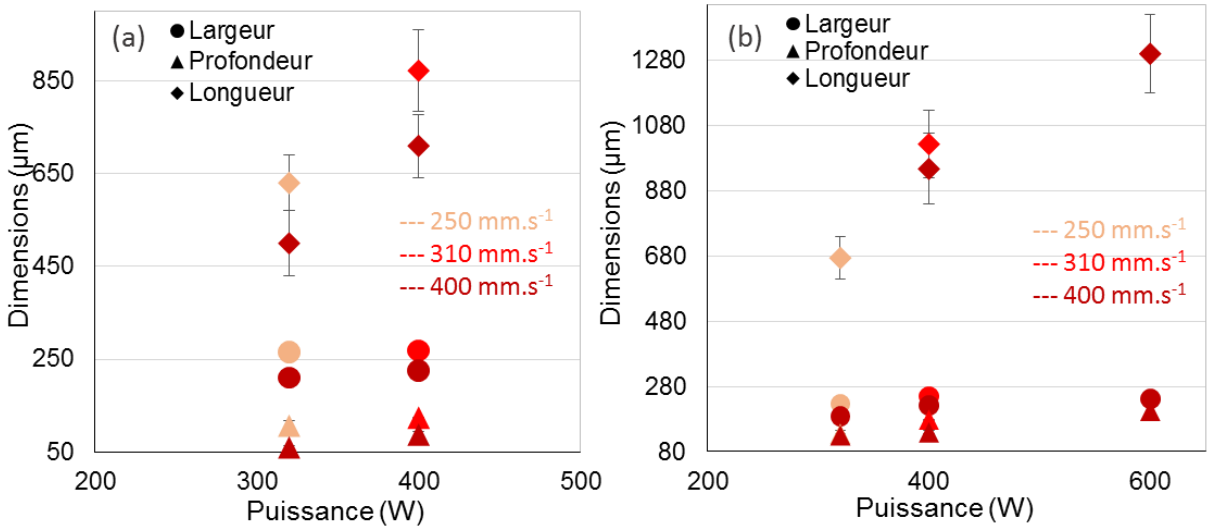


Figure 3.22. Évolution des dimensions du bain (largeur, profondeur et longueur) en fonction de la puissance pour : (a) ***les lignes de fusion*** *et (b)* ***les monocordons***

Sur la Figure 3.22 (b), nous pouvons constater que les variations sur la largeur et la profondeur du bain dans les monocordons sont beaucoup plus faibles (respectivement +20 % et +6 % lorsque la puissance passe de 320 à 400 W). Ces tendances sont également conformes à celles observées dans la littérature [Zhang 2019b]. On voit donc ici encore que les mécanismes gouvernant la formation du bain paraissent assez différents dans le cas d'un substrat dense et d'un lit de poudre, sans doute en grande partie du fait d'une modification de l'interaction laser/matière et des caractéristiques des interfaces liquide/gaz et liquide/solide.

3.5.2.3. Influence de la densité d'énergie volumique

Une diminution de la vitesse d'avance produisant les mêmes tendances qu'une augmentation de la puissance laser, il est courant d'estimer l'apport énergétique fourni par le laser par la densité volumique d'énergie, proportionnelle au rapport P/v pour un diamètre de faisceau donné [Wang 2011, Ciurana 2013, Yadroitsev 2013, Campanelli 2014, Bertoli 2017].

Nous pouvons remarquer sur la Figure 3.23, que lorsque la densité volumique d'énergie augmente, par diminution de la vitesse ou augmentation de la puissance, la largeur et la profondeur du bain formé dans les lignes de fusion ont tendance à augmenter également. En revanche, il n'y a pas de tendance marquée pour les variations de longueur du bain, des valeurs très différentes pouvant être obtenues pour des densités d'énergie volumique sensiblement identiques (Figure 3.23 (b)). Sur la Figure 3.23, nous pouvons également remarquer que pour les deux paramétries de même densité d'énergie volumique (zones encerclées), la largeur du bain reste quasiment inchangée (variation de 1 % seulement), alors que sa profondeur et sa longueur s'accroissent de façon non négligeable (de 17 % et 38 % respectivement) lorsque la puissance et la vitesse augmentent simultanément. Les tendances sont encore plus marquées dans les monocordons, une même valeur de densité d'énergie volumique donnant des largeurs qui augmentent de 32 % et des longueurs de 50 % lorsque la vitesse et la puissance augmentent simultanément (Figure 3.24).

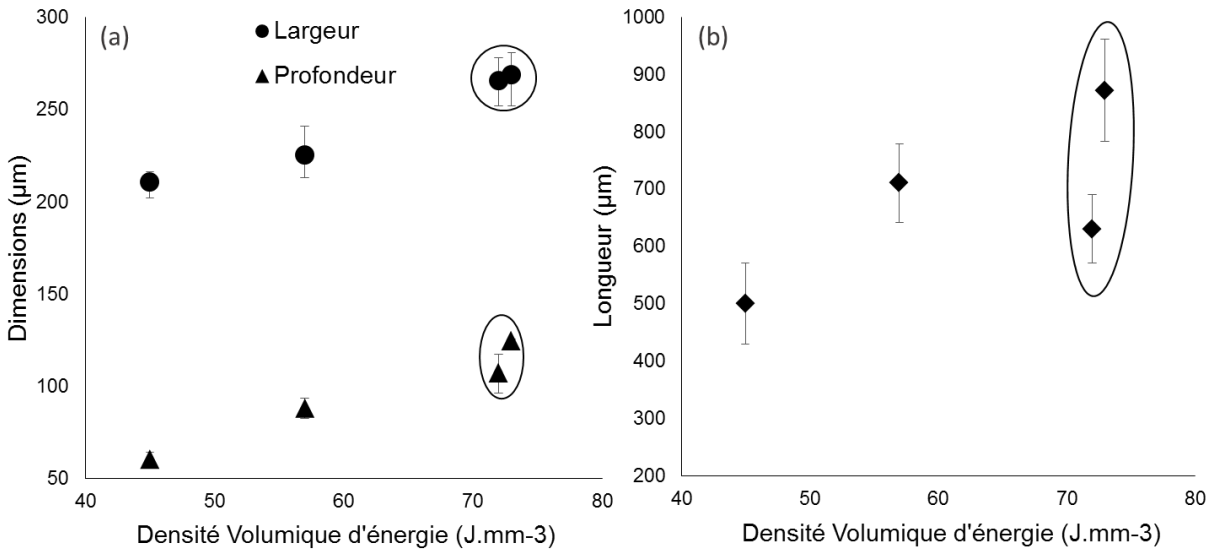


Figure 3.23. Evolution, en fonction de la densité volumique d'énergie, (a) de la largeur et de la profondeur et (b) de la longueur du bain fondu ***des lignes de fusion***

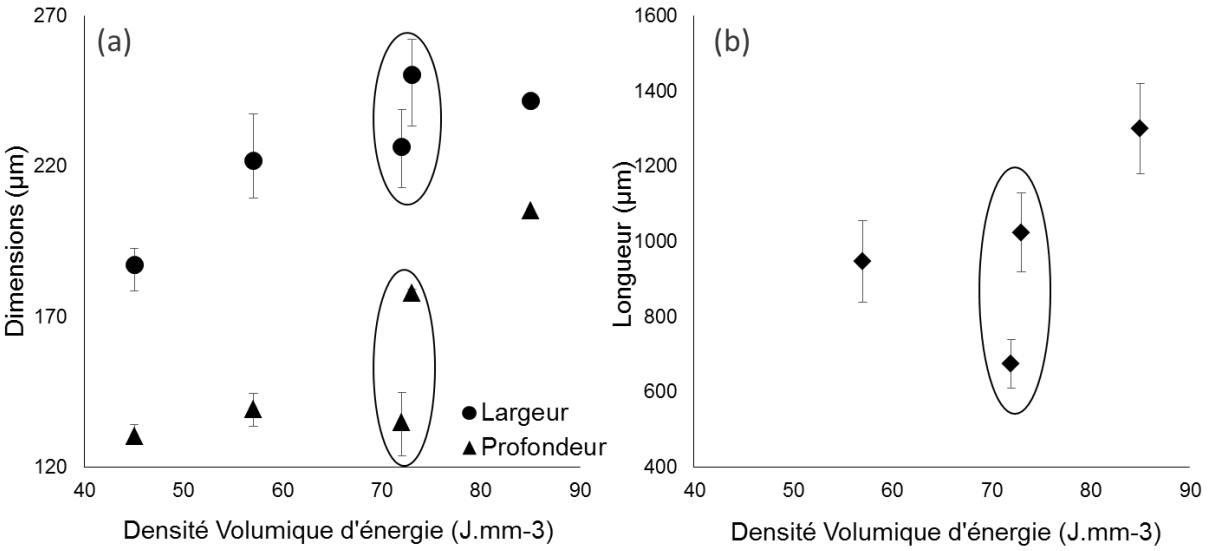


Figure 3.24. Evolution, en fonction de la densité volumique d'énergie (a) de la largeur et de la profondeur et (b) de la longueur du bain, dans le cas de la réalisation de ***monocordons***

Andreau et al. [Andreau 2019] ont également observé une augmentation de la largeur et de la profondeur du bain de 40 % environ pour deux configurations de fabrication ayant la même valeur de densité volumique d'énergie lorsque la vitesse d'avance est multipliée par 2,2. Une explication proposée par cette étude à ces variations, réside dans le fait que le calcul de la densité d'énergie volumique, bien qu'il prenne en compte les paramètres opératoires du système (puissance, vitesse, diamètre focal du laser), ne tient pas compte des phénomènes physiques à l'échelle du bain.

D'autres auteurs ont proposé de prendre en compte la profondeur de chauffe estimée à partir de la diffusivité thermique du matériau afin de calculer une densité d'énergie volumique, alors proportionnelle au rapport $P/\sqrt{v}$ [Bertoli 2017, Zhang 2019b]. Zhang a obtenu une bonne corrélation entre la profondeur du bain et ce paramètre, qui augmentent en même temps. Cependant, dans notre cas, aucune tendance claire n'est observée entre la profondeur de bain et le rapport $P/\sqrt{v}$, ce

qui montre que ce paramètre n'est pas plus adapté pour expliquer l'évolution des caractéristiques du bain que le rapport P/v.

Ces résultats montrent l'insuffisance du paramètre densité d'énergie volumique pour expliquer ou prévoir les variations de dimensions du bain, et justifie le recours à des modèles plus complexes pour représenter l'apport de chaleur fourni par le laser [Zhang 2019b].

3.6. Etude des structures de grain formées

Nous nous intéressons dans cette partie aux caractéristiques des grains formés, et plus particulièrement à leurs propriétés géométriques et cristallographiques. Ces informations nous permettront de mieux comprendre les mécanismes de solidification au cours du procédé LBM et de quantifier les caractéristiques des structures de grains en fonction des paramètres procédé.

3.6.1. Résultats obtenus

Afin d'obtenir des informations sur les structures de grains en trois dimensions, les divers échantillons étudiés (monocouches et cubes creux) ont été observés dans les trois directions principales de construction (*i.e.* en coupes transverse, longitudinale et horizontale). Dans un premier temps, ils ont été analysés au microscope optique afin de recueillir les tendances principales liées aux grains, puis des analyses plus poussées ont été effectuées par EBSD permettant de fournir des données plus détaillées et quantitatives sur les caractéristiques des grains.

3.6.1.1. Caractéristiques générales des grains

L'observation au microscope optique (MO) des monocouches (lignes de fusion et monocordons) en coupe transverse a révélé la présence de grains colonnaires dans les cordons, orientés sensiblement perpendiculairement au contour de la zone fondue (Figure 3.25). De plus nous pouvons constater que les grains se sont formés par croissance épitaxiale à partir des grains initialement présents dans le substrat (zones pointillées blanches sur la Figure 3.25).

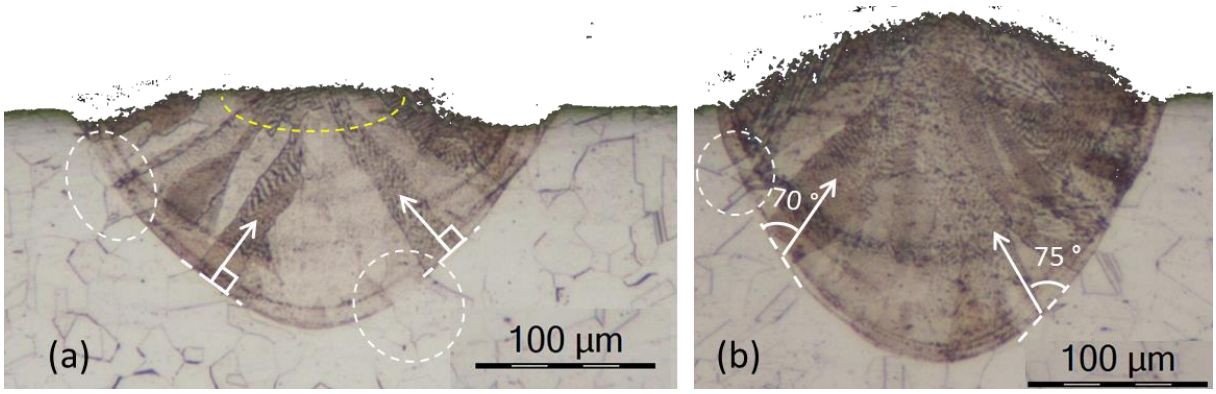


Figure 3.25. Microscopies optiques (x200) des coupes transverses : (a) d'une ligne de fusion obtenue pour une puissance de 400 W et une vitesse de 310 mm.s^{-1} et (b) d'un monocordon obtenu pour une puissance de 600 W et une vitesse de 400 mm.s^{-1}.

Sur les images obtenues en vue de dessus (Figure 3.26 (b)), nous retrouvons aussi la formation des grains par prolongement de ceux situés dans le substrat (zones pointillées noires), et pouvons observer la présence de grains plus petits localisés au centre du cordon. Ces grains d'apparence équiaxe, correspondent en réalité à la section de grains colonnaires orientés dans la direction verticale (zone pointillée jaune sur la Figure 3.25 (a)). Les coupes longitudinales ont montré une fois de plus que les grains du cordon se forment par croissance épitaxiale à partir des grains du substrat,

et que ces grains croissent ensuite dans des directions relativement normales à l'interface solide/liquide (Figure 3.26 (a)). Il est important de remarquer que l'observation des grains en vue de dessus et en coupe longitudinale est effectuée à titre indicatif car il est impossible de connaitre avec exactitude la localisation du plan observé. Sur la Figure 3.26 (a) par exemple, les variations de hauteur du cordon observées entre la partie droite et la partie gauche de l'image proviennent probablement du fait que le plan observé n'est pas parallèle au plan de déplacement du laser.

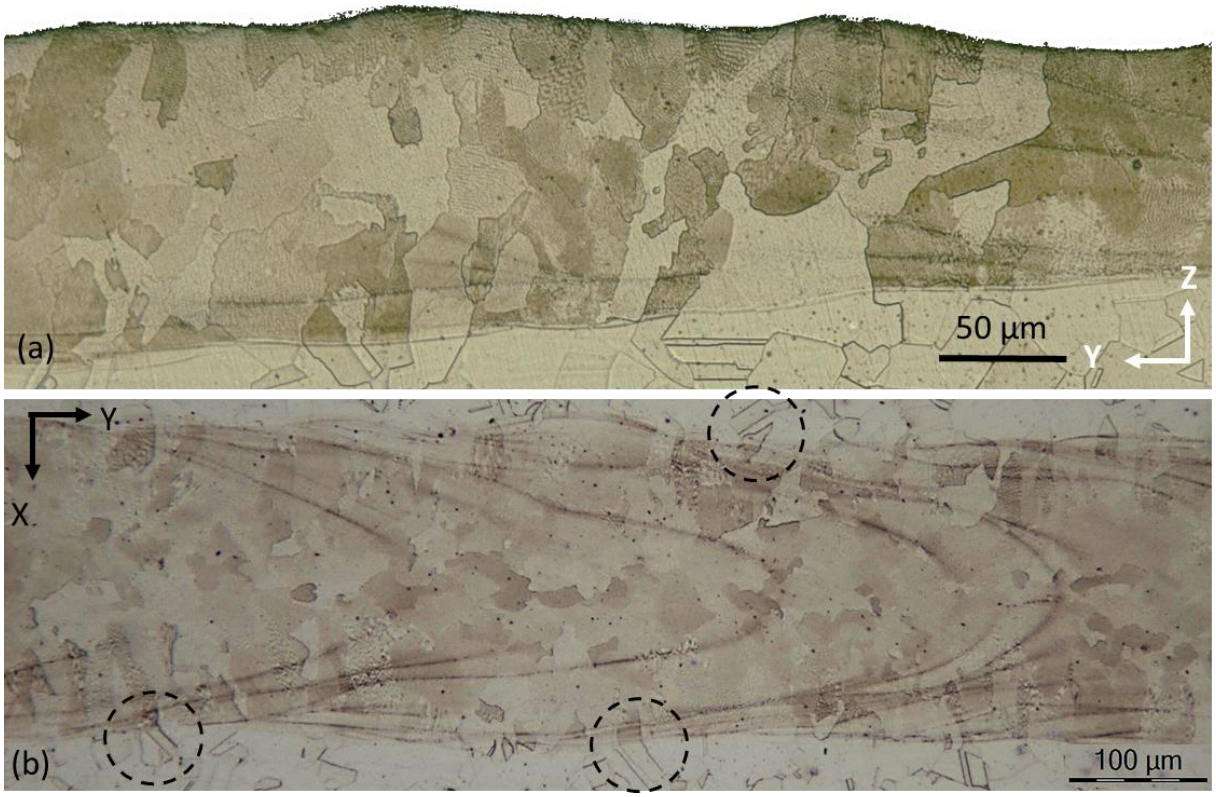


Figure 3.26. Microscopies optiques des monocordons formés à 400 W et 400 mm.s^{-1} (a) en coupe longitudinale (x700) et (b) en vue de dessus (x100).

En comparant de façon détaillée les caractéristiques des grains observés dans le cas des monocordons et des lignes de fusion (Figure 3.25), il apparait que les grains sont davantage orientés dans la direction de construction (direction verticale) dans le cas des monocordons que dans le cas des lignes de fusion, où les grains sont quasiment perpendiculaires à l'interface substrat/zone fondue.

L'étude des cubes creux nous a permis de confirmer les caractéristiques principales des grains obtenues précédemment dans le cas des monocouches. Tout d'abord, l'observation des faces du cube visibles sur les images (a-b) de la Figure 3.27, met en évidence l'aspect colonnaire des grains, orientés dans la direction de construction de la pièce et légèrement inclinés vers la gauche (*i.e.* selon la direction de lasage). Par ailleurs sur ces mêmes images il apparait clairement que l'aspect colonnaire des grains provient du fait que la croissance se fait par épitaxie à partir des grains des couches précédentes, puisque nous pouvons voir que la plupart des grains se prolongent à travers plusieurs dizaines de couches. Nous pouvons également remarquer que les grains situés à proximité des coins sont plus larges que dans le reste de la face. Ceci peut s'expliquer par le fait que le laser ralentissant au moment du changement de trajectoire, la densité d'énergie apportée est plus élevée dans cette zone et donc le refroidissement plus lent, laissant ainsi plus de temps aux grains pour

croître. Enfin, en comparant les microscopies (a) et (b) de la Figure 3.27, nous pouvons constater que la structure granulaire n'évolue pas de manière significative entre le bas et le haut de la pièce.

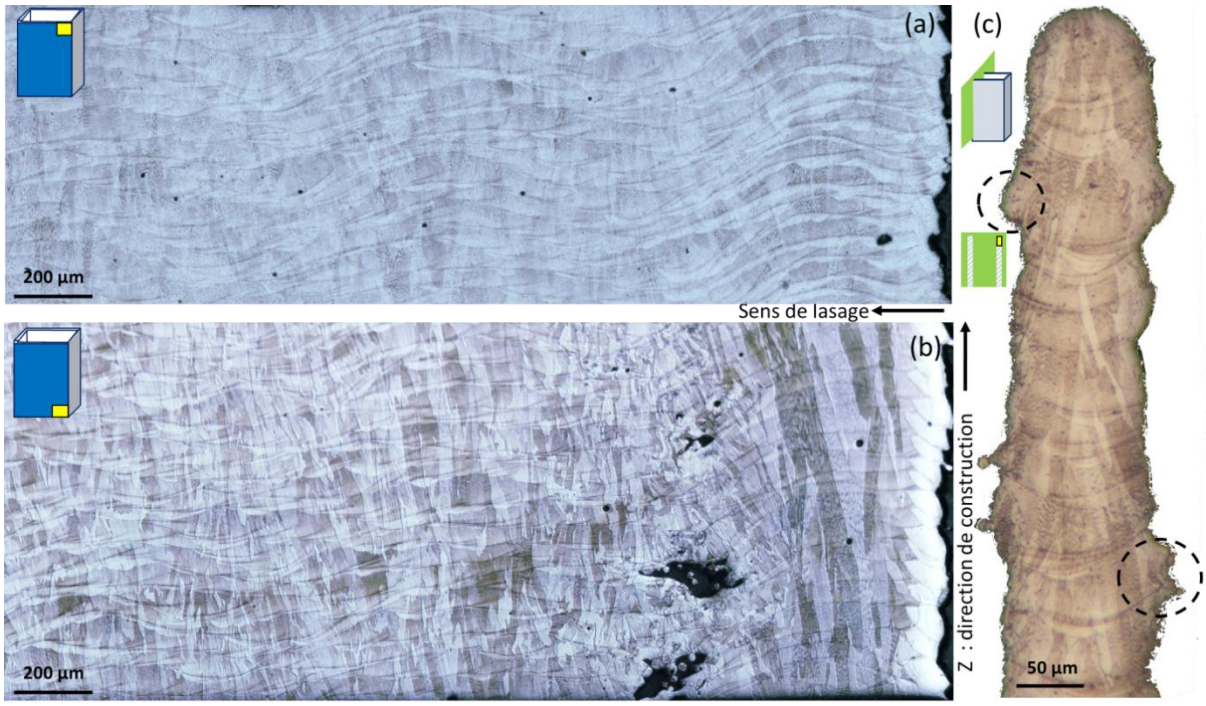


Figure 3.27. Microscopie optique d'un cube creux (x200) : vue de face (a) partie haute et (b) partie basse, et (c) en coupe transverse. Les rectangles jaunes représentent la localisation de la zone observée

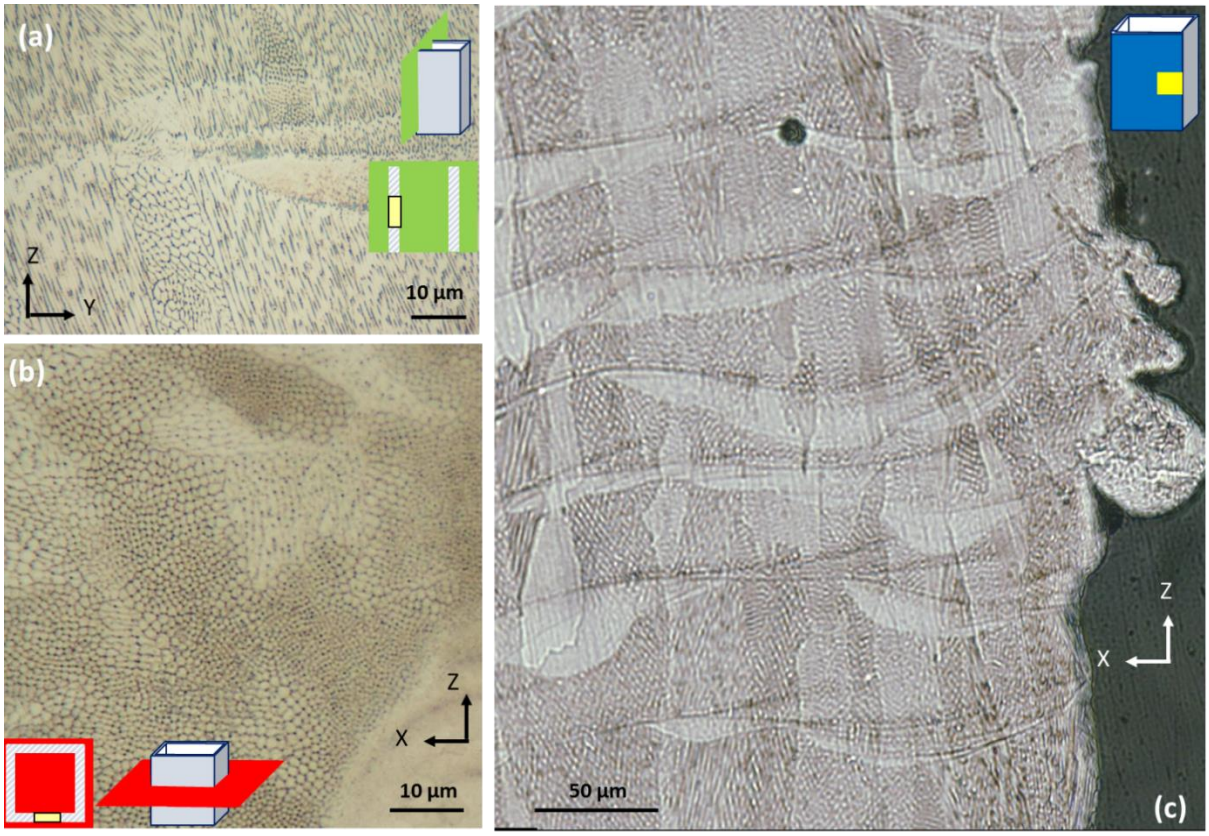


Figure 3.28. Sous-structures granulaires observées par microscopie optique des cubes creux : (a) en coupe transverse (x1000), (b) en coupe horizontale (x500) et (c) dans le plan longitudinal (x800). Le rectangle jaune visible sur chacune des figures représente schématiquement la localisation de la zone observée.

Les coupes transverses des cubes creux (*i.e.* perpendiculaires à la direction de lasage) confirment la présence de grains colonnaires, dont la croissance se poursuit à travers plusieurs couches, selon la direction de construction et légèrement orientés vers le centre du cordon (Figure 3.27 (c)). Sur cette même figure, nous pouvons également observer la présence de particules de poudre non fondues englobées dans le bain, agissant comme substrat solide à partir duquel peuvent croître de nouveaux grains (zones pointillées).

Des observations à plus fort grossissement des échantillons nous ont également permis, dans le cas des monocouches comme des multicouches, de remarquer la présence de sous-structures granulaires dont la taille caractéristique est de l'ordre du micron. Sur la Figure 3.28 sont visibles les sous-structures formées dans les trois directions principales des cubes creux. Nous pouvons remarquer qu'elles sont présentes à l'intérieur de l'ensemble des grains, et qu'elles sont de formes différentes en fonction de la direction d'observation. Sur la Figure 3.28 (b), correspondant à une coupe normale à la direction de construction (coupe horizontale), ces sous-structures s'apparentent plutôt à des cellules de forme quasi-circulaire. En coupe transverse (Figure 3.28 (a)), les sous-structures observées sont plus allongées dans des directions légèrement inclinées par rapport à l'axe de construction, et présentent parfois des morphologies quasi dendritiques. Des structures moins allongées, semblables à des alvéoles sont également observées dans ce plan de coupe. Les mêmes observations peuvent être faites dans le plan longitudinal (Figure 3.28 (c)). Nous pouvons donc déduire de ces observations que les sous-structures observées sont composées de cellules colonnaires orientées dans la direction du plus fort gradient (vertical ou légèrement désorienté par rapport à l'axe vertical). Les structures cellulaires quasi-circulaires observées dans le plan normal à la direction de construction correspondent alors aux sections transverses de ces cellules, orientées perpendiculairement au plan de coupe, ou avec une légère désorientation, générant ainsi des sections un peu moins circulaires et plus alvéolaires remarquées localement. Cette sous-structure cellulaire caractéristique des structures de solidification obtenues lors de la fabrication de pièces en 316L par procédé LBM, plus ou moins orientée selon la direction de construction, a été observée dans de nombreux travaux antérieurs [Liu 2018b, Andreau 2019, Arısoy 2019, Bertoli 2019, Chniouel 2019].

3.6.1.2. Cartographies EBSD et caractéristiques dimensionnelles des grains

Afin d'obtenir des informations plus précises et quantitatives sur les caractéristiques des grains (taille et rapport de forme), certains de nos échantillons ont été observés au MEB pour être soumis à une analyse EBSD (*cf*. 3.4.3). Dans le cas des monocouches, nous nous sommes intéressés aux lignes de fusion et aux monocordons réalisés avec la 4ème paramétrie ($P = 400$ W et $v = 400$ mm.s^{-1}) ainsi qu'aux monocordons construits avec la 5ème paramétrie ($P = 600$ W et $v = 400$ mm.s^{-1}). Des cartographies EBSD des plans principaux (coupes longitudinale, transverse et horizontale) ont été effectuées pour ces trois configurations afin d'obtenir un aperçu en 3D des grains une fois les différents plans étudiés. Certaines parties des cubes creux ont également été analysées par EBSD : les zones haute et basse de l'une des faces d'un des cubes ainsi qu'une coupe transverse de la partie supérieure d'une face. Pour ces analyses, les grains sont définis avec un angle de désorientation inter-granulaire minimum fixé à 10° [Wang 2018]. Cette limite permet de ne pas prendre en compte les faibles désorientations entre cellules voisines au sein d'un même grain (sous joints de grain), dont les parois présentent des densités de dislocations plus élevées [Chniouel 2019]. Une fois effectuées, les cartographies EBSD nous fournissent des informations relatives aux grains, en particulier leur taille et rapport de forme ainsi que leur orientation cristallographique. Ces dernières seront discutées dans la partie 0.

La Figure 3.29 montre des exemples de cartographies EBSD obtenues dans les trois plans de coupe d'un monocordon. Sur ces cartographies sont retrouvées les caractéristiques des grains recueillies sur les microscopies optiques, à savoir la présence de grains colonnaires, orientés relativement perpendiculairement à l'interface entre le substrat et la zone fondue et ayant cru par épitaxie à partir des grains partiellement fondus du substrat. Au centre du cordon de la coupe horizontale (Figure 3.29 (a)), nous pouvons également noter la présence de petits grains de forme plus équiaxe. Cependant, l'observation des grains formés dans les coupes transverse et longitudinale nous permet de conclure que ces grains d'aspect équiaxe correspondent en réalité à la section des grains colonnaires observés dans les coupes longitudinale et transverse. Cette conclusion est en accord avec les observations préalablement effectuées par microscopie optique (*cf.* 3.6.1.1).

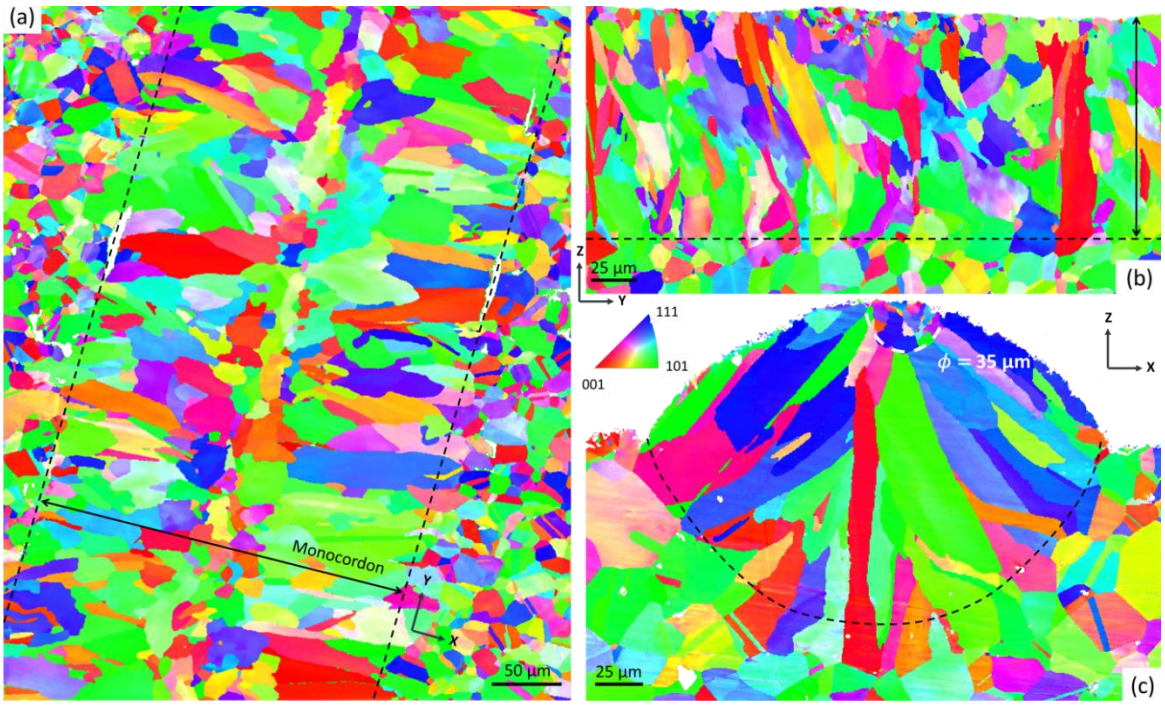


Figure 3.29. Cartographies EBSD colorées selon les couleurs standards IPF par rapport à l'axe Z d'un monocordon réalisé avec la 5ème paramétrie (600 W et 400 mm.s^{-1}). (a) Vue de dessus, (b) coupe longitudinale et (c) coupe transverse. Les zones pointillées noires correspondent aux contours du monocordon

Nous pouvons également remarquer dans les coupes longitudinale et transverse la présence localisée de grains de petites dimensions (Figure 3.29 (b) et (c)). La forme circulaire et la taille (35 µm environ) des zones concernées peuvent laisser supposer qu'il s'agit de particules de poudre piégées dans la partie supérieure du cordon.

Les répartitions des tailles et des rapports de forme des grains en zones fondues des trois configurations monocouches étudiées sont présentées sous forme d'histogramme sur la Figure 3.30 et la Figure 3.31 respectivement. Les données relatives au substrat sont également visibles sur ces deux figures. L'étude des tailles et rapports de forme des grains présents dans le substrat nous permettra notamment de modéliser les structures de grains initiales de nos simulations (Chapitre 4). Les tailles indiquées dans les histogrammes de la Figure 3.30 correspondent à la surface des grains mesurée dans chaque plan de coupe. Les rapports de forme indiqués dans Figure 3.31 correspondent au ratio entre le grand et le petit axe de l'ellipse de Legendre associée à la surface de chaque grain dans le plan considéré. Les valeurs moyennes de tailles de grains et de rapports de forme mesurées sont rassemblées dans le Tableau 3.7. Signalons que les grains dont la surface est inférieure à 50 µm² n'ont pas été pris en compte dans le calcul des tailles et des rapports de forme moyens.

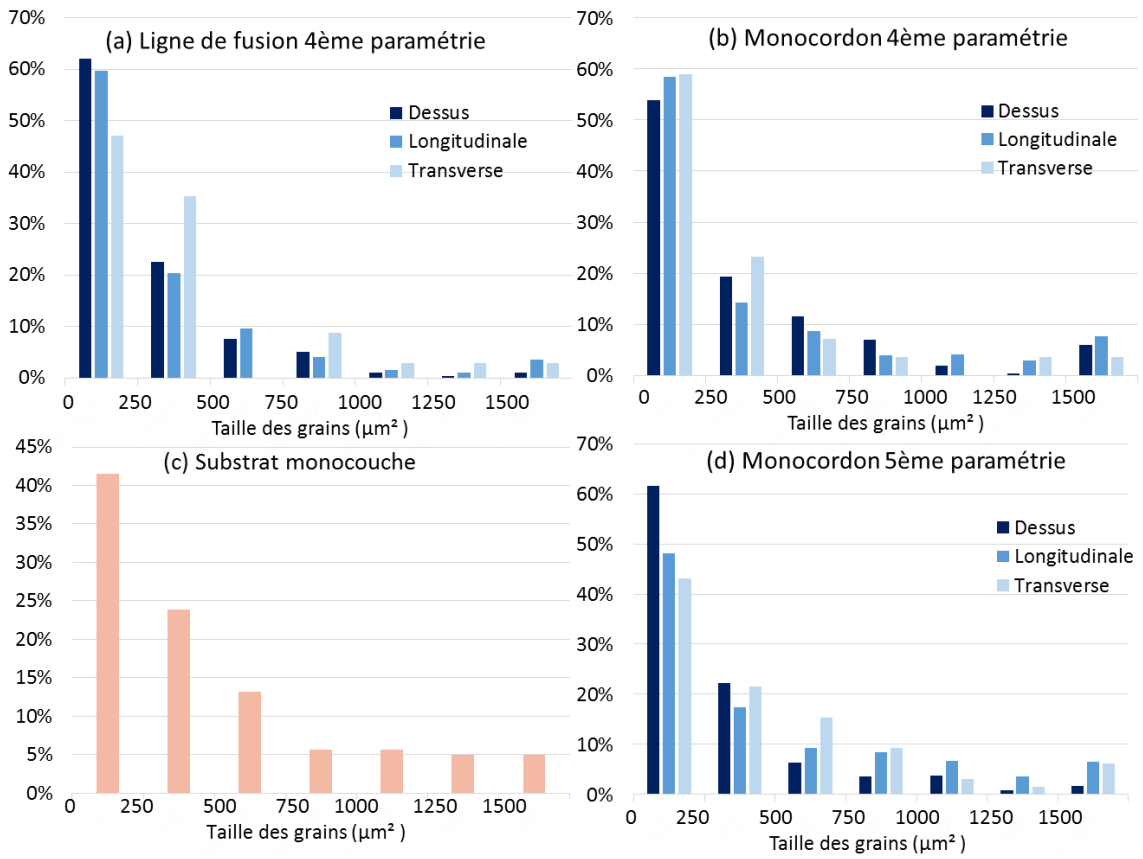


Figure 3.30. Répartition des tailles de grains [µm²] obtenues expérimentalement à l'issue des analyses EBSD

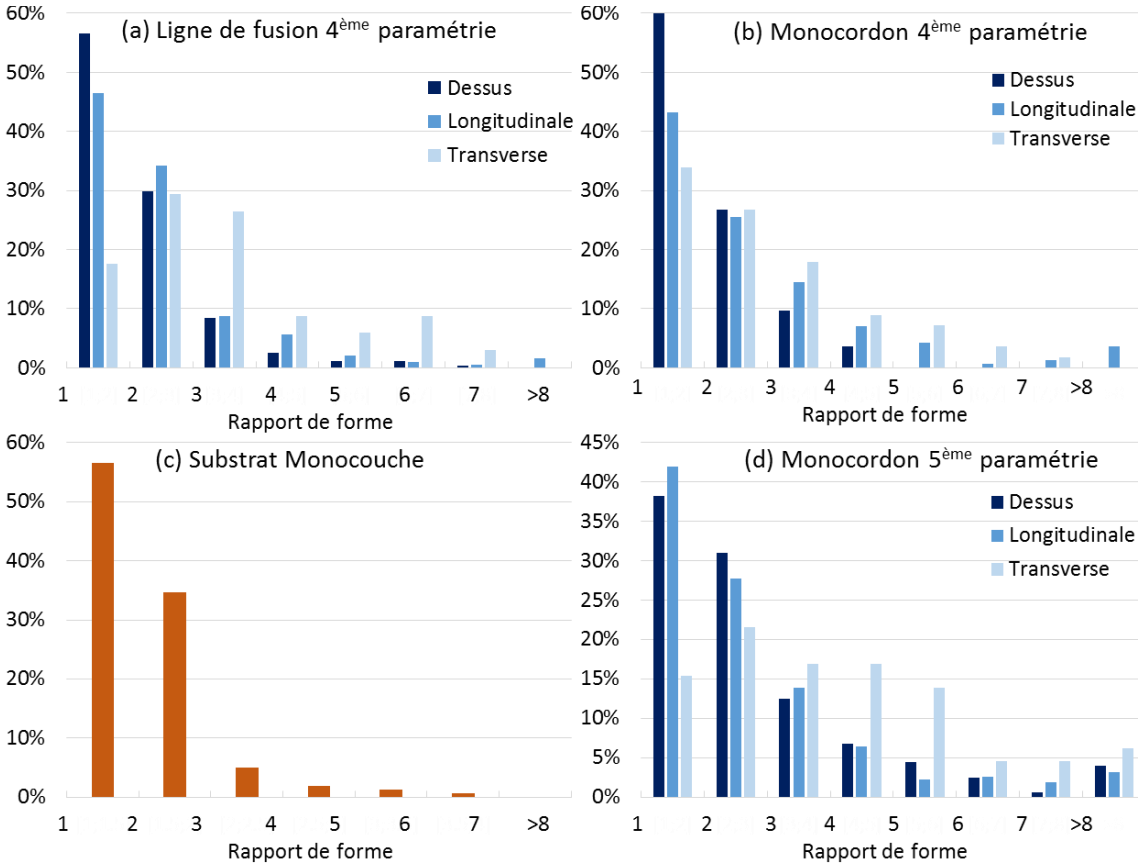


Figure 3.31. Répartition du rapport de forme des grains obtenus pour les différentes configurations étudiées

Tableau 3.7. Valeurs moyennes des tailles de grains et des rapports de forme calculées pour les différents échantillons étudiés. NGA correspond au Nombre de Grains Analysés, $\bar{S}$ à la surface moyenne et $\overline{RF}$ au rapport de forme moyen

		Coupe horizontale	Coupe longitudinale	Coupe transverse
Substrat	NGA	159		
	$\bar{S}$ (µm²)	509		
	$\overline{RF}$	1,5		
Ligne de fusion	NGA	357	258	34
	$\bar{S}$ (µm²)	225	268	380
	$\overline{RF}$	2,3	2,4	3,4
Paramétrie 4	NGA	269	311	56
	$\bar{S}$ (µm²)	348	498	376
	$\overline{RF}$	2,1	2,9	3,1
Paramétrie 5	NGA	634	420	65
	$\bar{S}$ (µm²)	242	411	498
	$\overline{RF}$	2,9	2,7	4,1

La répartition de taille des grains du substrat (Figure 3.30 (c)) montre que plus de 40 % d'entre eux présentent une surface inférieure à 250 microns, la taille moyenne étant de 509 microns (Tableau 3.7). Ces grains ont une forme relativement équiaxe, puisque pour plus de 90 % d'entre eux le rapport de forme est inférieur à 3, avec un rapport de forme moyen de 1,5. Signalons que les grains du substrat sont fortement maclés, et que nous avons choisi de ne pas prendre en compte les désorientations associées à ces macles dans le calcul des tailles de grain et des rapports de forme. La répartition des tailles de grains dans les zones fondues des trois configurations analysées sont assez similaires (Figure 3.30). Nous pouvons constater dans les trois cas, et quelle que soit la coupe analysée, une plus grande proportion de grains de taille inférieure à 250 microns que dans le substrat (50 % environ). Bien que présentant de fortes variations selon le plan de coupe étudié ou les conditions de fabrication, les grains des différentes zones fondues sont systématiquement plus petits que ceux du substrat (Tableau 3.7). Les rapports de forme des grains de la zone fondue sont en revanche plus élevés que ceux des grains du substrat, du fait de l'aspect colonnaire des grains observés, avec des valeurs moyennes allant de 2,1 à 4 selon les configurations et les plans d'observation (Tableau 3.7).

Sur la Figure 3.32 (a) sont représentées les différentes zones du cube creux analysées par EBSD, à savoir les coins supérieur gauche et inférieur droit en vue de face, et une coupe transverse localisée dans la partie haute du cube. Les cartographies obtenues sont visibles sur les images (b à d) de la Figure 3.32, et sont colorées selon les couleurs IPF standards par rapport à la direction de construction de la pièce (*i.e*. selon l'axe Z). Là encore, les mêmes caractéristiques de grains que celles observées à partir des micrographies optiques sont retrouvées, c'est-à-dire des grains colonnaires orientés selon la direction verticale, dont la longueur est très supérieure à la hauteur des couches. La Figure 3.32 (b) nous permet également de remarquer la présence de petits grains aléatoirement orientés au niveau de la surface de la dernière couche déposée, ainsi que la présence de particules de poudre partiellement fondues (zones pointillées noires). Une particule de poudre non fondue

englobée par le bain liquide est également visible sur la coupe transverse du monocordon (Figure 3.32 (c), zone pointillée), autour de laquelle peuvent être observés des grains de petites dimensions, orientés aléatoirement. Enfin, nous pouvons constater qu'au niveau de la jonction entre les deux faces du cube creux (à gauche de l'image sur la Figure 3.32 (b)), les grains sont moins allongés selon la direction de construction.

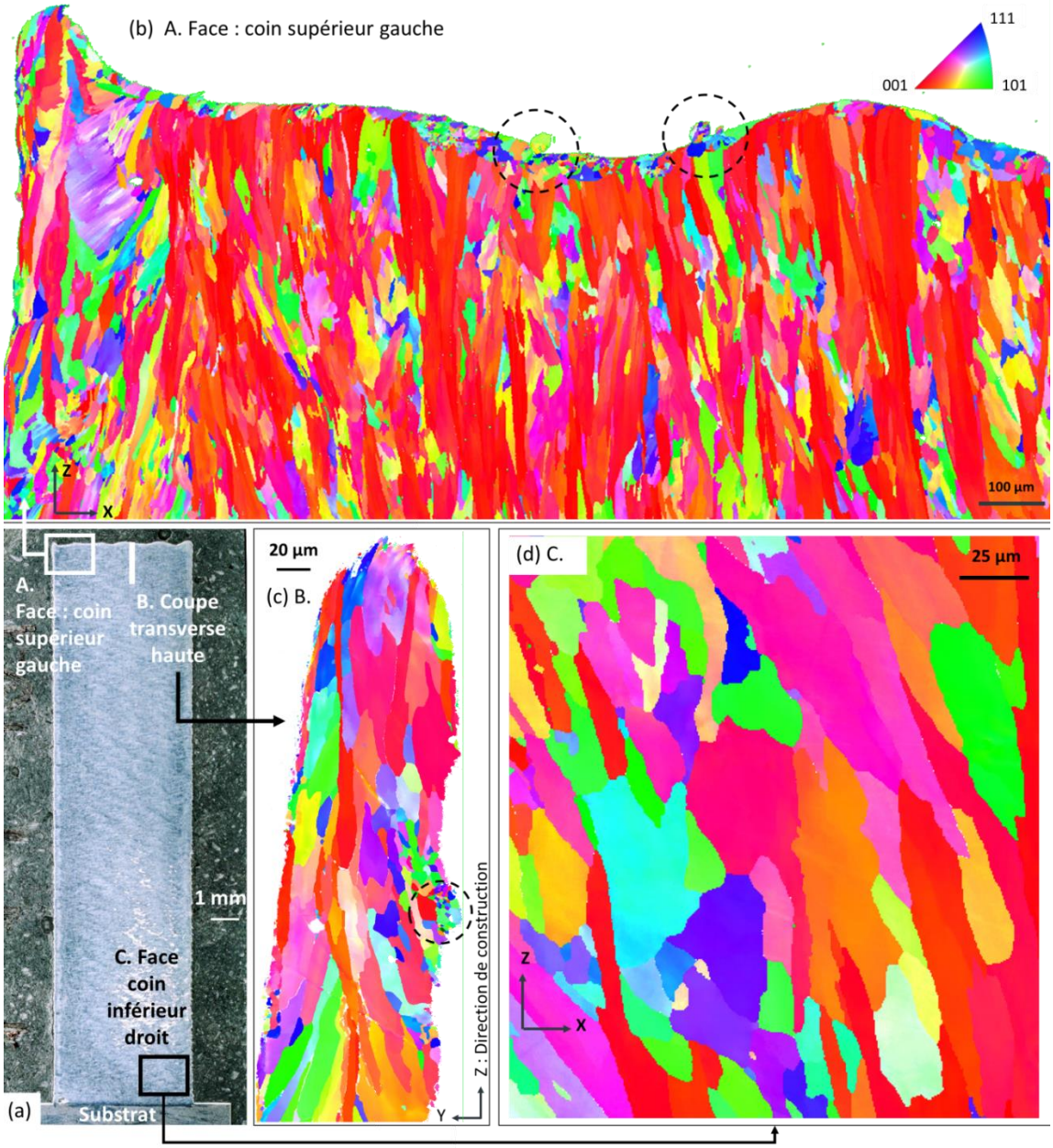


Figure 3.32. (a) Macrographie de la face du cube creux étudiée montrant les zones analysées pas EBSD (x30). (b-d) Cartographies EBSD des différentes zones, colorées selon les couleurs standards IPF par rapport à la direction de construction de la pièce.

La Figure 3.33 montre les distributions de tailles et de rapports de forme des grains dans les trois zones analysées (Figure 3.32 (a)). Les valeurs moyennes calculées sont aussi rassemblées dans le Tableau 3.8. Nous pouvons constater que les rapports de forme des grains sont relativement élevés dans les cubes creux par rapport à ceux obtenus pour les monocouches. Cette constatation est cohérente avec les observations faites en microscopie optique (Figure 3.27) montrant la présence de grains colonnaires se prolongeant sur plusieurs dizaines de couches, et par conséquent beaucoup

plus allongés que ceux formés dans les monocouches. Nous pouvons également observer sur la Figure 3.33 (b) que le rapport de forme est plus élevé et la surface moyenne des grains plus faible au niveau du haut de la face qu'en bas de celle-ci. Cette observation montre que les grains s'étrécissent et deviennent de plus en plus élancés à mesure que la pièce se construit. Enfin, nous pouvons remarquer que le rapport de forme moyen en coupe transverse (située dans la partie haute du cube) est également élevé (4,1), mais moins cependant que dans la vue de face, ce qui caractérise une structure granulaire dominée par la présence de grains colonnaires, résultat en accord avec les observations faites par microscopie optique (Figure 3.19 et Figure 3.27 (c)). La surface moyenne de grains calculée est également plus faible dans cette coupe qu'en vue de face, ce qui pourrait être lié à la légère inclinaison des grains dans la direction de lasage.

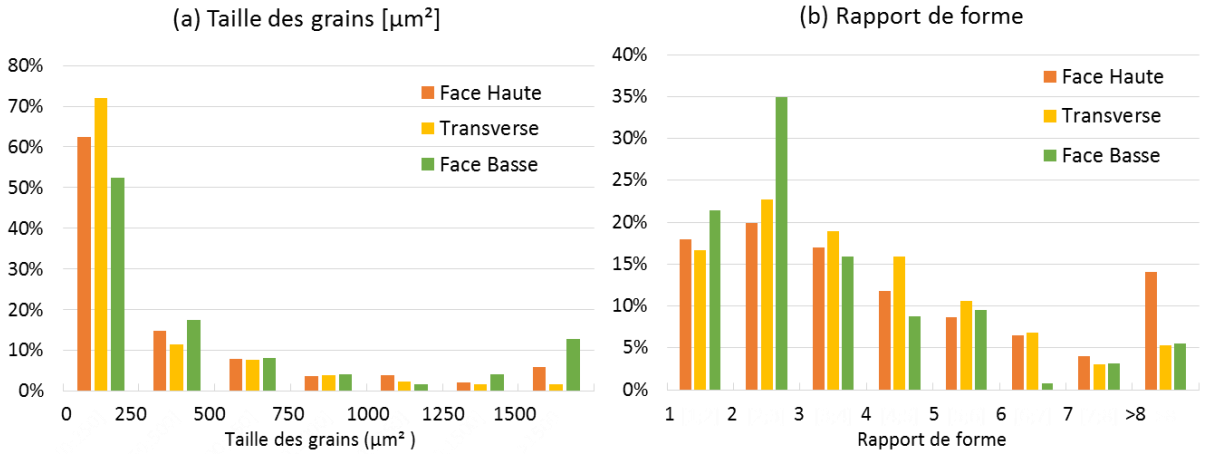


Figure 3.33. Répartition (a) de la taille et (b) du rapport de forme des grains analysés par EBSD dans les trois zones étudiées des cubes creux

Tableau 3.8. Valeurs moyennes des tailles de grains et des rapports de forme calculées dans les différentes zones du cube creux analysées par EBSD

	Face basse	**Face haute**	**Coupe transverse**
Nombre de grains analysés	127	2360	133
Surface moyenne (µm²)	653	463	250
Rapport de forme moyen	3,6	4,8	4,1

3.6.1.3. Caractéristiques cristallographiques

Les analyses EBSD décrites dans la partie précédente permettent également de connaitre les orientations cristallographiques des grains. De plus, les figures de pôles directes et inverses associées aux cartographies viennent compléter ces informations en mettant en évidence la présence d'une texture éventuelle dans le matériau, révélant une direction préférentielle de croissance.

Les cartographies EBSD dans les trois plans de coupe du monocordon construit avec la 5ème paramétrie ont été présentées sur la Figure 3.29. La Figure 3.34 quant à elle montre les cartographies EBSD des coupes transverses de la ligne de fusion et du monocordon obtenus avec la 4ème paramétrie. Sur l'ensemble de ces cartographies, les couleurs caractéristiques de l'orientation cristallographique des grains par rapport à l'axe Z des éprouvettes sont assez bien réparties, ce qui indique l'absence de texture marquée dans les structures de grains formées dans les lignes de fusion et les monocordons. Sur les coupes transverses et horizontales, nous pouvons toutefois constater en

périphérie des zones fondues la prédominance des couleurs verte et bleue, ce qui signifie que les directions <101> et <111> sont alignées avec l'axe Z dans ces zones. Par conséquent, les directions <100> sont inclinées par rapport à l'axe Z, et correspondent sensiblement à la direction normale à l'interface séparant le substrat de la zone fondue en périphérie du bain. À l'inverse, au niveau du centre des cordons, nous pouvons observer davantage de grains colorés en rouge, rose ou violet, couleurs caractéristiques de grains dont les directions <100> sont orientées verticalement, et donc normales à l'interface zone fondue/substrat.

Sur la Figure 3.35 sont présentées de nouveau les cartographies EBSD du cube creux analysé, avec en plus les figures de pôles associées à chacune des zones d'observation. Sur la cartographie du coin supérieur gauche (Figure 3.35 (b)), le rouge apparait de façon évidente comme la couleur prédominante, indiquant que les directions cristallographiques <100> des grains sont majoritairement alignées avec l'axe Z. De plus, la figure de pôle associée projetant les directions <100> parallèlement à la face observée (plan (Z, X)), montre une densité plus importante selon la direction de construction, caractérisée par les zones rouges au niveau des extrémités de l'axe Z.

La figure de pôle inverse représentant la direction de construction (Z) dans le repère du cristal montre quant à elle une forte densité au niveau de la pointe du triangle [100], ce qui signifie que l'axe Z est fortement aligné avec les directions <100> des grains. Enfin les sillons verts observés sur les trois figures de pôles sont caractéristiques d'une distribution d'orientations de cristaux dont l'unique degré de liberté est une rotation autour de l'axe de construction de la pièce. L'ensemble de ces constatations nous permet de conclure qu'il existe dans le matériau une forte texture avec des directions <100> majoritairement orientées selon l'axe Z. Sur la Figure 3.35 (b), nous pouvons également constater qu'au niveau de la jonction entre les deux faces du cube creux (à gauche de l'image), la forte texture <100> selon Z est beaucoup moins marquée. Par ailleurs, la désorientation interne de ces grains, caractérisée par des variations de couleur à l'intérieur d'un même grain, est beaucoup plus marquée dans cette zone que dans le reste de la cartographie.

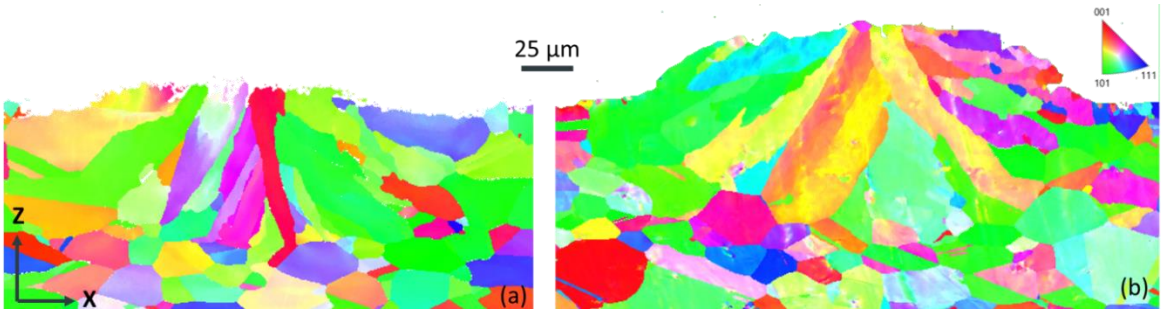


Figure 3.34. Cartographies EBSD des coupes transverses des cordons effectués avec la 4ème paramétrie (400 W et 400 mm.s^{-1}) : (a) ligne de fusion et (b) monocordon

Afin d'étudier l'évolution des structures de grain au cours de la construction de la pièce, une cartographie de cette même face a été effectuée, au niveau du coin inférieur droit cette fois (Figure 3.35 (d)). Nous constatons que la couleur rouge reste prédominante bien que la part des autres couleurs soit plus importante que dans le cas du coin supérieur gauche. La figure de pôle associée à cette cartographie représentant les directions <100> dans le plan parallèle à la face met en évidence un fort alignement de ces directions avec la direction de construction (axe Z). Cependant, nous constatons que cet alignement est légèrement désaxé vers la direction de lasage (axe X). Les figures de pôles inverses montrent également que l'axe Z est légèrement décalé par rapport à la direction [001] du cristal avec en plus des densités d'orientation maximales plus faibles, et une répartition d'orientations plus diffuse que dans le haut de la pièce. La Figure 3.35 (c) correspond à une cartographie EBSD de la partie supérieure de la face du cube creux observée en coupe transverse. Les

figures de pôle associées montrent une texture assez similaire à celle observée dans la partie basse de la face, avec des directions <100> majoritairement orientées selon une direction légèrement inclinée par rapport à l'axe Z.

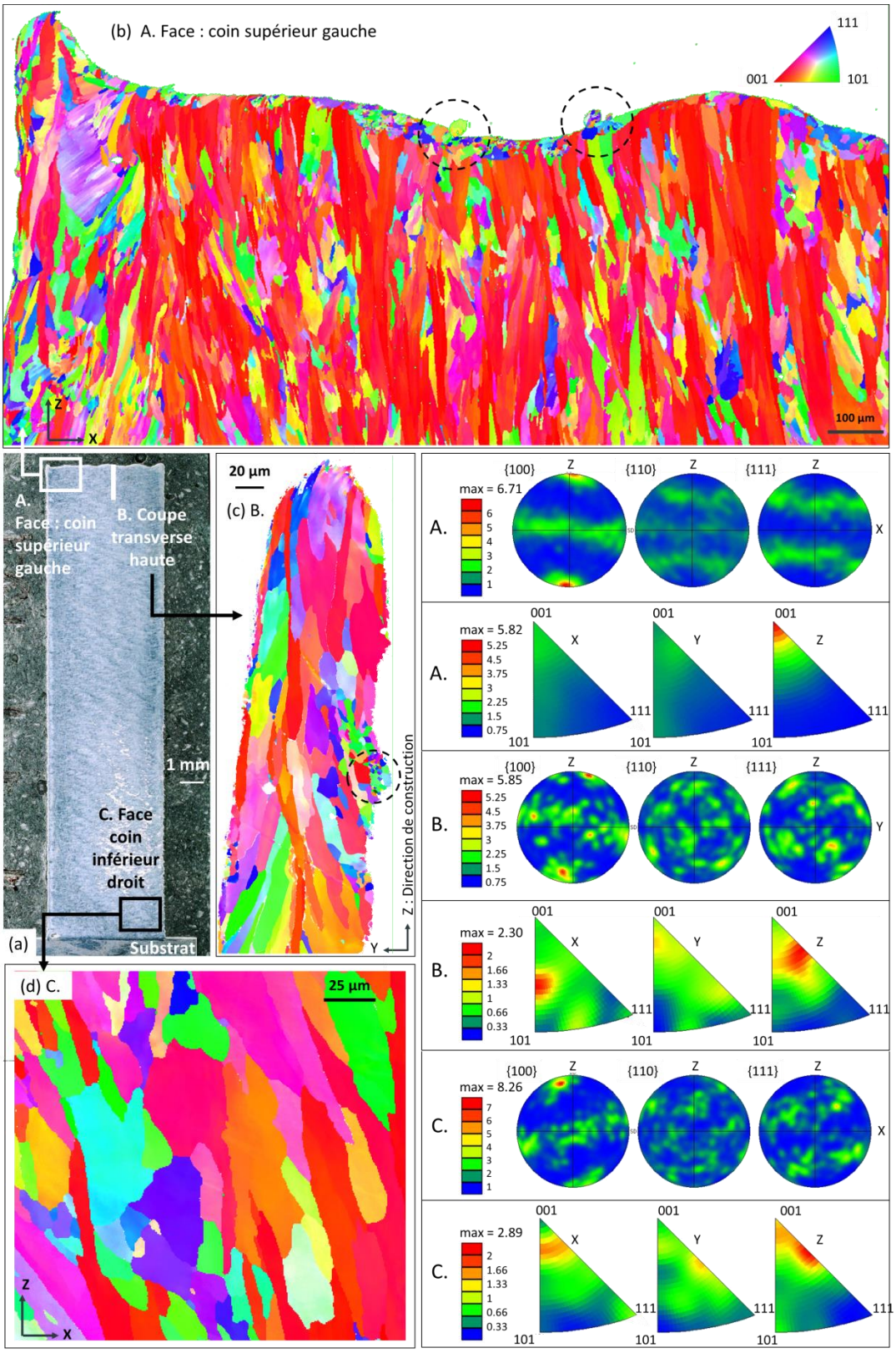


Figure 3.35. (a) Microscopie optique globale du cube creux et des zones analysées pas EBSD (x30). (b-d) Cartographies EBSD des zones visibles sur la vue globale, colorées selon les couleurs standards IPF par rapport à la direction de construction de la pièce. (A.-C.) figures de pôles directes et inverses associées.

3.6.2. Analyses et discussion

3.6.2.1. Morphologie des grains

Les divers échantillons étudiés dans ce chapitre font principalement état de grains colonnaires, principalement orientés dans la direction de construction de la pièce, et formés par épitaxie à partir des grains initialement présents dans le substrat. Ces résultats sont en accord avec la plupart des études de la littérature (*cf.* partie 1.3). Néanmoins, nous avons également constaté localement la présence de petits grains similaires à des grains équiaxes. C'est le cas notamment aux bords des pièces fabriquées, où des particules de poudre sont piégées dans le cordon comme le montrent les images (b-c) de la Figure 3.32 et l'image (c) de la Figure 3.28. Tout comme le substrat sert de base solide à la croissance des grains du cordon, ces particules de poudre semblent jouer le rôle de substrat solide pour la croissance de petits grains qui se forment alors par prolongement épitaxial des grains composant les particules de poudre. Dans une étude menée en 2018, les chercheurs de la Ruhr-Universität de Bochum [Mutke 2018] ont également remarqué que les particules de poudre partiellement fondues agissent comme des sites pour la germination hétérogène de nouveaux grains dans les cordons. De petits grains peuvent également être observés sur la vue de face du cube creux (Figure 3.32 (b)) au niveau de la surface des dernières couches déposées, dans des zones où aucune particule de poudre n'est observée. Ces grains de très petite dimension et de forme équiaxe, semblent résulter du phénomène de germination de surface. L'observation de ces grains uniquement au niveau de la dernière couche pourrait s'expliquer par la fusion partielle de la couche précédente au cours de la fabrication d'une nouvelle couche, conduisant à la disparition de ces petits grains situés en surface, puis à leur remplacement par des grains colonnaires croissant par épitaxie à partir des grains présents dans les couches précédentes.

La présence des grains équiaxes observés au centre des monocordons de la cinquième paramétrie (Figure 3.29) pourrait aussi être expliquée par la germination de nouveau grains au niveau de la surface. Dans un premier temps, nous avions considéré que ces grains provenaient de particules de poudre non fondue tombées dans le bain ou bien correspondaient aux sections de certains grains colonnaires orientés perpendiculairement au plan de coupe observé. Cependant, leur formation pourrait également s'expliquer par un phénomène de germination à l'arrière du bain dû à la surfusion constitutionnelle élevée à cet endroit, causée par la différence entre la vitesse de déplacement du front solide-liquide et celle du phénomène de diffusion chimique (*cf*. partie 1.4.2.2). Cette observation est souvent faite dans le cas d'aciers obtenus par soudage [Kou 2002], procédé pour lequel les vitesses de déplacement sont bien inférieures à celles appliquées en LBM. Le fait que ces grains ne soient observés que dans les monocordons obtenus avec la 5ème paramétrie, pour laquelle la puissance fournie par le laser est supérieure à celle de la 4ème paramétrie, confirme cette hypothèse. En effet, la germination de grains équiaxes augmente avec la surfusion constitutionnelle, et donc avec la diminution du rapport entre le gradient thermique G à l'interface solide/liquide et la vitesse de croissance V. La 5ème paramétrie, correspondant à une vitesse identique mais à une puissance 50 % plus élevée que celle de la quatrième paramétrie, devrait conduire à des vitesses de croissance identiques, mais à un gradient plus faible. Le rapport G/V est donc plus faible pour la 5ème paramétrie, favorisant la formation de nouveaux grains équiaxes. Les grains visibles au centre de la vue de dessus (Figure 3.29 (a)) seraient alors un mélange de petits grains ayant germé et de grains colonnaires formés par croissance épitaxiale à partir du substrat, desquels seule l'extrémité serait visible.

3.6.2.2. Taille et rapport de forme

Afin de modéliser de façon réaliste la structure de grains initiale du substrat, nous avons étudié la taille des grains présents dans le substrat des monocouches. Ces grains ont une morphologie relativement équiaxe, avec un rapport de forme moyen de 1,5 (Tableau 3.7). La prise en compte ou

non des macles à l'intérieure des grains composant le substrat modifie cependant grandement les caractéristiques de ces grains. En effet, en considérant les macles comme désorientations caractéristiques faisant partie intégrante des grains, nous avons mesuré des tailles moyennes de grains dans le substrat de 509 µm² (Tableau 3.7), alors qu'en les considérant comme joints de grain, la taille moyenne calculée n'est plus que de 232 µm², ce qui représente une diminution de plus de 50 %. De plus, le rapport de forme moyen obtenu est alors de 2,7, ce qui signifie que les grains du substrat sont plus petits mais plus allongés avec la prise en compte des macles comme joints de grains. Les macles étant quasiment absentes des grains des zones fondues, les caractéristiques de grains mesurées sont similaires avec et sans prise en compte des macles dans la zone fondue.

En comparant les tailles et rapports de forme des grains de la ligne de fusion et du monocordon obtenus avec la 4ème paramétrie, plusieurs constatations peuvent être faites. Les plans des coupes longitudinales et horizontales ne pouvant pas être localisés avec précision et n'étant pas parfaitement parallèles à l'axe de déplacement du laser, nous avons choisi de comparer les caractéristiques des grains dans les coupes transverses uniquement. Tout d'abord, la comparaison des histogrammes (a) et (b) de la Figure 3.30 indique qu'en coupe transverse, le pourcentage de grains inférieurs à 500 µm² est identique dans le cas de la ligne de fusion et dans celui du monocordon (82 %). Par conséquent, les tailles moyennes de grains sont identiques entre la ligne de fusion et le monocordon construits avec la 4ème paramétrie (Tableau 3.7), ce malgré des distributions de tailles assez différentes. La comparaison des rapports de forme en coupe transverse montre que les grains de la ligne de fusion sont plus élancés (moins larges et plus allongés) que ceux du monocordon (Figure 3.31 et Tableau 3.7). Une explication possible à cette observation vient du fait que pour les deux types de cordons, l'évacuation de la chaleur se fait principalement par conduction à travers le substrat. Or dans le cas des lignes de fusion, l'interface liquide/solide (liquide/substrat) est plus grande que celle formée dans le cas des monocordons où le bain présente en plus une interface liquide/gaz plus étendue. Cette interface entre le liquide et l'air environnant dissipant la chaleur beaucoup moins efficacement que le substrat, le taux de refroidissement est alors plus élevé dans la configuration ligne de fusion que dans celle monocordon. Le taux de refroidissement étant plus important pour un même apport de chaleur, la structure des lignes de fusion est alors plus fine que celle du monocordon, conformément au diagramme de Kurz (Figure 1.14 (a)). Ces observations sont cohérentes avec celles de Mutke et ses collègues, montrant que les grains formés dans un monocordon 316L sont plus petits que ceux formés dans un cordon fabriqué dans un lit de poudre « libre », c'est-à-dire sans matériau dense [Mutke 2018]. Dans cette étude, les structures de grains les plus fines sont donc observées pour la configuration monocordon (*i.e*. celle avec substrat) puisque c'est celle permettant la meilleure évacuation de la chaleur. Une autre explication à l'obtention d'un taux de refroidissement moins important dans le cas des monocordons est la formation d'un plus grand volume de liquide, qui pourrait conduire à des gradients plus faibles.

L'analyse conjointe des monocordons des 4ème et 5ème paramétries nous permet également d'établir plusieurs constats. Tout d'abord, la taille moyenne des grains, résumée dans le Tableau 3.7, est plus importante lorsque la puissance est plus élevée, principalement à cause d'une plus faible proportion de grains de taille inférieure à 250 µm^2. Ensuite, le rapport de forme calculé en coupe transverse met en évidence des grains beaucoup plus allongés dans le monocordon de la 5ème paramétrie que dans celui de la 4ème. En effet sur les histogrammes (b) et (d) de la Figure 3.31 nous pouvons constater que plus de 60 % des grains du monocordon de la 5ème paramétrie ont un rapport de forme supérieur à 3 contre 40 % seulement pour ceux du monocordon de la 4ème. L'accroissement de la surface des grains lorsque la puissance augmente parait donc principalement liée à une augmentation de leur longueur.

Cette augmentation de la longueur des grains colonnaires peut s'expliquer par la profondeur plus grande du bain formé avec une puissance plus élevée (Tableau 3.5).

Ce constat est en accord avec les observations faites par des chercheurs polonais de l'université de Wrocław ayant étudié les liens entre paramètres opératoires et propriétés des pièces fabriquées [Kurzynowski 2018]. En effet, ces chercheurs ont montré que l'augmentation de la puissance conduit à l'accroissement du rapport de forme des grains formés.

3.6.2.3. Texturation du matériau

Les résultats obtenus dans les parties supérieure et inférieure du cube creux nous permettent de constater qu'une texture caractérisée par des directions <100> orientées selon l'axe Z est présente dès les premières couches fabriquées, et que cet alignement devient plus marqué dans la hauteur de la pièce (Figure 3.35). L'observation de cette texture concorde avec les résultats de Kurzynowski et Bertoli [Kurzynowski 2018, Bertoli 2019], ayant également constaté une forte texture <100> dans la direction de construction. Les figures de pôles visibles sur la Figure 3.35 sont d'ailleurs semblables à celles observées dans l'étude de Kurzynowski, avec cependant des valeurs de densités d'orientations maximales plus basses dans le cadre de notre étude. Par ailleurs, l'étude conduite par Bertoli a également constaté qu'il n'existe pas de différence significative dans l'orientation des grains entre le haut et le bas de la pièce. Les travaux d'Andreau et al. [Andreau 2019] ont également mis en avant le fait que dans le cas de pièces multicouches, la texture <100> selon Z n'est obtenue que dans le cas de pièces fabriquées par la superposition de monocordons (cas de notre cube creux), contrairement aux pièces composées de plusieurs cordons adjacents dans chaque couche, qui dévoilent des motifs plus variés (en chevron par exemple). La formation de la texture <100> selon Z peut s'expliquer par l'étude du gradient thermique. Le refroidissement s'effectuant principalement par conduction de la chaleur du bain à travers le substrat, le gradient thermique est alors principalement orienté dans la direction de construction, favorisant la croissance colonnaire des grains dans cette direction.

Contrairement aux constatations précédemment faites sur les cubes creux, aucune texture n'est observée dans le cas des éprouvettes monocouches fabriquées. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que l'évacuation de la chaleur s'effectue principalement par conduction dans toutes les directions du substrat dans le cas des monocordons (*i.e.* dans le cas des premières couches fabriquées), contrairement aux pièces multicouches pour lesquelles la dissipation de la chaleur s'opère essentiellement à travers la pièce fabriquée et donc verticalement. Par conséquent, l'orientation verticale du gradient thermique constatée dans le cas des multicouches n'est pas retrouvée dans le cas des monocouches où le gradient est orienté selon la normale à l'interface entre la zone fondue et le substrat, direction variant donc en fonction de la position considérée. Ainsi, dans le cas de monocouches, seuls les grains situés au centre du bain sont susceptibles de présenter une texture <100> selon l'axe Z, révélée par la présence de grains de couleur rouge au niveau du centre du bain. Sur la cartographie EBSD de la coupe transverse de la ligne de fusion visible sur la Figure 3.34 (a), nous pouvons remarquer que le grain rouge (*i.e.* dont les directions <100> sont alignées avec l'axe Z) situé initialement dans le substrat au niveau du bas du bain est celui dont la progression a été maximale au cours de la croissance. Ce grain a d'ailleurs bloqué la progression de celui situé à sa gauche, coloré en vert et pourtant positionné de façon plus centrale. Nous pouvons donc supposer que plusieurs couches sont nécessaires à la mise en place de la texture généralement observée en LBM, et donc à l'alignement du gradient thermique avec la direction de construction. Ces constatations concordent avec celles faites sur les cubes creux dans le paragraphe précédent, montrant une texture moins prononcée au niveau du bas de la pièce que dans les dernières couches fabriquées.

3.6.3. Conclusion

3.6.3.1. Caractéristiques du bain et des grains formés

La réalisation de cordons monocouches avec instrumentation optique ainsi que la fabrication des cubes creux nous a permis d'étudier les caractéristiques du bain fondu formé au cours du procédé LBM ainsi que celles des grains obtenus à l'issue de la fabrication des échantillons.

Concernant le bain fondu, ses dimensions (longueur, largeur et profondeur) ont été mesurées pour les différentes configurations testées. Il a été constaté que le bain formé en LBM est arrondi et allongé dans la direction de balayage du laser, témoignant d'un bain formé par conduction. Localement la présence de particules de poudre partiellement fondues ayant été englobées dans le bain est aussi observée. Nous avons également observé une hauteur du bain supérieure à celle d'une couche déposée, ce qui signifie qu'une partie au moins des couches précédentes est refondue dans le cas des multicouches, assurant la jonction entre les couches successives. Par ailleurs, une augmentation de la largeur du bain au cours des premières couches fabriquées a été constatée, augmentation se stabilisant progressivement à mesure de la construction de la pièce. Quant aux grains, l'ensemble des cordons fait état de grains colonnaires, plus ou moins fortement orientés dans la direction de construction de la pièce, formés par épitaxie à partir des grains présents dans le substrat ou plus localement, à partir des grains composant les particules de poudre non fondues piégées dans le cordon. De petits grains s'apparentant à des grains équiaxes sont également observés ponctuellement. La plupart du temps, ces grains sont ceux composant les particules de poudre partiellement fondues ayant été piégées dans le cordon, mais certains peuvent également correspondre à de nouveaux grains formés par germination au niveau de l'arrière du bain. Néanmoins, ces grains issus de la germination sont observés uniquement au niveau des dernières couches fabriquées, laissant alors supposer qu'ils sont refondus à chaque nouvelle couche fabriquée. Par conséquent, leur présence ne semble pas jouer de rôle déterminant dans la formation de la structure finale obtenue.

Enfin, une forte texturation du matériau, caractérisée par des directions cristallographiques <100> orientées majoritairement selon l'axe Z a été observée dans les cubes creux. De plus, l'observation de différentes zones du cube a permis de conclure que cette texture s'est formée dès les premières couches quoique moins marquée au niveau du bas de la pièce. A l'inverse, aucune texture n'a été observée dans la zone fondue des cordons monocouches. Cependant, nous avons tout de même pu constater que dans ces échantillons, les grains ayant leurs directions <100> alignées avec la direction de construction sont ceux dont la croissance a été la plus rapide au niveau du centre des cordons.

3.6.3.2. Evolution du bain et des structures de grains

Ces essais nous ont également permis de nous intéresser à l'influence de la poudre et des paramètres opératoires sur le comportement du bain et sur l'évolution des caractéristiques des grains.

Il a été constaté que l'augmentation de la densité volumique d'énergie, par augmentation de la puissance du laser ou diminution de la vitesse de balayage, entraine généralement une augmentation globale des dimensions du bain, bien que des exceptions soient remarquées en fonction des variations de P et v. Cependant, des bains de dimensions variées ont été observés pour des valeurs de densité volumique d'énergie constantes, mettant en évidence les limitations de l'utilisation de ce paramètre pour prédire les caractéristiques du bain fondu. Par ailleurs, à cause des capacités de transfert de chaleur et de dissipation de l'énergie différentes entre la poudre et le substrat, nous avons pu observer que le bain formé dans le cas des monocordons (*i.e.* avec couche

de poudre) est plus profond et allongé mais un peu moins large que celui formé directement sur le substrat (*i.e.* ligne de fusion) pour une même combinaison de puissance et vitesse.

Dans le cas de la fabrication de monocordons, l'étude des grains a révélé qu'à vitesse constante, l'augmentation de la puissance conduit à une augmentation de la taille des grains ainsi que de leur élancement. Par rapport aux grains observés dans les lignes de fusion et dans l'éventualité où des particules de poudre non fondues seraient projetées dans le bain fondu, la présence de poudre au cours de la fabrication favorise alors localement la formation de petits grains dans le cordon. Nous avons également pu constater une structure granulaire plus grossière dans le cas des monocordons que dans celui des lignes de fusion. Ce résultat peut s'expliquer par la présence du lit de poudre ainsi que la formation d'une zone de dénudation dans le cas des monocordons qui limitent l'évacuation de la chaleur, entrainant alors une diminution du taux de refroidissement. . Par ailleurs, l'évacuation de la chaleur se faisant principalement vers le substrat, nous avons pu remarquer que la direction de croissance des grains est légèrement désorientée par rapport à la normale du contour du bain (*i.e.* plus alignée avec l'axe vertical) dans le cas des monocordons, contrairement aux lignes de fusion pour lesquelles la croissance des grains se fait perpendiculairement à l'interface solide/liquide. Nous pouvons donc en conclure que la formation d'une zone de dénudation aux alentours du monocordon joue un rôle non négligeable dans la formation des structures de grains observées.

L'ensemble de ces informations nous permettra de modéliser le procédé de façon réaliste (définition de la source de chaleur, conditions aux limites prises en compte, choix des différents milieux considérés, structures de grains initiales du substrat) et nous aidera à identifier les phénomènes physiques à intégrer dans la modélisation. Ces données nous serviront également d'éléments de comparaison au moment de la validation expérimentale des simulations CAFE.

Chapitre 4 Simulation des lignes de fusion

4.1. Simulation du procédé 117
4.1.1. Domaine d'étude et maillage 117
4.1.2. Propriétés matériaux 118
4.1.3. Conditions initiales et aux limites 118
4.1.4. Apport de chaleur 119
4.1.5. Calibration de la source de chaleur 120
4.1.6. Champs de températures et de vitesses de solidification 123
4.1.7. Discussion 128
4.2. Simulation des structures de grains 130
4.2.1. Initialisation du domaine AC 130
4.2.2. Loi de croissance dendritique 131
4.2.3. Structures de grains simulées 132
4.3. Conclusion 140
4.3.1. Simulation du procédé 140
4.3.2. Structures de grains simulées 141

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la modélisation et aux simulations CAFE des lignes de fusion, qui pour rappel correspondent à des monocordons obtenus par tir laser direct sur le substrat (sans poudre). Pour cela, la simulation du procédé est présentée dans un premier temps puis la prédiction des structures de grains est détaillée dans un second temps. Par ailleurs, les résultats de simulation sont analysés et confrontés aux résultats expérimentaux dans chacune de ces deux parties. Afin d'étudier l'influence de la puissance et de la vitesse nous avons choisi de simuler les lignes de fusion obtenues avec les 2ème, 3ème et 4ème paramétries, rappelées dans le Tableau 4.1.

4.1. Simulation du procédé

L'aspect thermique des simulations est traité dans cette partie. Afin d'estimer les champs de températures pilotant les mécanismes de solidification et en particulier les gradients thermiques, la modélisation thermique du procédé doit intégrer :

- La géométrie des échantillons considérés ;
- Les propriétés matériaux ;
- Les conditions initiales et aux limites de l'échantillon avec son environnement (prise en compte de l'interface substrat-air) ;
- L'interaction laser-matière, responsable de la formation du bain liquide.

La prise en compte de ces éléments dans le modèle, adaptés à la configuration ligne de fusion est détaillée dans les sections 4.1.1 à 4.1.5. Dans la section 4.1.6 les champs de températures simulés ainsi que les grandeurs thermiques associées (gradient de température, taux de croissance) sont exposés. Enfin, l'analyse des résultats ainsi que les comparaisons avec les données expérimentales sont effectuées dans la section 4.1.7.

4.1.1. Domaine d'étude et maillage

Deux critères dictent le choix du domaine d'étude et donc le type et la taille des éléments définissant le maillage. Le premier concerne les éléments et impose que ceux-ci soient suffisamment fins pour pouvoir estimer de façon représentative la taille du bain liquide ainsi que les champs thermiques. Le second consiste à définir le domaine de façon à pouvoir réaliser des simulations en des temps de calculs raisonnables.

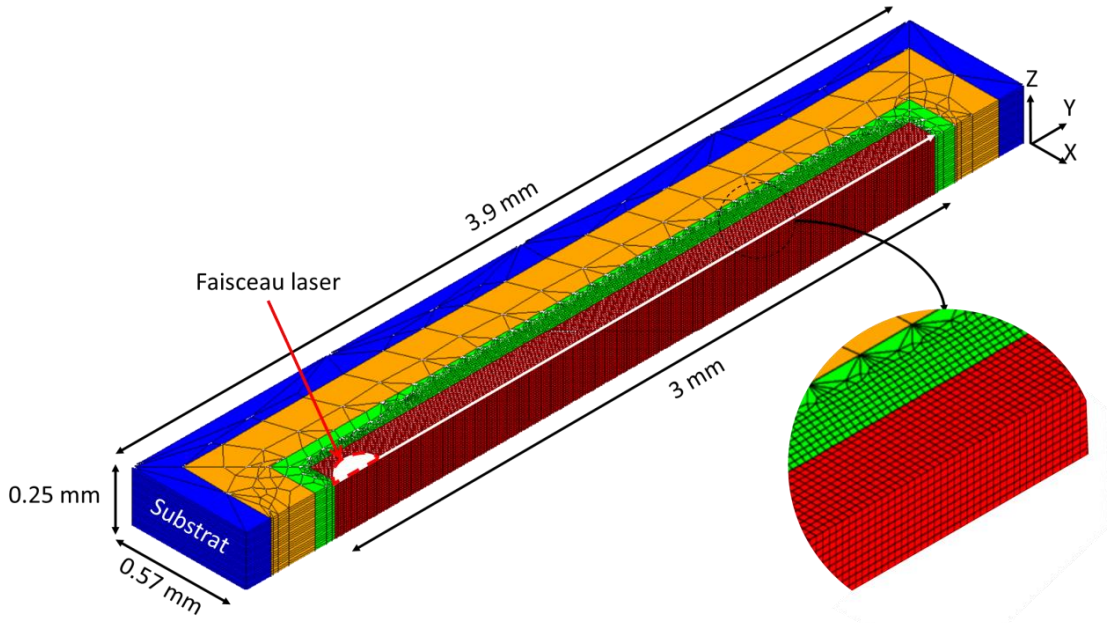


Figure 4.1. Géométrie et maillage élément fini représentant le substrat

Ces deux critères sont antinomiques puisque le premier impose un maillage raffiné dans la zone d'intérêt et donc un nombre élevé d'éléments alors que le deuxième entraine la limitation du nombre d'éléments composant le domaine. Un compromis doit donc être trouvé afin de remplir au mieux ces deux conditions. Le choix d'un maillage adaptatif [Chen 2016, Zhang 2018] est une des techniques permettant de répondre à cela. Dans le cadre de ces travaux de thèse, nous avons opté pour une solution consistant à restreindre le domaine d'étude au voisinage de la zone d'intérêt. Cette démarche peut être adoptée dans la mesure où les conditions aux limites ne jouent qu'un rôle mineur sur les résultats simulés. Le nombre de Biot calculé dans la section 2.2.1.1 indique en effet que les échanges thermiques surfaciques jouent un rôle moindre par rapport à la conduction dans le solide, et cela malgré la faible épaisseur du substrat et indépendamment de ses larges longueur et largeur. De plus, bien que les lignes de fusion ne soient pas systématiquement centrées sur le substrat, les résultats expérimentaux révèlent une symétrie du bain dans le plan transverse. Seule une moitié du domaine réduit est alors modélisée, représentée sur la Figure 4.1. Les dimensions choisies pour le substrat sont une épaisseur de 0,25 mm, une longueur de 3,9 mm et une largeur de 0,57 mm. Le maillage est décomposé en plusieurs zones (représentées par différentes couleurs sur la Figure 4.1) caractérisées par des tailles et types d'éléments distincts, la zone centrale représentée en rouge étant constituée intégralement d'éléments cubiques de 5 µm de côté.

4.1.2. Propriétés matériaux

Comme présenté dans la section 2.2.2.5, pour résoudre l'équation de conservation d'énergie il est nécessaire de renseigner les propriétés des matériaux du système, à savoir leur capacité calorifique C_p (J.kg^{-1}.°C^{-1}), leur conductivité thermique λ (W.m^{-1}.°C^{-1}), leur masse volumique ρ (kg.m^{-3}) et leurs températures de liquidus et solidus, T_{Liq} et T_{Sol} (°C) respectivement. Dans le cadre de notre étude, nous nous intéressons à l'acier austénitique 316L. La configuration des lignes de fusion ne faisant intervenir le matériau que dans sa forme dense, à savoir substrat et pièce fabriquée, les propriétés matériaux proviennent des travaux de thèse de Depradeux [Depradeux 2004] et sont rassemblées en Annexe 1.

4.1.3. Conditions initiales et aux limites

L'équation de conservation de l'énergie (27) étant résolue en volume et les paramètres évoluant au cours du temps voire en fonction de la température pour certains, il est nécessaire de définir des conditions initiales et aux limites dans le modèle. Une température initiale de 20 °C est appliquée au début du calcul sur l'ensemble du système. Concernant les conditions aux limites, la convection avec l'air ambiant est prise en compte par application, sur la face supérieure du volume de matière modélisé, d'un flux de chaleur équivalent φ_{eq} défini tel que :

$$\varphi_{eq} = h_{eq} \,.\, (T_\infty - T) \tag{53}$$

avec h_{eq} coefficient d'échange équivalent en W.m^{-2}.°C^{-1} et T_∞ et T les températures externe et du système respectivement, exprimées en °C.

Le rayonnement n'est pas directement modélisé, mais son effet est pris en compte à travers le choix de la valeur du coefficient d'échange équivalent h_{eq}. La température externe T_∞ est fixée à 20 °C et considérée constante au cours du temps. Elle correspond à la température ambiante de la salle de manipulation dans laquelle se trouve le banc d'essai instrumenté. Le coefficient d'échange avec l'air est fixé à 10 W.m^{-2}.°C^{-1}. Rappelons que d'après le nombre de Biot précédemment calculé (*cf*. section

2.2.1.1), le choix de la valeur de ce coefficient d'échange ne devrait avoir qu'une très faible influence sur l'évolution des températures calculées au niveau de la surface du bain.

Seule une portion du substrat ayant été modélisée, une condition aux limites avec un coefficient d'échange plus élevé a été définie sur les autres faces du volume maillé, afin de modéliser le pompage thermique du substrat tout en s'affranchissant de la modélisation de son volume réel. Une étude préalable, basée sur la comparaison entre les champs thermiques obtenus avec différentes valeurs de coefficient d'échange et ceux obtenus en modélisant le volume réel du substrat, nous a conduit à choisir un coefficient h_{eq} de 10^3 W.m^{-2}.°C^{-1} sur ces faces.

4.1.4. Apport de chaleur

Excepté au cours de la phase d'amorçage, le faisceau laser interagit quasiment exclusivement avec le bain liquide au cours du procédé de fabrication des lignes de fusion. Dans le chapitre 3, nous avons montré que l'énergie fournie par le laser au bain est redistribuée dans le liquide, permettant ainsi la fusion du matériau et conduisant à des bains de fusion de taille et de géométries variées en fonction des paramètres procédé appliqués. Notre modèle étant purement thermo-conductif (pour rappel ce type de modèle a été choisi afin de répondre au critère limitant les temps de calculs), les variations de distribution de la chaleur dues aux écoulements au sein du bain liquide ne sont donc pas directement prises en compte. Afin de tout de même les intégrer de manière indirecte à la modélisation, l'énergie transmise par le laser est modélisée sous forme d'une distribution volumique de densité de puissance. Cette technique présente l'avantage de s'appuyer sur les caractéristiques géométriques des bains formés pour prendre en compte, à travers le choix des paramètres de la distribution, l'interaction laser-matière et les transferts de chaleur au sein du bain. Nous avons choisi d'utiliser le modèle de source de chaleur initialement proposé par Goldak [Goldak 1984]. De nombreuses études [Alhafadhi 2019, Gharib 2019, Kollár 2019] ont montré que des prédictions thermiques fiables pouvaient être obtenues en soudage en utilisant ce modèle de source.

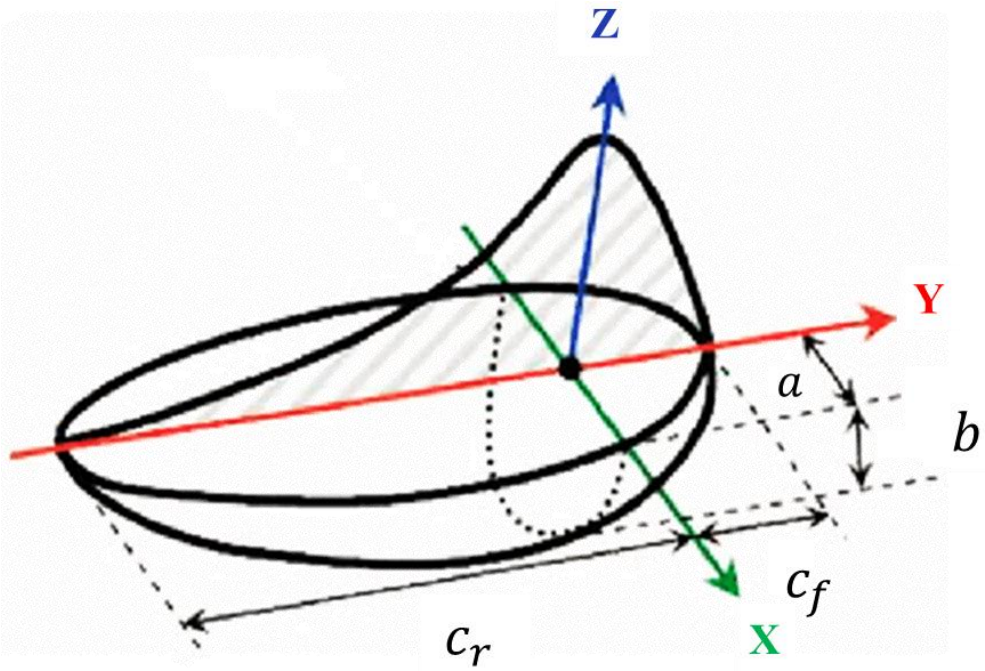


Figure 4.2. Représentation schématique de la source de chaleur volumique Goldak [Moradi 2016]

Ce modèle décrit l'apport de chaleur par une distribution volumique de densité de puissance, représentée sur la Figure 4.2, ayant la forme d'une double ellipsoïde : la première étant située à l'avant du faisceau laser et l'autre à l'arrière. Cette source est caractérisée par :

- Quatre paramètres géométriques représentés sur la Figure 4.2 : sa demi-largeur (a), sa profondeur (b) et les demi-longueurs avant et arrière de chaque ellipsoïde, c_f et c_r respectivement ;
- La puissance totale Q allouée au volume, correspondant à la puissance effective du laser, c'est-à-dire à la puissance du laser P, corrigée par son rendement η.

Le rendement permet de quantifier le transfert de la puissance du laser au bain liquide. Il dépend de nombreux paramètres complexes à intégrer au modèle (multi-réflexion, mouvements fluides dans le bain, interaction faisceau/liquide ou autres). L'adaptation de la valeur du rendement permet d'intégrer l'ensemble de ces phénomènes. Q est reliée aux paramètres géométriques caractérisant les distributions de densités volumiques de puissance à l'avant q_f, et à l'arrière q_r de la source de chaleur par les équations suivantes :

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{0}\left(q_f(x,y,z) + q_r(x,y,z)\right)dxdydz \tag{54}$$

$$y < 0 \quad q_r(x,y,z) = \frac{6\sqrt{3}Q\left(\frac{2}{1+\frac{c_r}{c_f}}\right)}{a.b.c_r.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2} + \frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_r}^2} + \frac{(z-z_0)^2}{{b_u}^2}\right)\right) \tag{55}$$

$$y > 0 \quad q_f(x,y,z) = \frac{6\sqrt{3}Q\left(\frac{2}{1+\frac{c_r}{c_f}}\right)}{a.b.c_f.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2} + \frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_f}^2} + \frac{(z-z_0)^2}{{b_u}^2}\right)\right) \tag{56}$$

Le choix des valeurs des cinq paramètres de ce modèle (les quatre paramètres géométriques plus le rendement η) est effectué en utilisant les essais instrumentés préalablement réalisés (3.3.1), et en particulier *via* l'observation de la forme et des dimensions du bain fondu formé au cours de la fabrication des lignes de fusion par LBM. L'étape de calibration à partir de la comparaison entre bains fondus expérimentaux et numériques est détaillée dans la section suivante.

4.1.5. Calibration de la source de chaleur

Comme présenté dans le Chapitre 1, les caractéristiques des structures de grains découlent directement des propriétés du bain fondu. Par conséquent, il est crucial de définir correctement le modèle de source de chaleur duquel vont dépendre les températures simulées.

Tableau 4.1. Paramétries retenues pour la simulation numérique des lignes de fusion

Paramétries	P (W)	v (mm.s^{-1})	E (J.mm^{-3})	P/v (Ws.mm^{-1})
2ème	320	400	45,27	0,8
4ème	400	400	56,59	1
3ème	400	310	73,02	1,29

Le modèle de source de chaleur doit être calibré. La littérature propose pour cela d'utiliser les paramètres caractéristiques de la géométrie du faisceau laser [DebRoy 2018]. Nous faisons donc le choix de définir c_r, c_f et a égaux au rayon du spot laser. Les lignes de fusion ayant été réalisées sur le banc d'essai instrumenté (3.1.1), le diamètre focal du faisceau laser est de 150 µm. Les valeurs des demi-longueurs et demi-largeur sont alors de 75 µm, ce qui conduit à l'égalité $a = c_f = c_r = 75$ µm. Des calculs préliminaires et la comparaison avec les résultats expérimentaux présentés au Chapitre 3 nous ont conduit à fixer le paramètre de profondeur b à 50 µm pour tous les calculs.

Une fois les paramètres géométriques définis, la calibration se fait par ajustement du seul rendement de la source, afin de retrouver des dimensions en surface de bain (largeur et longueur) identiques à celles mesurées, avec une marge d'erreur que nous avons fixé à 10 %. Cette marge nous parait acceptable car nous ne cherchons pas dans le cadre de cette thèse à reproduire la thermique du procédé parfaitement mais simplement à obtenir des champs thermiques réalistes, permettant par la suite de simuler les structures de grains formées au cours du procédé LBM.

Dans le cas du procédé de fusion laser sur lit de poudre, le rendement correspond à la proportion de l'énergie transmise au bain par le laser. Les valeurs rencontrées dans la littérature sont généralement comprises entre 30 et 50 % [Boley 2015]. Nous avons donc recherché dans cet intervalle les rendements les mieux adaptés pour obtenir un bon accord entre bains de fusion simulés et expérimentaux. Pour comparer les bains expérimentaux avec ceux issus de la simulation, l'hypothèse est faite que le bain fondu numérique est délimité par la surface correspondant à l'isotherme de liquidus ($T_{Liq} = 1456$ °C). Afin de facilement repérer le bain liquide dans la suite, l'échelle des figures présentant les champs de températures simulés est majorée par la température de liquidus.

Les premières colonnes du Tableau 4.2 donnent une comparaison pour la 3ème paramétrie des tailles de bain expérimentale et numérique obtenues avec deux valeurs de rendement différentes. Nous pouvons constater qu'un rendement de 0,4 permet d'obtenir une largeur de bain très proche de la largeur mesurée (moins de 3 % d'écart), mais que la longueur est inférieure de près de 13 % à la longueur mesurée. Une augmentation du rendement à la valeur de 0,43 permet d'obtenir un bain dont les longueur et largeur sont quasiment identiques à celles du bain expérimental, puisque l'erreur relative obtenue est inférieure à 4 %, et donc en dessous de l'erreur maximale que nous nous sommes fixée. Si nous comparons la profondeur de bain calculée avec cette valeur de rendement à la valeur obtenue expérimentalement en coupe transverse, nous pouvons remarquer qu'elle est légèrement supérieure, avec une différence de 7 %. La méthode de calibration des paramètres du modèle de source proposée, parait donc adaptée pour simuler des bains de tailles représentatives des bains réels.

Tableau 4.2. Dimensions expérimentales (Exp) et numériques (N) du bain fondu pour les trois paramétries étudiées

	Troisième paramétrie (400 W, 310 mm.s^{-1})			**Quatrième paramétrie (400 W, 400 mm.s^{-1})**		**Deuxième paramétrie (320 W, 400 mm.s^{-1})**	
Valeurs (µm)	Exp	N (η = 0.4)	N (η = 0.43)	Exp	N (η = 0.4)	Exp	N (η = 0.33)
Largeur	269	262	274	225	232	211	193
Profondeur	125	127	134	90	110	60	88
Longueur	872	761	839	710	741	500	500

Tableau 4.3. Paramètres retenus pour le modèle de source de chaleur pour les différentes paramétrie

Paramètres (µm)	a	b	c_f	c_r	Q (W)	$\eta^{2^{ème}}$	$\eta^{3^{ème}}$	$\eta^{4^{ème}}$
Valeurs	75	50	75	75	ηP	0.33	0.43	0.4

La même méthode est appliquée aux deuxième et quatrième paramétries, conduisant aux valeurs de rendement calibrées respectivement de 0,33 et 0,4. Les dimensions de bain fondu obtenues expérimentalement et numériquement sont indiquées dans le Tableau 4.2 pour ces deux paramétries. Pour la quatrième paramétrie, un très bon accord est constaté entre les largeurs et longueurs du bain expérimentales et numériques pour un rendement de 0,4 (erreur relative < 5 %). La profondeur du bain quant à elle est plus grande dans le bain simulé que dans celui obtenu expérimentalement (environ 20 % d'écart). Pour la seconde paramétrie, la longueur simulée (avec un rendement de 0,33) est parfaitement identique à la longueur mesurée, et la largeur inférieure de 9 %. En revanche, la profondeur du bain simulé est bien plus élevée que la profondeur mesurée (de 45 % environ).

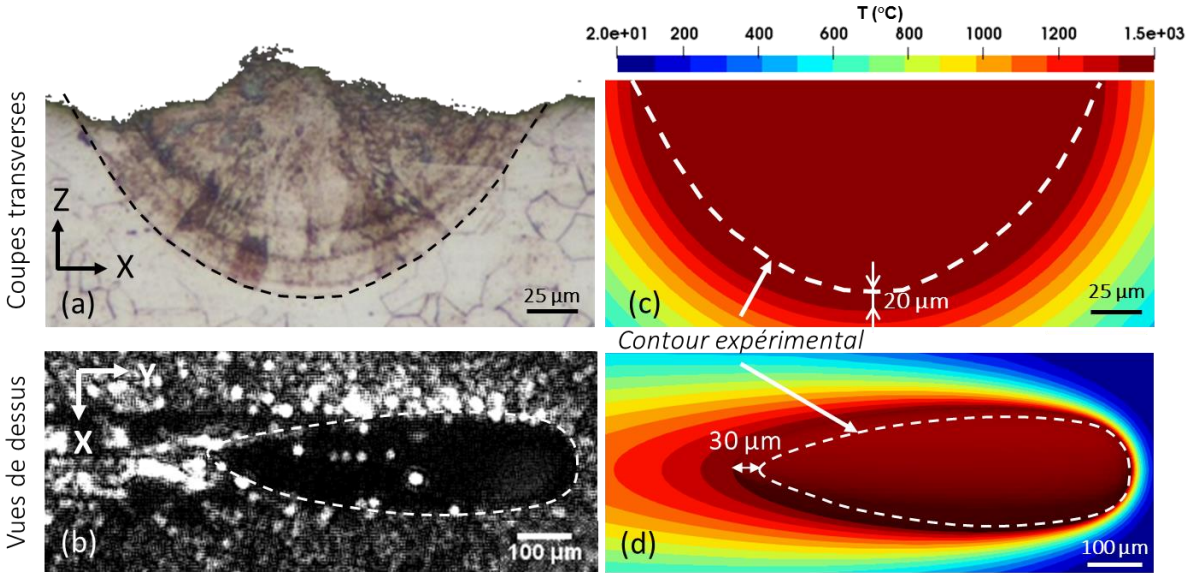


Figure 4.3. Bain fondu obtenu (a-b) expérimentalement et (c-d) numériquement en coupe transverse et en vue de dessus pour la quatrième paramétrie

Dans le cas des paramétries 2 et 4, pour lesquelles le bain est moins profond, la simulation numérique donne donc des profondeurs trop élevées, d'autant plus que le bain observé expérimentalement est peu pénétrant. Dans le cas de la simulation, les dimensions de bain obtenues montrent qu'il est plus arrondi que celui observé dans les essais, comme nous pouvons le constater sur les images (a) et (c) de la Figure 4.3. Cette différence peut s'expliquer par la non prise en compte des mouvements fluides au sein du bain dans notre modèle, de par sa nature purement conductive. En particulier, l'effet Marangoni produit par la dépendance de la tension superficielle (2.2.1.3) à la température, et connu pour modifier de façon considérable la géométrie du bain, n'est pas modélisé. Ainsi, en raison du phénomène de conduction qui a tendance à favoriser cette forme arrondie de bain de fusion observée en coupe transverse, il est difficile de retrouver des formes de bain peu pénétrantes, ou au contraire très pénétrantes avec ce type d'approche, même en modifiant les paramètres géométriques du modèle de source de chaleur. Les valeurs retenues à l'issue de l'étape de calibration du modèle de source de chaleur pour les trois paramétries sont rassemblées dans le

Tableau 4.3.

En comparant les trois paramétries simulées, nous pouvons constater qu'il a fallu augmenter le rendement pour retrouver les dimensions de bain réelles en surface lorsque l'énergie linéique augmente (*cf.* Tableau 4.1 et

Tableau 4.3). Ce résultat peut s'expliquer par le fait qu'un apport d'énergie plus élevé génère un volume de matière fondue plus important, entrainant ainsi une meilleure redistribution de la chaleur sous l'effet des mouvements de convection au sein du liquide. Cette répartition de la chaleur plus homogène au sein du liquide permet alors, pour une puissance donnée par le laser, de former un bain plus grand. La hausse du rendement résultant de la calibration de la source de chaleur lorsque l'énergie linéique augmente pourrait ainsi permettre la prise en compte indirecte des effets de la convection sur les échanges thermiques au sein du bain fondu. L'augmentation du rendement à plus forte énergie linéique peut cependant également s'expliquer par une meilleure absorption de la puissance du laser par la partie liquide due à une agitation plus importante de la surface libre.

4.1.6. Champs de températures et de vitesses de solidification

Dans cette section sont présentés les résultats obtenus à l'issue des simulations des lignes de fusion, une fois la calibration du rendement effectuée. Nous nous intéressons ici aux caractéristiques des champs de températures simulés, et en particulier au gradient thermique G (°C.m^{-1}) ainsi qu'au taux de croissance V (m.s^{-1}) le long du front de solidification, ces deux grandeurs physiques contrôlant les caractéristiques (morphologie et taille) des structures de grains formées (*cf.* 1.2.4). Rappelons que la solidification s'effectue le long d'un front correspondant à la surface délimitant la partie arrière du bain fondu. Elle démarre en périphérie au niveau de la section transverse où le bain est le plus large, puis se termine au centre du bain en surface (au niveau de la pointe arrière du bain).

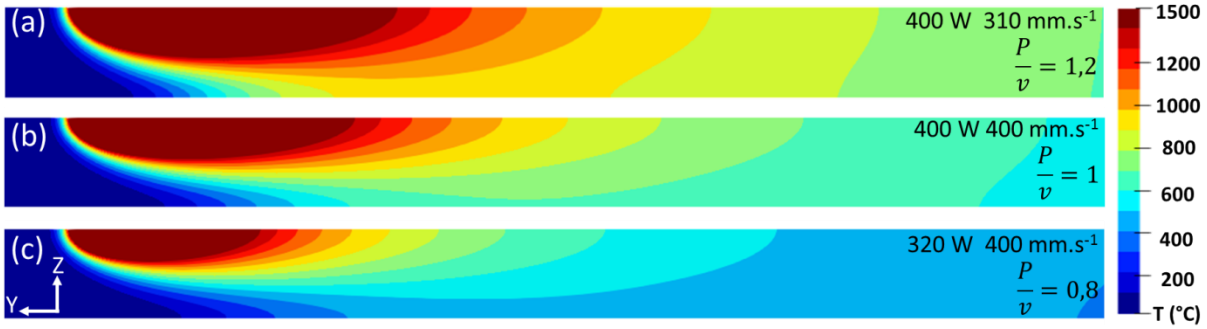


Figure 4.4. Distribution des températures en coupe longitudinale pour les trois paramètries testées

Les champs thermiques obtenus pour la ligne de fusion réalisée avec la 4ème paramétrie sont présentés en coupe transverse (XZ) et en vue de dessus (XY) sur les images (c) et (d) de la Figure 4.3. Rappelons que l'échelle des isovaleurs a été choisie de telle sorte que la dernière isotherme corresponde à la température de liquidus, permettant ainsi la délimitation du bain liquide. Nous pouvons observer que la section du bain en coupe transverse est semi-circulaire, et que le bain est allongé et plus arrondi à l'avant qu'à l'arrière à cause des effets de déplacement de la source de chaleur. Les coupes longitudinales (YZ) des trois paramétries sont représentées sur la Figure 4.4. Nous pouvons remarquer que plus l'apport d'énergie linéique est important (de (c) vers (a)), plus le bain est allongé et légèrement plus profond. De plus, nous pouvons constater sur cette même figure que l'écart entre les isothermes à l'arrière du bain s'accroit lorsque l'apport d'énergie augmente.

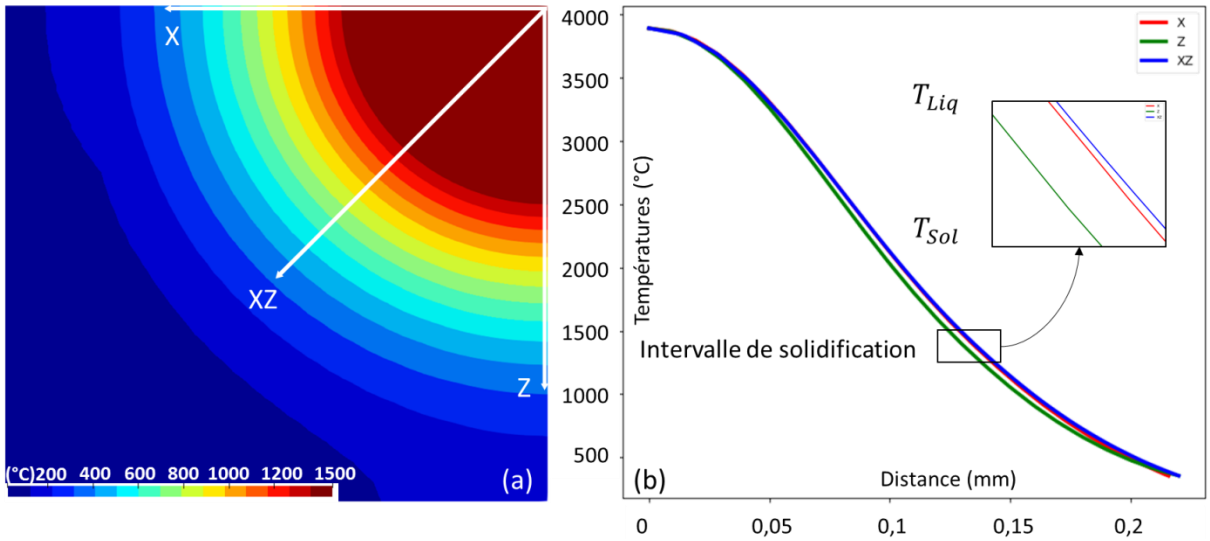


Figure 4.5. Champs thermiques obtenus pour une ligne de fusion simulée à une vitesse de 400 mm.s^{-1} et une puissance de 400 W : (a) bain fondu en coupe transverse, (b) évolution des températures le long des lignes X, Z et XZ représentées sur la figure (a)

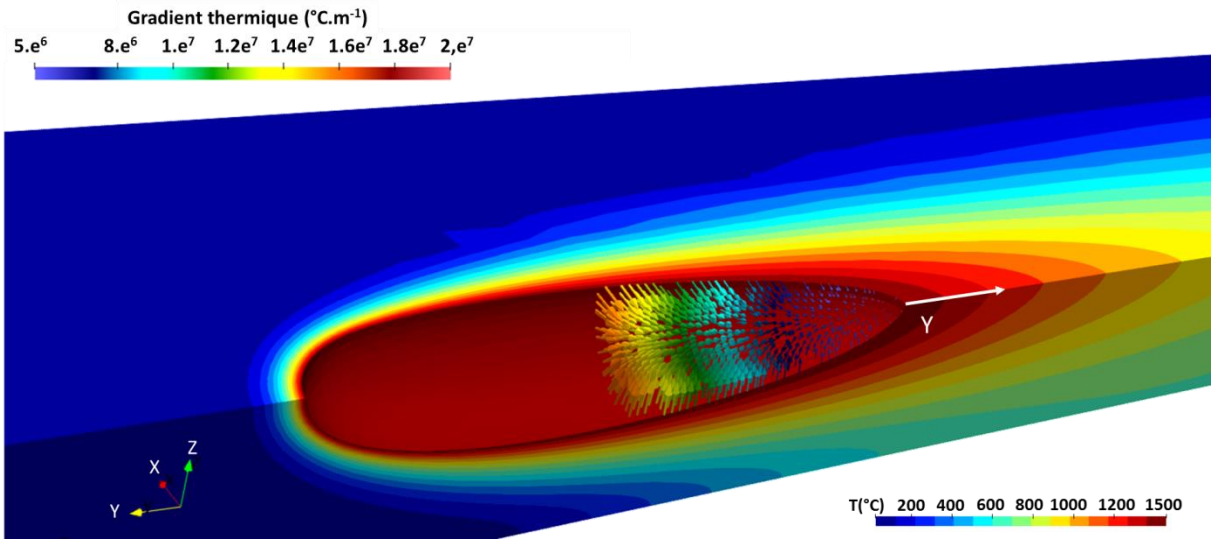


Figure 4.6. Champ de températures et gradient thermique représentés à l'arrière du bain le long du front de solidification) pour une ligne de fusion simulée à une vitesse de 400 mm.s^{-1} et une puissance de 400 W

Les champs thermiques dans la coupe transverse située au niveau du centre du bain fondu simulé pour la 4ème paramétrie sont visibles sur la Figure 4.5 (a), sur laquelle sont également représentées trois lignes nommées X, Z, et XZ. Le contour du bain liquide dans cette section constitue rappelons-le la zone où la solidification démarre. L'évolution des températures le long de ces trois lignes est représentée sur la Figure 4.5 (b), chacune ayant pour origine le centre du bain. Nous pouvons constater que les trois courbes ont la même allure, et qu'elles sont même quasiment parallèles dans l'intervalle de solidification (zone encadrée). La variation de température par unité de distance correspondant au gradient thermique, nous pouvons déduire de cette observation que le gradient thermique le long du front de solidification en coupe transverse est pratiquement identique dans toutes les directions du plan considéré. Nous pouvons toutefois remarquer des valeurs très légèrement plus élevées en surface (le long de la ligne X) qu'en profondeur (le long de la ligne Z). La Figure 4.6 permet d'appuyer cette constatation, puisque nous pouvons remarquer que les flèches représentant les gradients thermiques rattachés à une même valeur de Y (*i.e.* appartenant au même

plan (XOZ)) sont représentées de la même couleur, indiquant que les vecteurs sont de même norme. L'obtention d'un gradient de norme sensiblement constante le long du front de solidification dans le plan transversal peut être corrélée à la forme quasi semi-circulaire du bain, qui traduit des transferts de chaleur uniformes dans toutes les directions entre le centre du bain et sa périphérie. Notons que ces observations ont été faites dans le cas des trois combinaisons de paramètres testées. Le fait que le gradient soit un peu plus faible dans la direction verticale peut être lié à la faible épaisseur du substrat (3 mm), qui limite l'évacuation de chaleur dans cette direction. En effet, rappelons que seul 0,25 mm de l'épaisseur totale du maillage a été modélisé. Néanmoins le coefficient d'échange thermique a été calibré afin de modéliser le phénomène de « pompage thermique » par le substrat.

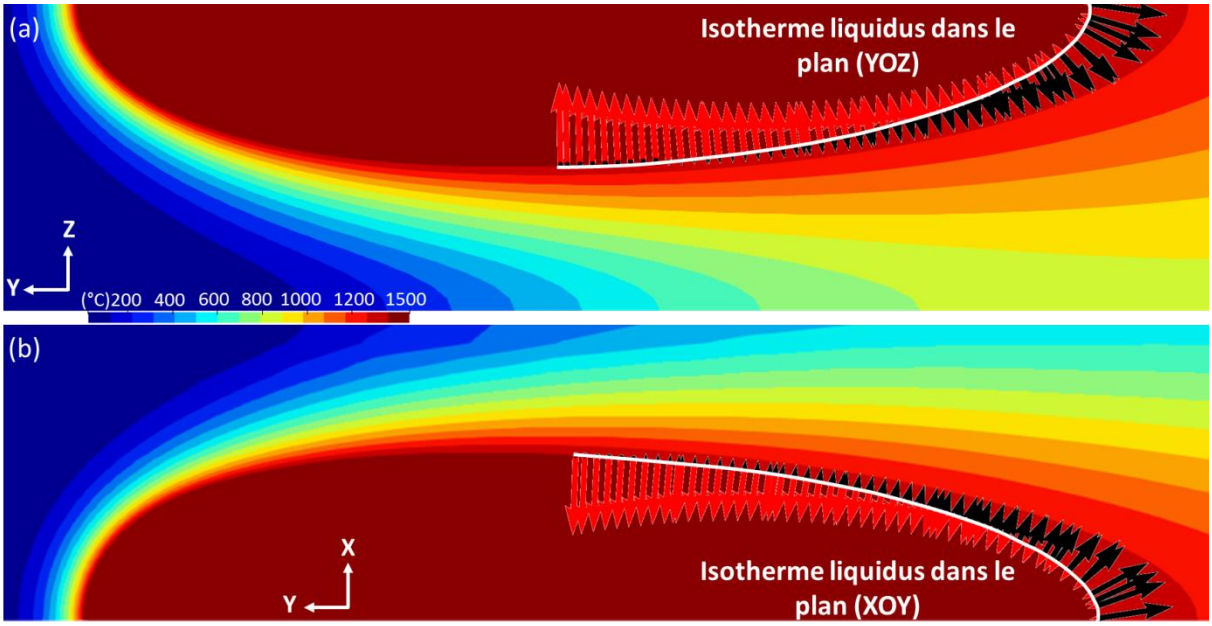


Figure 4.7. Gradients de températures (vecteurs rouges) et taux de refroidissement (vecteurs noirs) représentés au niveau de l'isotherme de liquidus : (a) en coupe longitudinale et (b) en vue de dessus

Nous nous sommes également intéressés au gradient thermique et au taux de croissance obtenus au niveau de l'isotherme de liquidus en coupe longitudinale (*i.e.* dans le plan (YOZ)), et en vue de dessus (*i.e*. dans le plan (XOY)). Ces résultats permettent d'étudier l'évolution de ces deux grandeurs le long du front de solidification entre le début de la solidification (zone où le bain est le plus large) et la fin de la solidification (arrière du bain). Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 4.7. Contrairement aux observations faites en coupe transverse, nous pouvons remarquer que le gradient varie fortement cette fois en fonction de sa position le long de l'isotherme. Il apparait qu'il est maximal dans la partie inférieure du bain (Figure 4.7 (a)) et au niveau de sa plus grande largeur (Figure 4.7 (b)), et minimal au centre du bain. Cette constatation révèle que le gradient thermique est plus élevé au début de la solidification qu'en fin de solidification (à l'arrière du bain). A l'inverse, nous pouvons remarquer que le taux de solidification ou de croissance est maximal à l'arrière du bain et que sa principale composante est alors alignée avec la direction de balayage du laser (selon Y). Pour rappel, le taux de croissance en un point donné du front de solidification correspond au produit de la vitesse du laser avec le cosinus de l'angle entre la normale à la surface délimitant le bain (considérée ici comme l'isotherme de liquidus) et la direction de déplacement de la source (équation (19)). A l'extrémité arrière du bain, cet angle est nul, ce qui implique que le taux de croissance est égal à la vitesse de déplacement de la source.

Les résultats thermiques des trois paramétries ont également été comparés. Pour cela, nous avons dans un premier temps tracé l'évolution des températures selon le segment Y situé à l'arrière du bain (Figure 4.6), englobant l'intervalle de solidification (zone comprise entre T_{Liq} et T_{Sol}) ainsi qu'une zone plus refroidie proche de cet intervalle. Le point de départ du segment Y correspond à l'isotherme de liquidus (Figure 4.8). Il a été choisi de descendre en dessous de la température du solidus car dans le cas d'un alliage solidifiant hors état d'équilibre (cas des pièces fabriquées par LBM) la solidification peut se poursuivre en dessous de la température du solidus. Les évolutions de températures obtenues le long de cette ligne pour les trois paramétries sont visibles sur la Figure 4.8. Il ressort du graphique que plus l'énergie linéique (rapport $\frac{P}{v}$) est faible, plus la pente de la courbe est marquée. Cette constatation indique que le gradient thermique selon l'axe Y augmente lorsque l'énergie linéique fournie au système diminue, conduisant à une réduction de la longueur de la zone semi-solide située à l'arrière du bain.

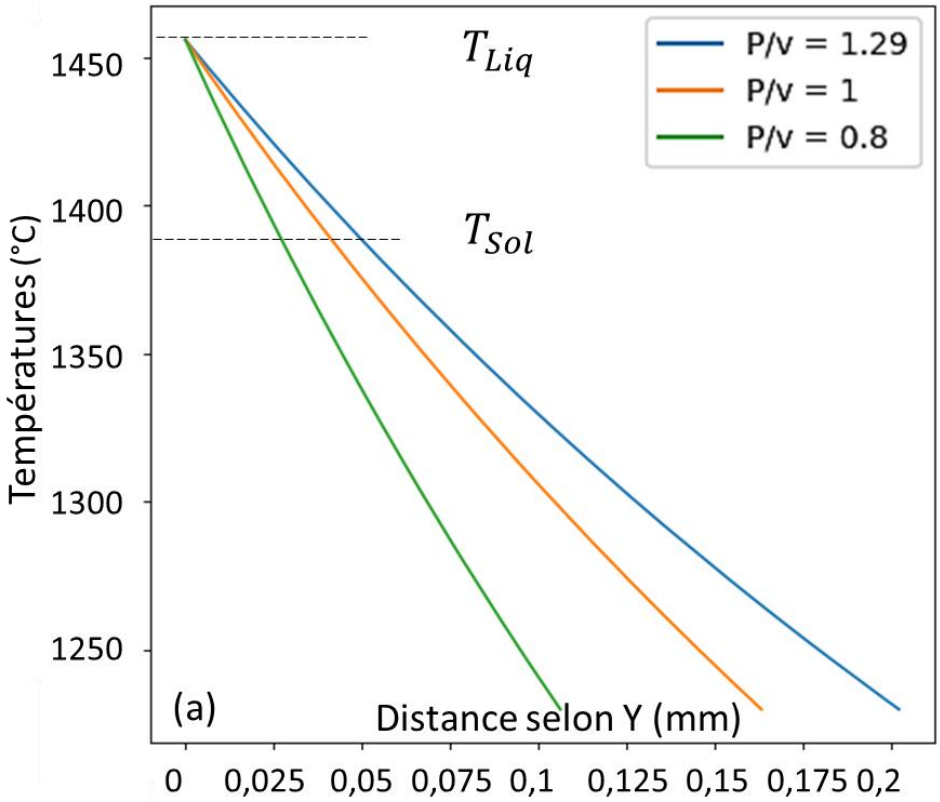


Figure 4.8. Evolution des températures le long de la ligne Y pour les trois paramétries

Les simulations ayant montré que les champs de températures varient fortement le long du liquidus, nous avons alors comparé les évolutions du gradient thermique et du taux de croissance le long de l'isotherme de liquidus à l'arrière du bain (le long du front de solidification). L'évolution du gradient le long de l'isotherme de liquidus est représentée dans le plan (XOY) (Figure 4.7 (b)) sur la Figure 4.9 (a) et dans le plan (YOZ) (Figure 4.7 (a)) sur la Figure 4.9 (b). L'évolution du taux de croissance le long de l'isotherme de liquidus dans ces deux plans est présentée sur la Figure 4.10. Notons que pour l'ensemble de ces représentations, les abscisses correspondent à la position relative selon l'axe Y. La valeur 0 correspond donc à la périphérie du bain (bord le plus large ou fond du bain selon la coupe (XOY) ou (YOZ) respectivement) et la valeur 1 à l'extrémité arrière du bain.

Une première constatation est que l'évolution de chacune des deux grandeurs est assez comparable en coupe longitudinale et en vue de dessus. En observant dans ces deux plans de coupe le profil du bain (Figure 4.7), nous pouvons remarquer qu'il est sensiblement identique, ce qui pourrait expliquer

les allures très proches des courbes du gradient et du taux de croissance constatées dans chacun des deux plans. Les variations du gradient d'une condition à l'autre sont cependant légèrement plus marquées dans le plan (XOY), tandis que les différences de taux de refroidissement le sont plus dans le plan (YOZ). De plus, comme nous avons pu l'observer sur la Figure 4.8, la Figure 4.9 montre que le gradient augmente lorsque l'énergie linéique diminue, et ce tout le long du front de solidification. Cependant, nous pouvons constater que les écarts sont moins importants à l'arrière du bain (en fin de solidification).

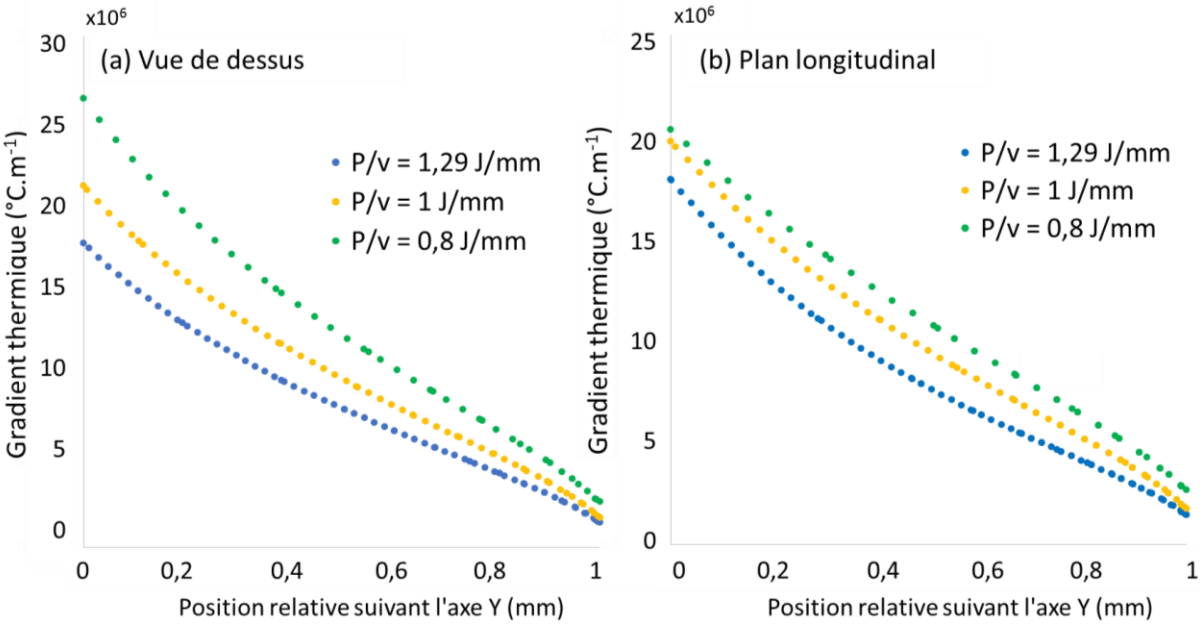


Figure 4.9. Evolution du gradient thermique le long de l'isotherme de liquidus depuis la zone de début de solidification jusqu'à la pointe arrière du bain : (a) en vue de dessus et (b) en coupe longitudinale

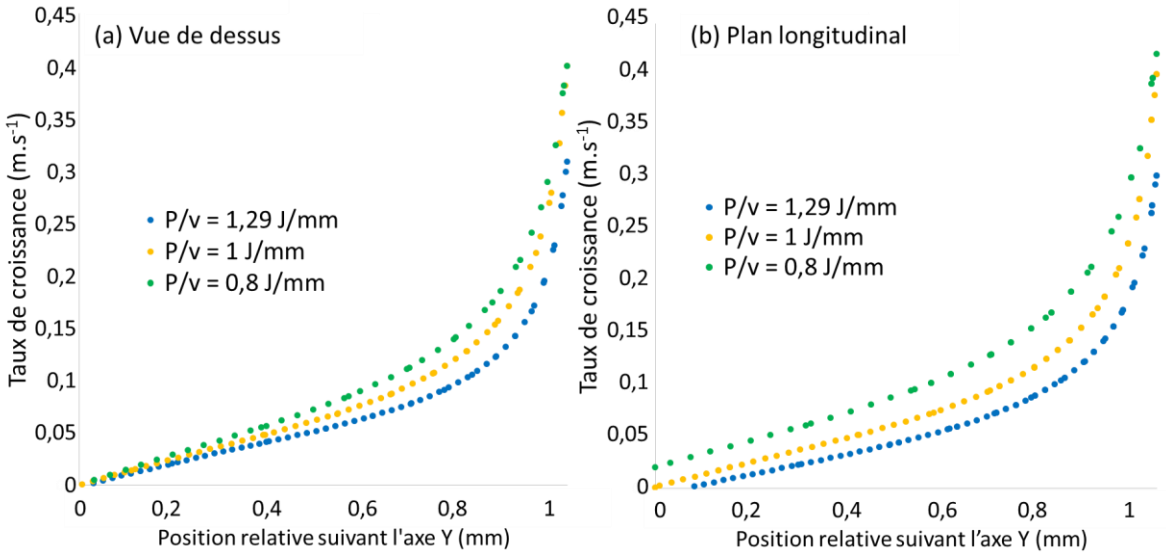


Figure 4.10. Evolution du taux de croissance le long de l'isotherme de liquidus depuis la zone de début de solidification jusqu'à la pointe arrière du bain : (a) en vue de dessus et (b) en coupe longitudinale

Le taux de croissance quant à lui, augmente logiquement le long du front de solidification, suivant la valeur du cosinus de l'angle entre la normale au front et la direction de balayage du laser. Par ailleurs, nous pouvons constater qu'en fin de solidification (*i.e.* à l'arrière du bain), la direction de croissance est parallèle à l'axe de déplacement du laser et donc le taux de croissance est identique à

la vitesse de déplacement. Par conséquent, à l'arrière du bain il est identique pour les paramétries 2 et 4, et plus élevé que celui de la paramétrie 3. Néanmoins, nous pouvons constater que le taux de croissance augmente plus rapidement en s'approchant de l'arrière du bain avec la paramétrie 2 correspondant à la plus faible énergie linéique. Cette constatation provient du fait que l'arrière du bain est plus arrondi et donc moins allongé à faible énergie linéique que celui formé avec les paramétries 3 et 4. Les conséquences des variations de taux de croissance et gradient thermique sur les structures de grains sont discutées dans la section 4.1.7.

4.1.7. Discussion

Les résultats numériques obtenus à l'issue des simulations du procédé nous ont permis d'étudier le gradient thermique et le taux de croissance dans la zone de solidification, grandeurs physiques gouvernant les structures de grains formées.

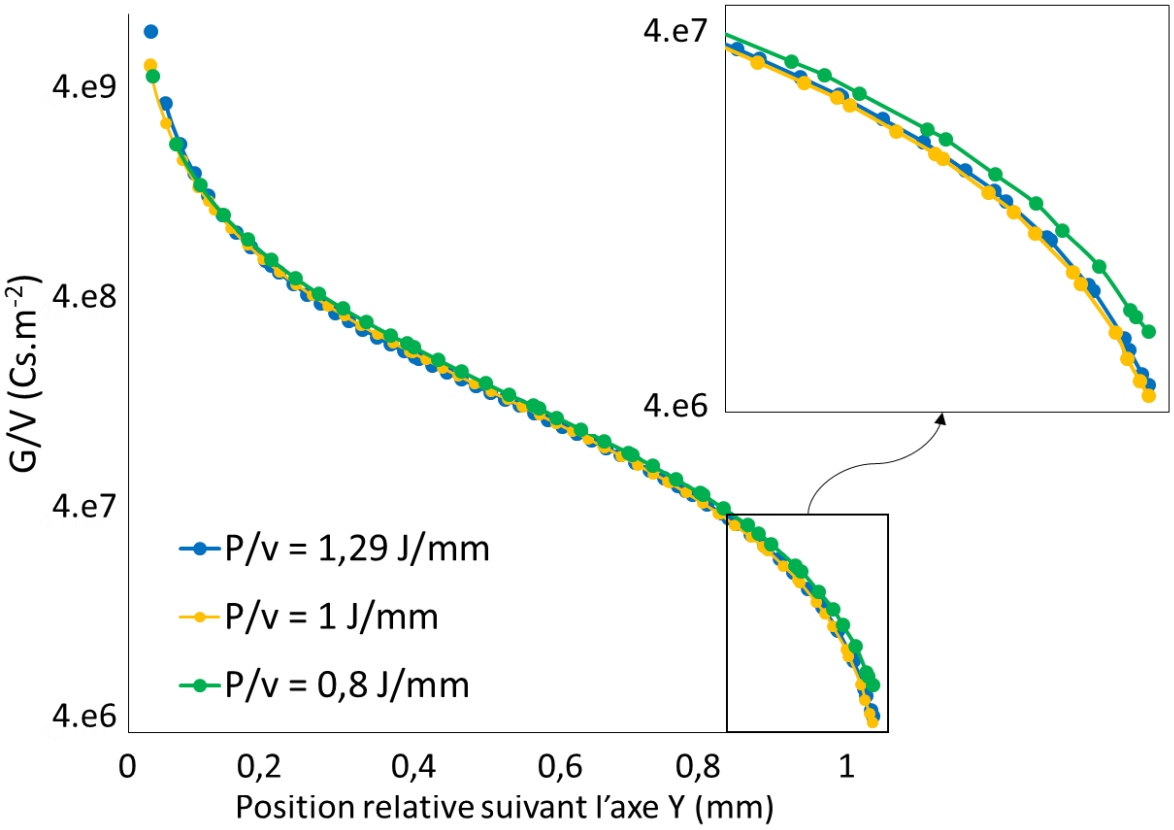


Figure 4.11.Evolution du rapport G/V le long de l'isotherme de liquidus dans le plan XOY (surface du bain) pour les trois paramétries étudiées.

Ces résultats ont permis de constater qu'au cours de la réalisation de lignes de fusion, le gradient thermique le long du front de solidification varie assez peu dans un plan de coupe perpendiculaire à la direction de balayage du laser (*i.e.* coupe transverse). En revanche, il ressort également de cette étude que le gradient est plus élevé au niveau du bord et dans la profondeur du bain qu'à son extrémité arrière, et qu'il est donc maximal au début de la solidification et minimal en fin de solidification. A l'inverse, nous avons observé que le taux de croissance est lui maximal dans la partie arrière du bain et donc en fin de solidification.

Concernant l'influence des paramètres procédé sur les résultats obtenus, il a été observé que lorsque l'énergie apportée diminue, le gradient thermique le long du front de solidification augmente. C'est également le cas du taux de croissance mais dans une proportion moindre, la valeur maximale de ce

paramètre étant imposée par la vitesse de déplacement du laser, identique pour les deux paramétries à plus faible énergie linéique. Les évolutions du rapport G/V, gouvernant le mode de solidification, ont été comparées le long du front de solidification dans le plan (XOY) (*i.e.* à la surface du bain) pour les trois paramétries (Figure 4.11). Nous pouvons constater que ce rapport diminue fortement entre le début et la fin de la solidification, mais qu'il est quasiment identique d'une paramétrie à l'autre. Il est tout de même possible de remarquer qu'une valeur légèrement plus faible du rapport G/V est obtenue en fin de solidification pour la paramétrie correspondant à l'énergie linéique de 1 J.mm^{-1} (paramétrie 4). La diminution du rapport G/V favorisant la transition colonnaire-équiaxe, nous pouvons alors espérer atteindre cette transition pour un jeu de paramètres adapté, favorisant ainsi la formation de structures de grains plus isotropes pour certains matériaux.

Le taux de refroidissement au niveau du front de solidification, correspondant au produit $G.V$, gouverne quant à lui la finesse de la microstructure de solidification. La Figure 4.12 (a) montre l'évolution de ce paramètre le long du front de solidification dans le plan (XOY) pour les trois paramétries. Nous pouvons constater que la paramétrie associée à la plus faible énergie linéique conduit à un taux de refroidissement plus élevé, ce qui doit favoriser la formation de microstructures plus fines.

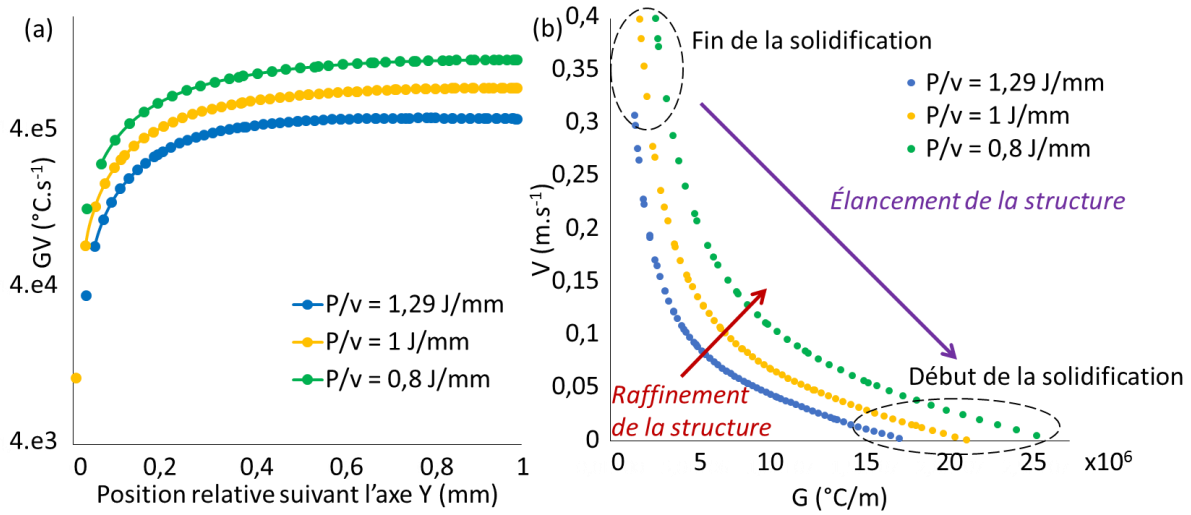


Figure 4.12. (a) Evolution du taux de refroidissement $G.V$ le long de l'isotherme de liquidus dans le plan (XOY) (surface du bain) pour les trois paramétries étudiées. (b) Diagramme $G-V$ décrivant les conditions de solidifications des trois paramétries

L'évolution des valeurs de gradient thermique G et de taux de croissance V obtenues pour les trois paramétries sont positionnées dans le diagramme GV de la Figure 4.12 (b). Pour chacune des paramétries, cette représentation nous montre que lorsque la solidification progresse (*i.e.* du bord vers l'arrière du bain), le taux de croissance augmente et le gradient thermique diminue. Par conséquent, en se dirigeant vers la zone de fin de solidification, nous nous rapprochons du domaine dans lequel la transition colonnaire-équiaxe devient possible. Sur la Figure 4.12 (b), nous pouvons remarquer que la paramétrie associée à l'énergie linéique de 1 J.mm^{-1} (vitesse d'avance de 400 mm.s^{-1} et puissance de 400 W) est celle qui s'en rapproche le plus. D'autre part, cette même figure nous permet de constater que tout au long de la solidification, c'est la paramétrie associée à la plus faible énergie linéique (310 W et 400 mm.s^{-1}), se situant le plus à droite du diagramme qui devrait conduire aux microstructures les plus fines.

Bien que des différences aient été observées entre résultats expérimentaux et numériques, les caractéristiques principales du bain fondu sont retrouvées dans les simulations. Par ailleurs, les

constatations faites sur le gradient et le taux de croissance dans la zone de solidification sont en accord avec les résultats obtenus dans la littérature. Par conséquent, le modèle thermique semble cohérent et les champs de température peuvent être transmis au modèle de solidification. Il est tout de même important de garder à l'esprit que l'obtention d'une zone fondue simulée dont la profondeur est supérieure à celle constatée expérimentalement pourra influencer les résultats de simulation des structures de grains.

4.2. Simulation des structures de grains

Dans cette section, nous nous intéressons aux structures de grains formées par simulation CAFE dans le cas des trois paramétries étudiées.

4.2.1. Initialisation du domaine AC

Le domaine d'automates cellulaires se limite à la zone centrale du maillage EF, les phénomènes de fusion et de solidification se déroulant exclusivement dans cette zone (Figure 4.13). Aucune symétrie particulière n'ayant été constatée au cours de l'étude expérimentale des structures de grains (*cf.* 3.6), la largeur totale du cordon est prise en compte dans la modélisation AC. Le champ de températures obtenu à la suite des simulations du procédé est donc symétrisé puis le domaine AC est centré sur la ligne de fusion reconstruite. Le domaine AC mesure 2,5 mm de longueur et ses largeur et hauteur varient en fonction de la paramétrie choisie, entre 222 µm et 290 µm et entre 106 et 146 µm respectivement (Tableau 4.4). Une taille de 2 µm a été choisie pour les cellules.

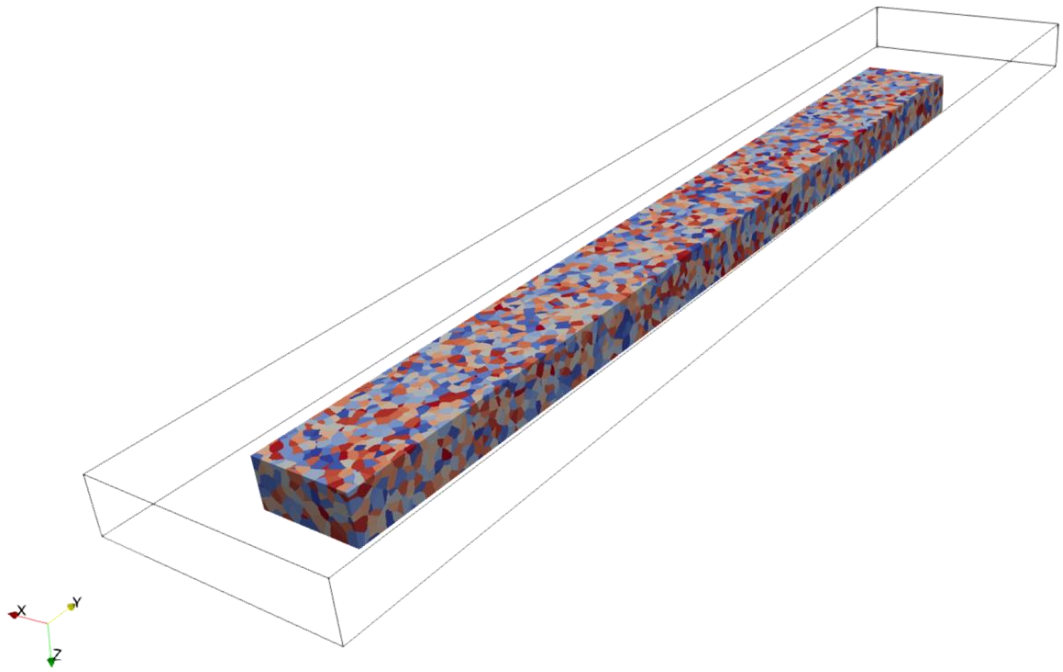


Figure 4.13. Structure granulaire initiale générée dans la grille AC positionnée dans le maillage EF dont les limites sont représentées par les lignes de contour noires

Tableau 4.4. Dimensions du domaine AC pour chacune des trois paramétries simulées

Paramétrie	Longueur (mm)	Largeur (mm)	Hauteur (mm)
2ème	2,5	0,222	0,106
4ème		0,250	0,120
3ème		0,290	0,146

Afin de modéliser la structure initiale du substrat, une partition de Voronoï est effectuée (*cf.* 2.3.2.4). Suite aux mesures réalisées sur les grains présents dans le substrat utilisé dans le cas des monocouches (*cf.* 3.6.1), une surface moyenne de 509 µm² a été calculée, correspondant à un diamètre moyen équivalent de 25 µm environ. Le diamètre moyen équivalent choisi pour application sur les cellules de Voronoï est donc de 25 µm. La structure granulaire initiale du substrat modélisée, positionnée par rapport au maillage EF est visible sur la Figure 4.13.

4.2.2. Loi de croissance dendritique

La prise en compte de la solidification dans notre modèle repose essentiellement sur la reproduction de la croissance des pointes de dendrites. Pour cela, une vitesse de solidification attribuée aux cellules représentant la zone pâteuse est définie. Dans notre modèle, la vitesse de croissance en pointe de dendrite est liée à la surfusion ΔT par une loi puissance (*cf.* 2.3.1.4), dont l'équation est rappelée ci-après :

$$v_d(\Delta T) = a_n \Delta T^n \tag{57}$$

Les paramètres a_n et n de la loi de croissance ci-dessus ont été déterminés à partir du modèle théorique proposé par Kurz et al. [Kurz 1986] en supposant que le matériau est un pseudo-binaire Cr-Ni, dont les propriétés matériau sont résumées dans le Tableau 4.5, et en utilisant les gradients de température calculés à partir des simulations thermiques du procédé LBM. Les valeurs moyennes des paramètres de la loi obtenus sont $n = 4{,}8$ et $a_n = 10^{-8}$ m.s^{-1}.K$^{-4.8}$.

Tableau 4.5. Propriétés physiques et caractéristiques procédé retenues pour le calcul de notre modèle de croissance dendritique

Paramètres	**Valeurs**
Coefficient de diffusion à l'interface solide/liquide D_l (m².s^{-1})	3.10^{-9}
Paramètre de Gibbs-Thomson Γ (m.K)	2.10^{-7}
Composition initiale du liquide C_0 (%)	31
Pente du liquidus m_l (K.wt%$^{-1}$)	-2.5
Coefficient de partition k	0.65
Gradient thermique G_l (K.m^{-1})	1.10^6 – 2.10^7
Vitesse de croissance dendritique v_d (m.s^{-1})	0.08 - 0.4

Deux lois de croissance dendritiques issues de la littérature ont également été utilisées afin de les comparer avec notre modèle de croissance : celle proposée par Tan et Shin [Tan 2015] dans le cas d'un acier 304, également calculée selon l'équation (57) et celle retenue par Zinovieva et al. [Zinovieva 2019] pour l'étude d'un acier 316L définie comme suit :

$$v_d(\Delta T) = \sum_{i=1}^{3} a_i \Delta T^i \tag{58}$$

Les paramètres utilisés pour ces trois lois sont résumés dans le Tableau 4.6 et leur évolution en fonction des valeurs de surfusion sont visibles sur la Figure 4.14. Sur ces courbes, nous pouvons

constater que pour une vitesse de croissance de 0,4 m.s^{-1}, qui constitue à peu près la vitesse de croissance à l'arrière du bain pour les deuxième et quatrième paramétries, la valeur de surfusion, indiquant le retard que prennent les pointes de dendrites par rapport au liquidus, est assez proche pour le modèle de Tan et celui défini dans cette étude (33 °C et 38 °C respectivement). La valeur de surfusion obtenue avec le modèle de Zinovieva à cette vitesse est quant à elle de plus de 180 °C.

Tableau 4.6. Paramètres des différentes lois de croissance utilisées

Paramètres	a_n	a_1	a_2	a_3	n
Modèle de Zinovieva [Zinovieva 2019]	-	0	2.49 x 10^{-7}	6.2 x 10^{-8}	-
Modèle de Tan et Shin [Tan 2015]	7.325 x 10^{-6}	-	-	-	3.12
Notre modèle	1 x 10^{-8}	-	-	-	4.8

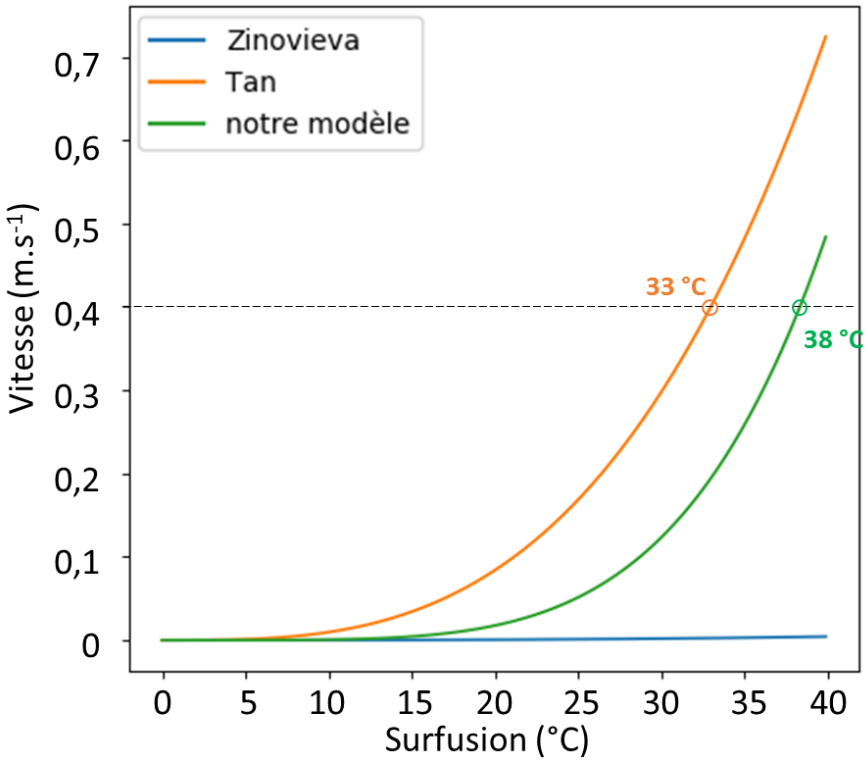


Figure 4.14. Evolution de la vitesse en pointe de dendrite en fonction de la surfusion pour les trois lois de croissance considérées dans notre étude

Les analyses expérimentales des lignes de fusion n'ayant pas montré la présence de grains ayant germé mais uniquement formés par croissance épitaxiale à partir des grains du substrat, la germination n'est pas prise en compte dans ce modèle.

4.2.3. Structures de grains simulées

Pour rappel, les lignes de fusion obtenues pour les 2ème, 3ème et 4ème paramétries ont été simulées (Tableau 4.1). Dans le cas de la quatrième paramétrie, les structures de grains résultantes sont confrontées avec celles obtenues expérimentalement (4.2.3.1). Les mesures effectuées sur les vues de dessus et sur les coupes longitudinales étant amenées à varier en fonction de la position du plan observé (Figure 3.30 (b) et Figure 3.31 (b)), nous effectuerons préférentiellement des comparaisons

entre résultats expérimentaux et numériques en coupe transverse. Pour cette paramétrie, une simulation est effectuée avec chacune des trois lois de croissance définies dans la section précédente afin d'étudier leur effet sur les structures de grains formées (4.2.3.2). Enfin, les résultats de simulations obtenus pour les trois combinaisons de puissance et de vitesse avec la loi de croissance identifiée dans notre modèle sont confrontés afin d'appréhender l'influence de ces paramètres sur la structure granulaire formée (4.2.3.3).

4.2.3.1. Ligne de fusion 400 W et 400 mm.s^{-1}

Les résultats de simulation CAFE obtenus pour la ligne de fusion réalisée à 400 W et 400 mm.s^{-1} en utilisant la loi de croissance dendritique définie dans le cadre de la thèse sont visibles sur la Figure 4.15. Nous pouvons constater que les grains simulés se sont bien formés par épitaxie à partir des grains du substrat présent à l'interface solide/liquide, et que leur croissance s'est principalement effectuée selon la direction normale au bain fondu. Ces observations sont cohérentes avec nos résultats expérimentaux (3.6.1) et avec les travaux de Mutke et al. [Mutke 2018]. De plus, sur la vue de dessus et sur la coupe longitudinale (Figure 4.15 (a-b)), nous pouvons remarquer que les grains croissent initialement selon X au bord du bain ou selon Z au fond du bain, puis qu'ils s'inclinent progressivement vers la direction de balayage du laser (*i.e.* selon Y).

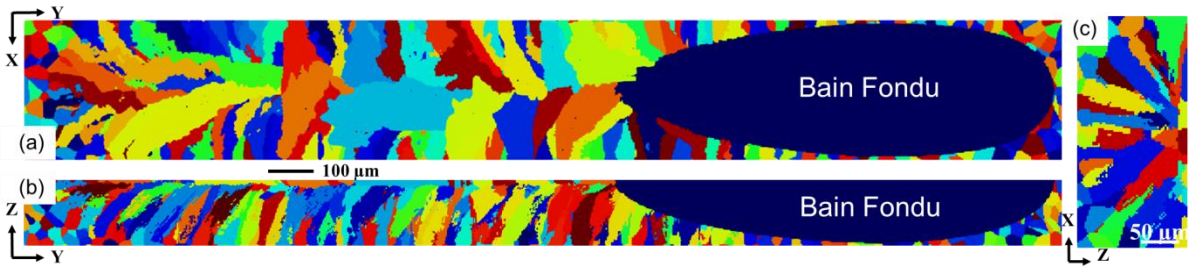


Figure 4.15. Structure de grain de la ligne de fusion effectuée à 400 W et 400 mm.s^{-1} obtenue par simulation numérique utilisant le modèle CAFE. (a) Vue de dessus, (b) coupe longitudinale et (c) coupe transverse.

Tableau 4.7. Comparaison des caractéristiques des structures de grains de la ligne de fusion de la 4ème paramétrie calculées à partir des résultats expérimentaux et numériques obtenus en coupe transverse

		Surface moyenne (µm²)	Diamètre équivalent (µm)	Rapport de forme
Substrat	Expérimental	509	25,5	1,5
	Numérique	390	22,3	1,8
Zone Fondue	Expérimentale	380	22,0	3,4
	Numérique	546	26,4	3,0

Le Tableau 4.7 et la Figure 4.16 nous permettent de comparer quantitativement les caractéristiques des grains du substrat obtenues expérimentalement et numériquement, à savoir la surface moyenne (*i.e.* la taille des grains mesurée en coupe transverse) et le rapport de forme (*i.e.* rapport de l'axe principal du grain en coupe transverse sur son axe secondaire). Pour rappel, les données expérimentales sont extraites des cartographies EBSD effectuées sur les coupes transverses des échantillons (3.6.1.2). Les données de simulation sont obtenues en moyennant les données de 50 cartographies de grains numériques générées dans des sections transversales du domaine AC dans la zone stationnaire. Pour les jeux de données numérique et expérimental, les grains dont la surface est inférieure à 50 µm² n'ont pas été considérés. Il est important de remarquer que la quantité de données traitées dans les deux cas est très différente. En effet, les données numériques ont été calculées en extrayant plus de 1400 grains de différentes coupes transverses du domaine AC, alors

que les données expérimentales proviennent d'une seule cartographie EBSD comptabilisant seulement 48 grains.

Les faibles rapports de forme des grains du substrat obtenus expérimentalement et par simulation montrent que les grains sont quasiment équiaxes (Tableau 4.7). D'autre part, la comparaison des surfaces moyennes nous permet de constater que les grains simulés sont plus petits et légèrement plus allongés que ceux réellement présents dans le substrat. Cette constatation peut s'expliquer par le fait que le substrat simulé est composé de grains de tailles sensiblement identiques (faible dispersion des valeurs de surface), du fait du choix d'une partition de Voronoï. Nous pouvons en effet constater sur l'histogramme (a) de la Figure 4.16 que près de 90 % des grains du substrat numérique ont une surface inférieure à 500 µm² contre à peine 65 % dans le cas des grains réels. Néanmoins, mise à part l'absence de grands grains dans le substrat numérique, les répartitions des plages de tailles et rapports de forme sont relativement proches entre résultats expérimentaux et numériques (Figure 4.16). En outre, le rapport de forme numérique moyen étant seulement supérieur de 20 % au rapport mesuré expérimentalement, nous pouvons considérer que la modélisation de la structure granulaire du substrat est suffisamment représentative de la structure réelle.

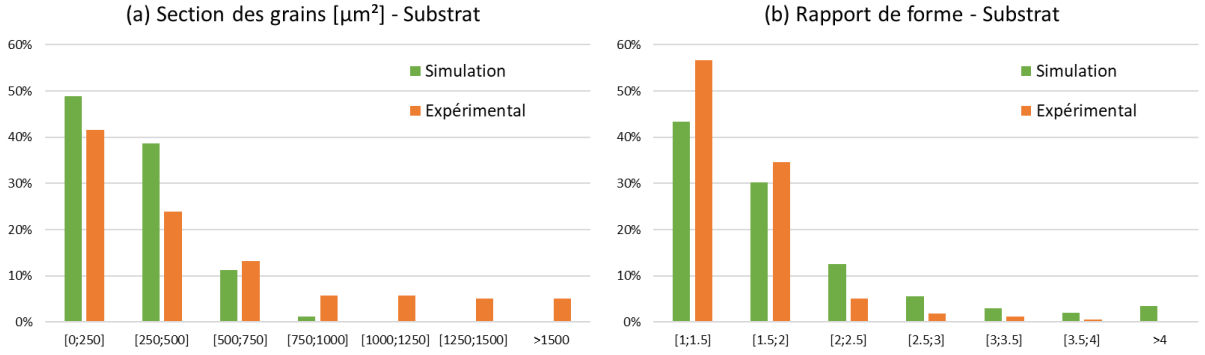


Figure 4.16. Distribution (a) des tailles et (b) des rapports de forme des grains du substrat expérimental et numérique

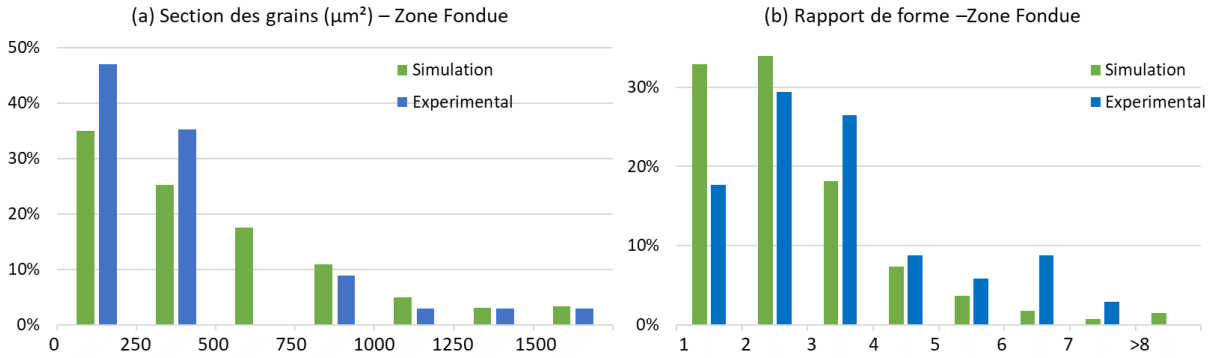


Figure 4.17. Distribution (a) des tailles et (b) des rapports de forme des grains des zones fondues expérimentale et numérique

Contrairement à ce qui est observé dans le cas du substrat, le diamètre moyen des grains simulés dans la zone fondue est 20 % plus élevé que celui observé expérimentalement, et les grains sont moins allongés (Tableau 4.7). Cette différence peut s'expliquer par le fait que le bain simulé étant légèrement plus large et surtout plus profond que celui formé expérimentalement, la zone liquide disponible pour la croissance des grains est plus importante. Or les grains expérimentaux et simulés observés en coupe transverse présentent pour la majeure partie d'entre eux une morphologie colonnaire et se prolongent dans toute la zone liquide (*i.e.* depuis le bord du bain jusqu'à son centre).

Les grains formés dans un bain plus grand disposent alors de plus de place pour croître, générant des grains plus grands. En comparant la répartition des tailles de grains sur l'histogramme (a) de la Figure 4.17, nous pouvons en effet constater que le nombre de grains de taille inférieure à 500 μm^2 observés expérimentalement est plus élevé que celui des grains simulés (82 % contre 60 %), alors qu'au contraire le nombre de grains dont la taille est comprise entre 500 et 1250 μm^2 est plus faible (12 % contre 34 %). La valeur plus élevée du rapport de forme moyen calculée à partir des données réelles est principalement liée à la présence d'une plus grande proportion de grains de rapport de forme supérieur à 5, en comparaison de la simulation (18 % contre 8 % seulement). Ces différences constatées sont toutefois à relativiser car la quantité de données traitées dans les deux cas est notablement éloignée comme nous l'avons précisé en introduction. Il est notamment envisageable que la coupe expérimentale observée ne soit pas représentative de l'ensemble des grains de la ligne de fusion formée, bien que située dans la zone stationnaire du cordon.

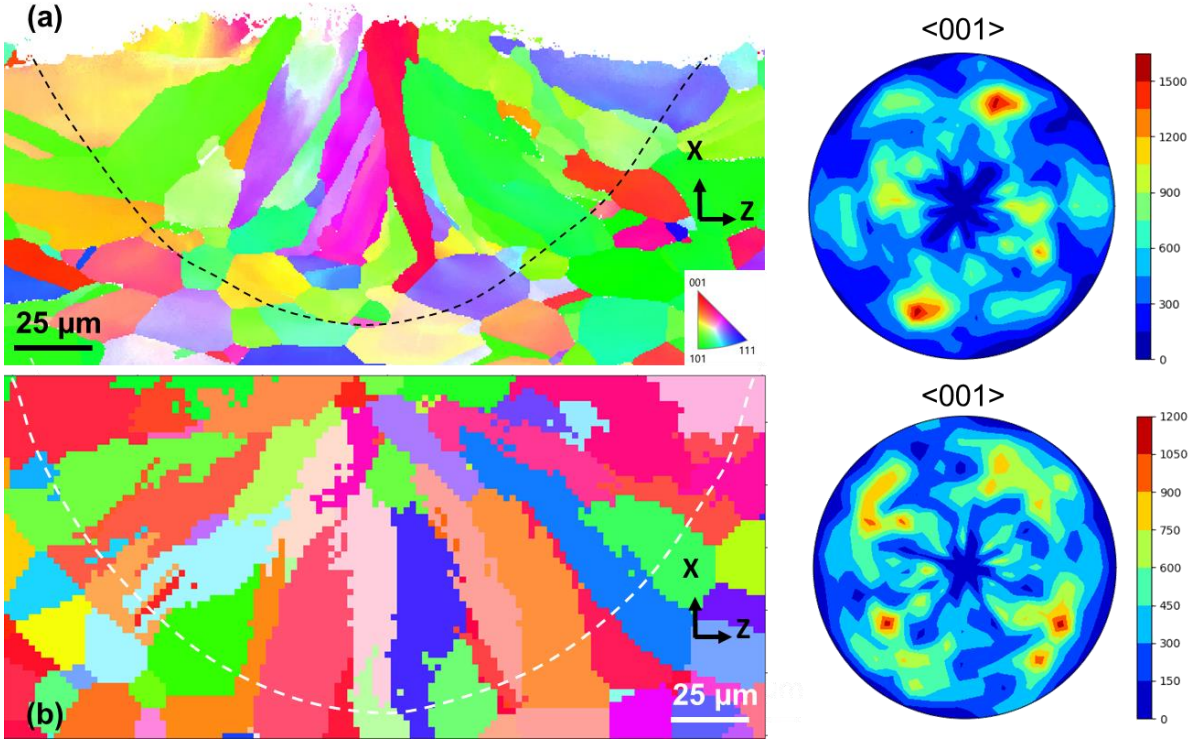


Figure 4.18. Cartographies des grains en coupe transverse de la ligne de fusion obtenue : (a) expérimentalement et (b) numériquement. Les deux images sont colorées selon les couleurs standards IPF par rapport à l'axe Z. Les lignes pointillées représentent le contour des zones fondues (le contour noir est une estimation). Les figures de pôles associées à chaque figure représentent les directions <001> par rapport au plan normal à l'axe Z

Les structures de grains expérimentales et numériques ont également été comparées de façon qualitative. Pour cela, nous nous sommes intéressés aux cartographies EBSD expérimentales et générées suite aux simulations CAFE, car elles permettent d'accéder aux orientations cristallographiques des grains présents dans les zones fondues. Les cartographies d'orientation cristallographique ainsi que les figures de pôles associées issues des mesures expérimentales et des simulations de la ligne de fusion correspondant à la 4ème paramétrie sont visibles sur la Figure 4.18. Sur la figure (b) montrant les résultats numériques, nous pouvons remarquer que toutes les couleurs de grains sont représentées dans la structure initiale du substrat, indiquant l'absence de texture particulière dans le matériau. En revanche, dans les grains situés dans la zone fondue, les tons chauds (*i.e.* rouge, orange et rose) sont légèrement prédominants. Ces couleurs correspondent aux grains dont la direction [001] est faiblement désorientée par rapport à l'axe Z (axe vertical). Dans le

cas de ces grains, les directions de croissance préférentielle sont faiblement désorientées par rapport à la direction du gradient thermique à deux niveaux : au centre du bain où le gradient est plutôt orienté suivant la direction Z, et en bord de bain où le gradient est alors principalement orienté dans la direction X. Il est donc normal qu'ils se développent prioritairement dans ces zones. Entre ces deux zones, quelques grains de couleurs bleue ou verte sont observés. Ces grains dont les directions cristallographiques <111> ou <011> respectivement sont orientées suivant Z, se sont développés préférentiellement dans cette zone à cause du gradient incliné par rapport à l'axe Z. Ces observations sont assez conformes à celle faites sur la Figure 4.18 (a) montrant la cartographie EBSD obtenue expérimentalement, bien que les couleurs rouges soient alors moins présentes.

Les figures de pôle associées, représentant les directions cristallographiques <001> dans le plan normal à Z, montrent que bien que des orientations de plus forte densité soient constatées, elles restent néanmoins très diffuses. Aucune texture marquée n'est donc identifiée dans la ligne de fusion numérique, résultat en accord avec les observations faites à partir de la figure de pôle expérimentale de la ligne de fusion.

La comparaison des résultats expérimentaux et de simulation de la ligne de fusion correspondant à la 4ème paramétrie montre ainsi que les distributions de taille et de rapport de forme des grains suivent des évolutions relativement similaires. Par ailleurs, l'étude des orientations a mis en évidence l'absence de texture dans la ligne de fusion simulée, ce qui correspond à l'observation faite expérimentalement. La modélisation proposée semble alors prometteuse pour l'étude de l'influence des paramètres opératoires sur les structures de grains formées, ainsi que pour la simulation des structures de grains générées dans un monocordon (*i.e.* ligne de fusion avec poudre).

Des différences entre résultats numériques et expérimentaux ont toutefois été constatées, qui peuvent s'expliquer notamment par les différences entre tailles de bains de fusion simulés et réels. En effet le bain simulé étant légèrement plus grand, le volume liquide est alors plus important, laissant davantage d'espace aux grains pour croitre, et donc favorisant la formation de grains plus grands que les grains réellement formés. La loi de croissance choisie pour modéliser la croissance granulaire est également un facteur potentiel d'erreur à considérer. Afin d'étudier cette influence, plusieurs lois de croissance sont comparées dans la suite.

4.2.3.2. Influence de la loi de croissance

Afin d'étudier l'impact de la loi de croissance dendritique, les structures de grains formées dans le cas de la ligne de fusion effectuée avec la 4ème paramétrie ont également été simulées avec les lois de Tan et Shin [Tan 2015] et de Zinovieva et al. [Zinovieva 2019], détaillées dans la section 4.2.2. Les résultats sont donnés dans le Tableau 4.8. En analysant les données du tableau et en observant la Figure 4.19, nous pouvons constater que les structures de grains prédites par le modèle de Tan et le nôtre sont similaires. En effet, la section moyenne des grains calculée pour les deux modèles diffère seulement de 5 % et le rapport de forme moyen de moins de 1 %. Par ailleurs, les distributions de tailles et de rapports de forme obtenues avec ces deux modèles suivent les mêmes tendances. A l'inverse, le modèle de Zinovieva prédit beaucoup moins de petits grains et sensiblement plus de grands grains que les deux autres lois (histogramme (a) de la Figure 4.19), et leur élancement est très légèrement moins marqué avec ce modèle. Cela signifie que les grains obtenus avec le modèle de Zinovieva sont plus larges que ceux prédits par les autres modèles, mais aussi que ceux formés expérimentalement.

Les structures de grains de la ligne de fusion réalisée à 400 W et 400 mm.s^{-1} obtenues pour chacune des trois lois de croissance sont visibles en coupe longitudinale sur la Figure 4.20. Nous pouvons constater que dans le cas des trois lois de croissance, les grains sont orientés selon la normale au

contour du bain fondu. Nous pouvons également remarquer que lorsque la vitesse de croissance dendritique augmente moins vite avec la surfusion (de la figure (a) vers la (c)), les grains formés sont plus larges et moins penchés dans la direction de balayage du laser. Cette constatation peut s'expliquer par le fait que le bain liquide formé dans le calcul AC est plus allongé dans le cas où la vitesse de croissance augmente plus lentement. En effet, pour une même vitesse de croissance (liée à la vitesse de déplacement du laser), la surfusion à l'arrière du bain, et donc l'écart entre l'extrémité des grains et l'isotherme de liquidus, est alors plus élevée. Le bain n'étant pas plus profond mais plus long, l'angle entre l'axe horizontal et le front arrière du bain, représenté sur la Figure 4.20, est donc plus petit. La croissance des grains se faisant principalement selon la direction normale au contour du bain, les grains vont ainsi croître selon une direction plus proche de l'axe vertical dans le cas d'un bain plus allongé. La surfusion maximale atteinte à l'arrière du bain, qui traduit le retard à la solidification responsable de la forme plus ou moins allongée des bains, est ainsi assez différente selon les modèles.

Tableau 4.8. Comparaison des caractéristiques des structures de grains de la ligne de fusion de la 4ème paramétrie calculées à partir des résultats numériques obtenus pour les trois lois de croissance considérées dans cette étude

Lois de croissance	Section moyenne (µm²)	Diamètre équivalent (µm)	Rapport de forme
Shin & Tan	518	25,7	2,99
Notre modèle	546	26,4	2,97
Zinovieva	641	28,6	2,74

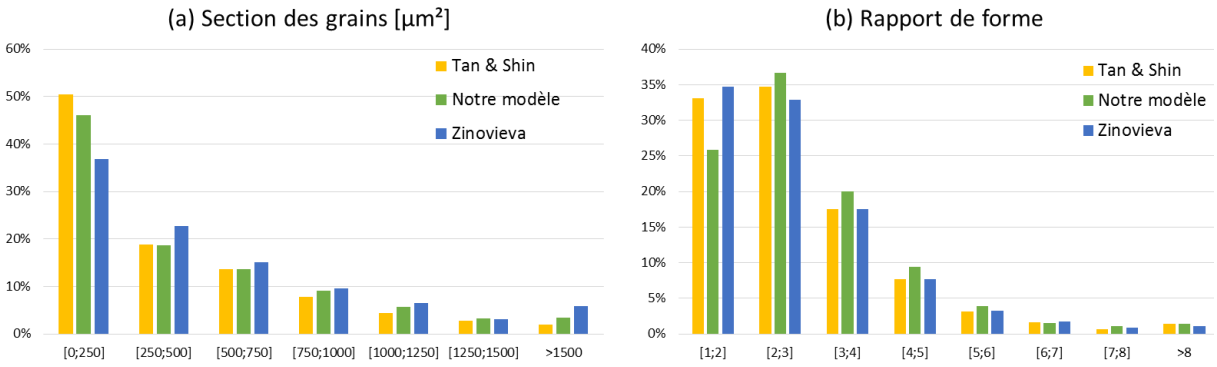


Figure 4.19. Distribution (a) des tailles et (b) des rapports de forme des grains dans la zone fondue de la ligne de fusion réalisée avec la 4ème paramétrie, simulée avec les 3 lois de croissance dendritique

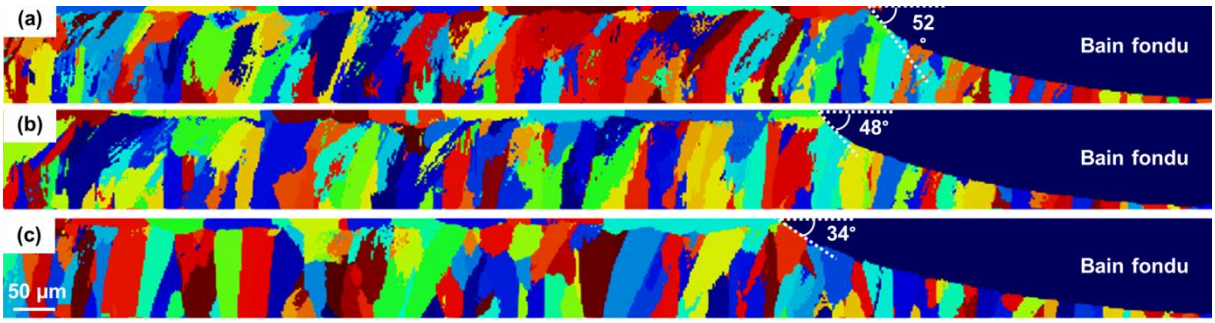


Figure 4.20. Structures de grains simulées en coupe longitudinale pour la ligne de fusion de la 4ème paramétrie avec la loi : (a) de Tan et Shin [Tan 2015], (b) définie dans notre modèle, (c) proposée par Zinovieva et al. [Zinovieva 2019].

L'augmentation de la section moyenne des grains de plus de 15 % observée avec le modèle de Zinovieva peut s'expliquer par les caractéristiques de cette loi de croissance, pour laquelle la vitesse de croissance n'augmente que très lentement avec la surfusion (Figure 4.14). En effet, un grain défavorablement orienté par rapport au gradient thermique G présentera un retard de croissance par rapport à ses voisins mieux alignés avec G, générant alors une augmentation de sa surfusion en pointe de dendrite (Figure 4.21). Or la vitesse de croissance en pointe de dendrite étant directement liée aux valeurs de surfusion par une loi puissance, l'augmentation de sa surfusion implique donc l'accélération de son taux de croissance. Dans le cas de la loi proposée par Zinovieva, les variations de surfusion ne modifient que très faiblement la vitesse de croissance des grains, comme le montre la courbe bleue sur la Figure 4.14. Par conséquent, l'ensemble des grains formés ont tous des vitesses de croissance très proches, ne permettant pas aux grains défavorablement orientés dont la surfusion est plus importante, de rattraper la croissance de leurs voisins mieux alignés avec le gradient thermique. Par conséquent, en bloquant rapidement la progression des grains voisins, les grains favorablement orientés vont croitre davantage, conduisant à une zone fondue composée de plus larges grains. Finalement, puisque cette loi génère des grains bien plus gros et surtout plus larges (section plus élevée et rapport de forme plus faible) que ceux observés expérimentalement, en favorisant la croissance compétitive, et puisqu'elle conduit à des valeurs de surfusion maximale très élevées, nous pouvons conclure que le modèle de Zinovieva n'est pas adapté à notre étude. La loi proposée par Tan et Shin prédit quant à elle des structures de grains très proches de celles obtenues avec notre modèle, et ne semble donc pas permettre d'améliorer le modèle de croissance. De plus, la loi de croissance définie dans notre modèle tenant compte du matériau utilisé ainsi que des caractéristiques des champs thermiques, calculées pour nos conditions d'essai grâce à la simulation du procédé, nous faisons le choix de poursuivre l'étude des lignes de fusion avec le modèle identifié dans le cadre de cette thèse.

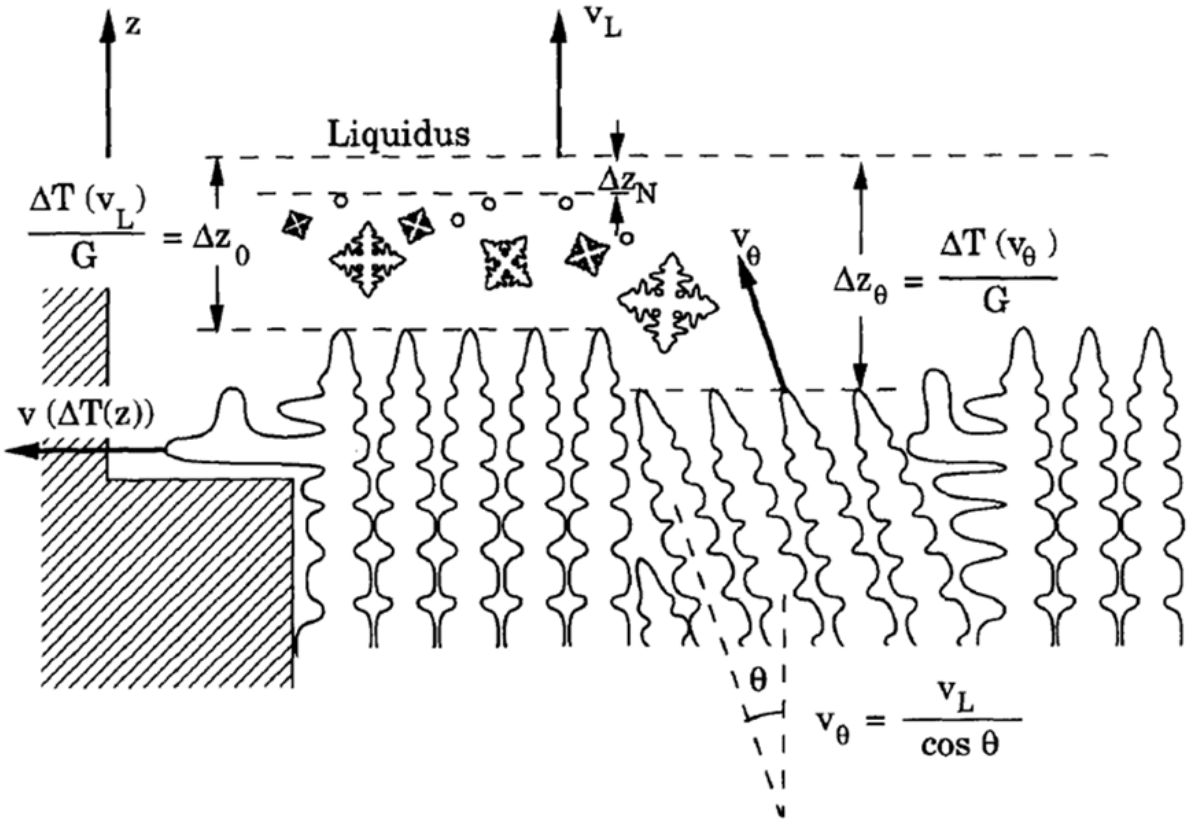


Figure 4.21. Illustration schématique de la solidification en pointes de dendrites et de quelques grandeurs physiques intervenant [Rappaz 1993]

4.2.3.3. Influence des paramètres opératoires

Afin d'appréhender l'influence des paramètres opératoires sur les structures de grains générées, les caractéristiques des grains simulés pour les trois paramétries sont comparées. Les tailles de grains et rapports de forme moyens dans les coupes transverses sont regroupés dans le Tableau 4.9 et leur distribution est présentée sur la Figure 4.22. Ces données ont été calculées à partir d'une population de plus de 1200 grains pour chaque condition, ce qui permet de les considérer comme des caractéristiques représentatives de la coupe transverse. Bien que d'autres informations relatives aux grains puissent résulter des simulations AC comme leur volume par exemple, nous nous sommes limités au rapport de forme et à la section transverse afin d'être en adéquation avec les données obtenues expérimentalement.

Tableau 4.9. Comparaison des caractéristiques des structures de grains en coupe transverse calculées à partir des résultats de simulation des lignes de fusion effectuées pour les trois différentes paramétries

Puissance (W)	Vitesse (mm.s^{-1})	Section moyenne (µm²)	Diamètre équivalent (µm)	Rapport de forme
320	400	477	24,6	2,77
400	400	546	26,4	2,97
400	310	567	26,9	3,07

La première tendance que nous pouvons observer en analysant ces données est qu'à puissance constante, une réduction de la vitesse entraine une légère augmentation de la section moyenne des grains (4 %) notamment liée à la hausse du nombre de grands grains (> 1000 µm²). Une très légère augmentation de l'élancement moyen des grains peut également être observée, avec davantage de grains fortement colonnaires (histogramme (b) de la Figure 4.22). A l'inverse, à vitesse constante, une réduction de puissance entraine une diminution de 12 % de la section moyenne des grains, causée par la hausse du nombre de grains de très petites tailles (< 250 µm²) et par la baisse de celui de très grands grains (> 1250 µm²). De plus, nous pouvons constater que la réduction de puissance s'accompagne également par la diminution du rapport de forme (de 7 %) notamment due à une forte augmentation de la quantité de grains peu élancés (rapport de forme inférieur à 3).

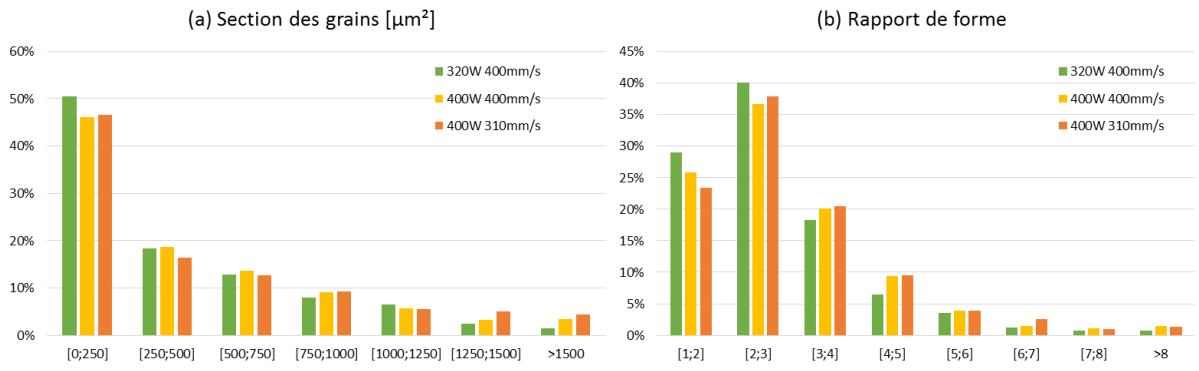


Figure 4.22. Distribution : (a) de la section et (b) du rapport de forme des grains des lignes de fusion simulées pour les trois paramétries

Ces constatations montrent que lorsque l'énergie linéique (*i.e.* le rapport puissance sur vitesse) augmente par augmentation de la puissance ou diminution de la vitesse, la taille des grains augmente également tout comme le rapport de forme. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que pour une énergie linéique plus importante, le refroidissement est plus lent et le gradient thermique

moins marqué (4.1.6). L'obtention d'un gradient thermique moins marqué implique des variations de températures moins importantes pour une même distance.

De ce fait, les grains dont la désorientation par rapport au gradient thermique est plus importante que celle de leurs voisins plus favorablement orientés, verront leurs pointes de dendrites atteindre des surfusions moins importantes dans le cas d'une énergie linéique élevée que dans celui d'une énergie linéique faible. Ainsi, leur croissance sera plus lente à énergie linéique faible et donc leurs chances de dépasser leurs voisins plus lents mais plus favorablement orientés, réduites. Par conséquent, l'augmentation de l'énergie linéique favorise la compétition de croissance entre les grains, conduisant à l'obtention d'une structure granulaire composée de grains plus grands. De plus, le ralentissement du refroidissement à énergie linéique plus élevée laisse davantage de temps aux grains pour croître, augmentant ainsi leur taille.

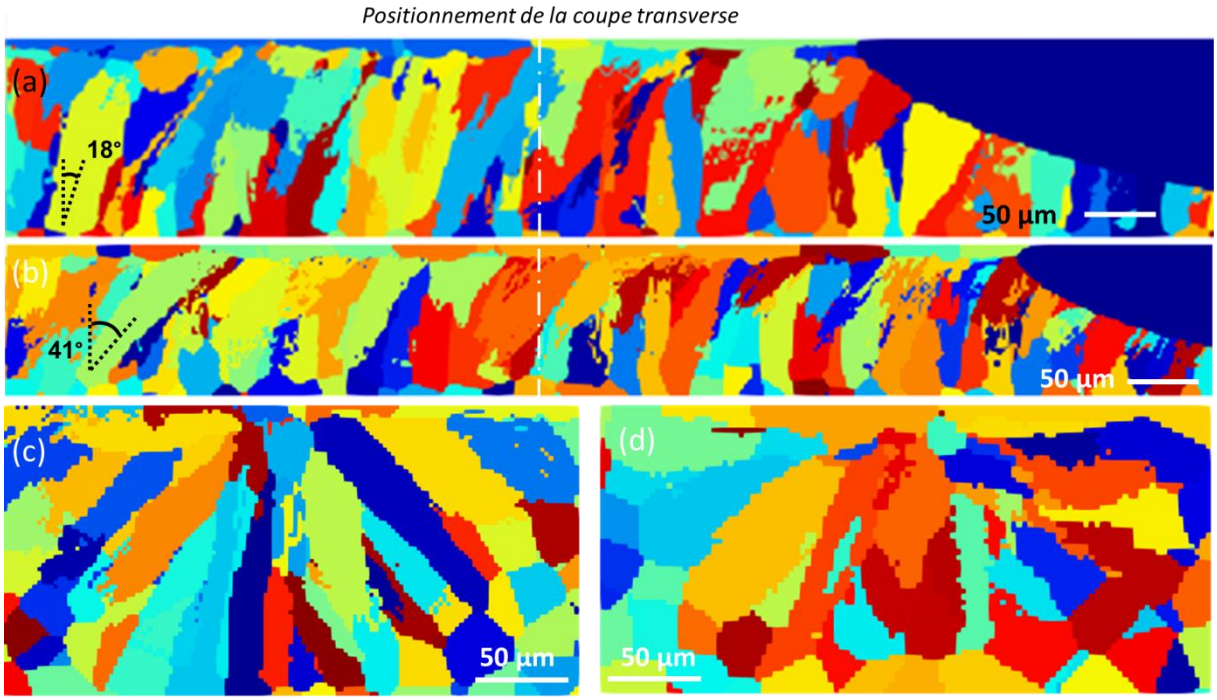


Figure 4.23. Structures de grains simulées observées en coupe longitudinale (a-b) et en coupe transverse (c-d) pour les lignes de fusions effectuées : (a et c) à 400 W et 310 mm.s^{-1} et (b et d) à 320 W et 400 mm.s^{-1}

Une autre explication possible à l'obtention de grains plus larges à énergie linéique plus élevée, provient du fait que la direction principale du gradient thermique varie avec l'évolution de la vitesse de balayage. Une réduction de la vitesse de déplacement du laser contribue notamment à renforcer l'alignement du gradient thermique avec l'axe vertical. Les grains observés en coupe transverse correspondent alors à des « tranches » de grains verticales plutôt qu'à des sections de grains inclinés dans la direction d'avance du laser, ce qui génère une augmentation non négligeable de la surface des grains observés dans les coupes transverses. La Figure 4.23 permet d'illustrer ce phénomène. Cette analyse permet également d'expliquer le fait que les grains formés en coupe transverse présentent aussi un rapport de forme plus élevé dans le cas de fortes énergies linéiques.

4.3. Conclusion

4.3.1. Simulation du procédé

L'étude expérimentale des lignes de fusion nous a aidés à définir la source de chaleur utilisée pour la modélisation du procédé. Nous avons notamment pu constater que l'utilisation d'une source de

chaleur volumique dont les paramètres géométriques sont définis à partir des dimensions du faisceau laser permet dans une première approche de retrouver les caractéristiques principales du bain observées expérimentalement. Les bains simulés sont en effet en forme caractéristique de goutte d'eau, arrondis à l'avant et allongés à l'arrière. Le calage de la puissance de la source de chaleur par l'ajustement du rendement a permis de retrouver des dimensions de bain relativement proches des bains fondus observés expérimentalement. Un bon accord a ainsi été obtenu entre longueurs expérimentale et numérique, et entre largeur observée et simulée. La zone fondue est cependant systématiquement plus profonde dans la simulation. Par ailleurs, l'étude de l'évolution des caractéristiques du bain en fonction des paramètres opératoires appliqués au cours du procédé, a permis de retrouver la même tendance que celle observée expérimentalement. Le modèle purement conductif défini dans le cadre de la thèse a donc montré sa capacité à prédire de façon réaliste le bain fondu formé au cours du procédé LBM.

Une fois le modèle thermique validé pour les lignes de fusion réalisées par procédé LBM, la simulation de leur fabrication nous a permis de compléter les informations relatives à la thermique déjà recueillies avec l'analyse expérimentale, et notamment d'étudier les grandeurs dirigeant la solidification à savoir le gradient thermique G et le taux de croissance V. L'étude de l'évolution de ces deux grandeurs le long du front de solidification a mis en avant le fait que le gradient de température est maximal en début de solidification (sur les bords du bain) et minimal en fin de solidification (*i.e.* à l'arrière du bain), à l'inverse du taux de croissance, et ce quelle que soit la paramétrie testée. Par ailleurs, nous avons pu constater que les variations des valeurs de G le long du front au sein d'un plan perpendiculaire à la direction de déplacement du laser sont quasiment nulles. Ces constatations indiquent que les conditions de solidification sont relativement similaires dans une section transverse du bain mais qu'elles varient sensiblement entre la zone de début et celle de fin de solidification. Par conséquent, des structures de grains différentes pourraient être constatées entre ces deux zones, et une transition colonnaire-équiaxe n'est pas à exclure.

La comparaison des valeurs de G et V obtenues pour chacune des paramétries simulées nous a également permis d'appréhender l'influence des paramètres opératoires sur la thermique du procédé. Tout d'abord, il a été observé que la valeur de G à l'arrière du bain augmentait lorsque l'énergie linéique fournie au système diminuait. Ensuite, il a été révélé que l'application sur le substrat d'une énergie linéique plus faible conduisait à la formation d'un bain plus petit, mais aussi à des valeurs de G et V plus fortes le long du front de solidification, pouvant entrainer un raffinement de la structure de grains obtenue.

4.3.2. Structures de grains simulées

Suite à l'étude numérique des structures de grains formées dans les lignes de fusion, plusieurs résultats ont été obtenus.

Tout d'abord, la comparaison des structures de grains des substrats observées numériquement et expérimentalement nous a permis de constater que les grains simulés sont légèrement plus petits, différence provenant du choix des paramètres de la distribution de taille des grains de la structure initiale modélisée. L'observation de la zone fondue simulée a montré des grains colonnaires formés par épitaxie à partir des grains initialement situés dans le substrat, ne présentant pas de texture cristallographique particulière, conformément à ce qui a été observé expérimentalement. De plus, la confrontation en coupe transverse des rapports de forme et surfaces moyennes des grains formés numériquement et expérimentalement dans la zone fondue a révélé des structures granulaires 20 % plus grandes mais légèrement moins allongées dans la ZF simulée. Cependant, les distributions de taille et rapport de forme sont très proches dans les deux cas.

Plusieurs sources d'erreur expliquant ces écarts ont été identifiées, parmi lesquelles les différences de caractéristiques du bain entre simulation et expérience ainsi que la loi de croissance dendritique choisie. Afin d'étudier plus en détails l'influence de cette loi sur les structures de grains formées, les résultats obtenus avec la loi de croissance identifiée dans cette étude ont été comparés à ceux obtenus avec deux autres lois de croissance, issues de la littérature. Cette étude nous a montré qu'une loi de croissance dont les variations de vitesse sont très lentes par rapport aux variations de surfusion entraine la formation d'une zone fondue bien plus allongée, et des grains plus gros et larges que ceux observés expérimentalement, davantage alignés avec l'axe vertical. Ce résultat a été expliqué par le fait que ce type de loi favorise la compétition de croissance entre les grains. Cette comparaison entre les différentes lois de croissance a également montré que notre modèle de croissance granulaire était le plus adapté à la modélisation des lignes de fusion.

Une fois la loi de croissance fixée, trois configurations de lignes de fusion ont été simulées afin d'étudier l'influence de la puissance et de la vitesse sur les structures de grains formées. Nous avons notamment pu constater qu'à plus forte énergie linéique, par augmentation de la puissance ou diminution de la vitesse, les grains formés étaient plus grands et allongés. De plus, nous avons pu constater que cette augmentation d'énergie linéique contribuait à renforcer l'alignement entre l'axe des grains colonnaires et l'axe vertical de la pièce. Le modèle semble donc permettre d'observer l'influence des paramètres opératoires sur les structures de grains formées.

Nous avons montré dans ce chapitre la capacité du modèle CAFE à prédire des structures de grains réalistes et proches de celles étudiées expérimentalement pour une configuration ligne de fusion, ainsi que son aptitude à prendre en compte l'influence des paramètres opératoires sur la formation des grains. Dans le chapitre suivant, le modèle est adapté à la configuration avec poudre afin d'évaluer la capacité de la modélisation CAFE à reproduire les structures de grains formées au cours de la réalisation des premières couches fabriquées.

Chapitre 5 Simulation des monocordons

5.1. Simulation du procédé 145
5.1.1. Domaine d'étude et maillage 145
5.1.2. Propriétés matériaux 147
5.1.3. Conditions initiales et aux limites 148
5.1.4. Apport de chaleur 148
5.1.5. Calibration de la source de chaleur 150
5.1.6. Champs de températures et vitesses de solidification 152
5.1.7. Discussion 157
5.2. Simulation des structures de grains 159
5.2.1. Initialisation du domaine automate cellulaire 159
5.2.2. Loi de croissance dendritique 160
5.2.3. Évolution d'un grain au cours de la solidification 160
5.2.4. Structures granulaires simulées 161
5.3. Conclusion 168
5.3.1. Simulation du procédé 168
5.3.2. Simulation des structures de grains 169

L'influence sur les structures de grains de l'apport de matière sous forme de poudre est étudiée dans ce chapitre. L'apport de matière est en effet à considérer puisque qu'il modifie la géométrie du bain liquide ainsi que les transferts de chaleur pilotant les mécanismes de solidification. La démarche adoptée dans ce chapitre est similaire à celle de l'étude des lignes de fusion, appliquée sur une géométrie monocordon. La comparaison des résultats expérimentaux présentés dans le Chapitre 3 aux résultats de simulation obtenus pour les différents paramètres procédés appliqués est également faite. Nous détaillerons en particulier, les paramétries 4 et 5, rappelée dans le Tableau 5.1.

Tableau 5.1. Paramétries retenues pour la simulation numérique des monocordons

Paramétries	P (W)	v (mm.s^{-1})	E (J.mm^{-3})	P/v (J.mm^{-1})
4ème	400	400	56,59	1
5ème	600	400	84,88	1,5

L'étude d'une géométrie monocordon permet également d'appréhender le comportement des mécanismes de solidification en début de fabrication additive. En effet, le monocordon offre la possibilité d'étudier les structures de grains en intégrant l'apport de matière en s'affranchissant de l'aspect additif de la construction d'une pièce réelle. Pour cela, nous nous appuierons sur la simulation du procédé avec apport de matière, puis sur la prédiction de l'automate cellulaire basée sur le champ de température généré par le procédé. Dans ce chapitre, les spécificités de la simulation procédé pour la fabrication avec apport de matière sont d'abord abordées puis les géométries de bain simulées et réelles sont comparées afin que les avantages et limitations du modèle proposé soient identifiés. L'adaptation du modèle AC à la configuration avec apport de poudre est également détaillée. Enfin les géométries et orientations cristallographiques des structures de grains prédites par simulation sont comparées aux résultats expérimentaux.

5.1. Simulation du procédé

Pour estimer les champs de températures, nous détaillons, dans les cinq premières sections, l'adaptation à la configuration monocordon du modèle défini dans la section 2.2 (géométrie du domaine, propriétés matériaux, conditions aux limites, apport de chaleur et calibration de la source de chaleur). Les résultats thermiques obtenus à l'issue des simulations sont ensuite présentés (5.1.6) puis discutés (5.1.7).

5.1.1. Domaine d'étude et maillage

Tout comme nous l'avons expliqué dans le chapitre précédent, la définition du domaine d'étude doit s'effectuer en trouvant un équilibre entre un maillage raisonnablement coûteux en terme de temps de calcul et un maillage suffisamment raffiné pour permettre de reproduire les dimensions du bain (4.1.1). Afin de satisfaire ces deux critères, seuls 3 mm de la longueur totale du cordon sont modélisés. Cette longueur réduite limite le nombre d'éléments à considérer mais permet néanmoins d'atteindre le régime stationnaire du bain. Par ailleurs, les résultats expérimentaux ayant mis en avant une symétrie du bain par rapport au plan de déplacement du laser, seule la demi-largeur du système est modélisée. Les champs thermiques sont symétrisés à l'issue des calculs puis transmis aux AC.

Le maillage généré est visible sur la Figure 5.1. Il correspond à celui présenté dans la section 4.1.1, sur lequel a été ajouté un bloc d'éléments correspondant au lit de poudre. La hauteur du lit de

poudre est fixée à 50 µm, et correspond en réalité à la hauteur du cordon finalement obtenu. La zone d'intérêt, modélisée en rouge, est composée d'éléments cubiques de 5 µm de côté.

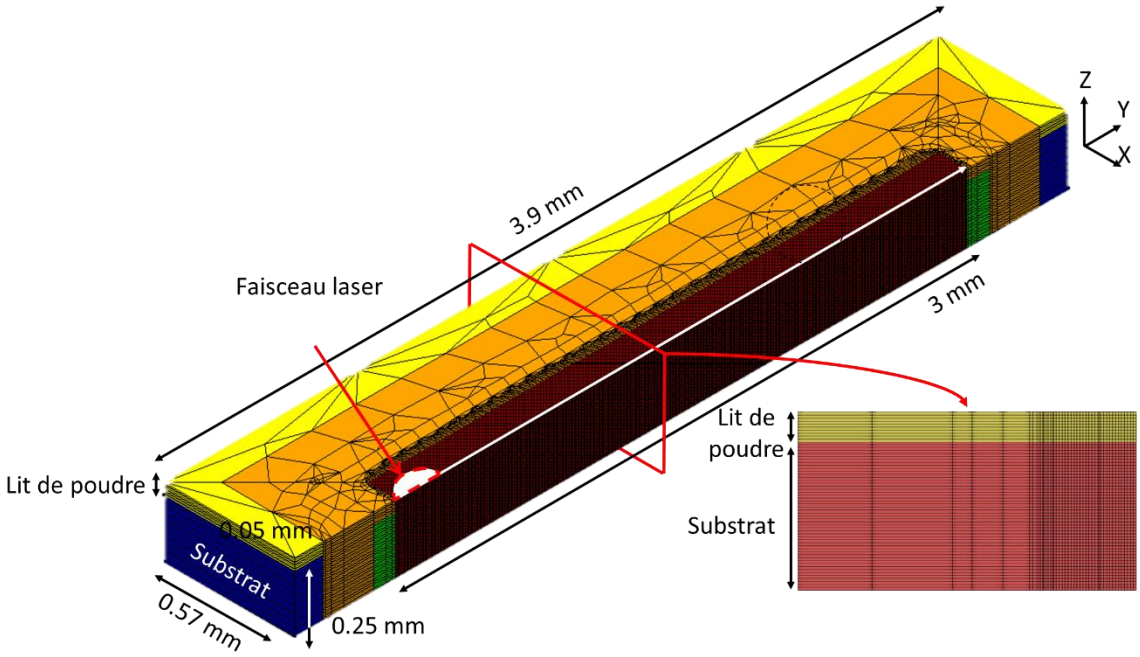


Figure 5.1. Géométrie et maillage élément fini représentant le système monocordon (substrat + lit de poudre)

Dans la configuration monocordon, le système initial est composé du substrat et du lit de poudre. Le maillage éléments finis est donc initialement partagé en deux parties : une zone correspondant au substrat ($z < 0$) et une zone correspondant au lit de poudre ($z > 0$). Pour différencier ces deux états de la matière, les éléments sont placés dans des groupes distincts auxquels sont attribuées les propriétés matériau du milieu qu'ils modélisent (5.1.2). Au cours de la fabrication, un nouvel état « Air » est défini et donc un troisième groupe est créé, contenant les propriétés de l'air. La création de ce nouvel état est motivée par les observations rencontrées dans la littérature. En effet, nous avons vu dans la partie 1.2.3.2 qu'il se forme au cours du procédé LBM une zone vide de poudre aux abords directs du bain, nommée zone de dénudation. Cette zone influençant directement la thermique du procédé, notamment en limitant l'évacuation de la chaleur vers le lit de poudre et donc en favorisant l'évacuation de la chaleur vers le substrat, nous avons donc choisi de l'inclure dans le modèle numérique.

Contrairement au nombre d'éléments du maillage, le nombre d'éléments rattachés aux différents groupes varie tout au long de la simulation. Seuls certains éléments poudre sont susceptibles d'évoluer d'un groupe à l'autre, ceux modélisant le substrat ou représentant l'air n'étant pas amenés à évoluer au cours du calcul. Le changement de propriétés d'un élément représentant la poudre s'effectue dans les deux situations suivantes :

- La température de l'élément dépasse la température de fusion de la poudre : dans ce cas le matériau devient liquide et récupère les propriétés matériaux du matériau dense ;
- La température de l'élément reste inférieure à la température de fusion et l'élément se situe dans la zone modélisant la zone de dénudation : l'élément se voit attribuer les propriétés de l'air.

Les conditions d'évolution des propriétés matériau sont résumées dans le Tableau 5.2. Si le transfert d'un élément du groupe poudre vers le groupe rattaché au matériau dense peut être piloté par la

thermique, il semble complexe de gérer la zone de dénudation uniquement *via* les conditions thermiques. La prise en compte de l'apport de poudre dans le bain et les éjections nécessitant un surcoût numérique important [Khairallah 2016], des conditions de transition géométriques sont ici proposées afin de permettre le transfert de certains éléments poudre vers le groupe « air ». Ainsi, deux grandeurs géométriques y_{ZD} et L_{ZD} sont définies afin de générer numériquement la zone de dénudation (Figure 5.2). Pour cette étude, la demi-largeur L_{ZD} est fixée à 110 µm et dans la direction de balayage, nous considérons que la zone de dénudation se forme à l'arrière de la zone d'interaction laser-matière, donnant la relation suivante :

$$y_{ZD} = y_{laser} - c_r \tag{59}$$

où y_{laser} correspond à la position selon l'axe Y du centre du faisceau laser et c_r à la demi-longueur arrière de la source de chaleur (5.1.4).

Tableau 5.2. Conditions d'évolution des propriétés matériaux attribuées aux éléments finis.

Matériau initial de rattachement	Condition d'évolution	Matériau final de rattachement
Poudre	$T > T_{Liq_p}$	Matériau dense
Poudre	$T < T_{Liq_p}$ $y_{élément} < y_{ZD}$ $x_{élément} \in L_{ZD}$	Air

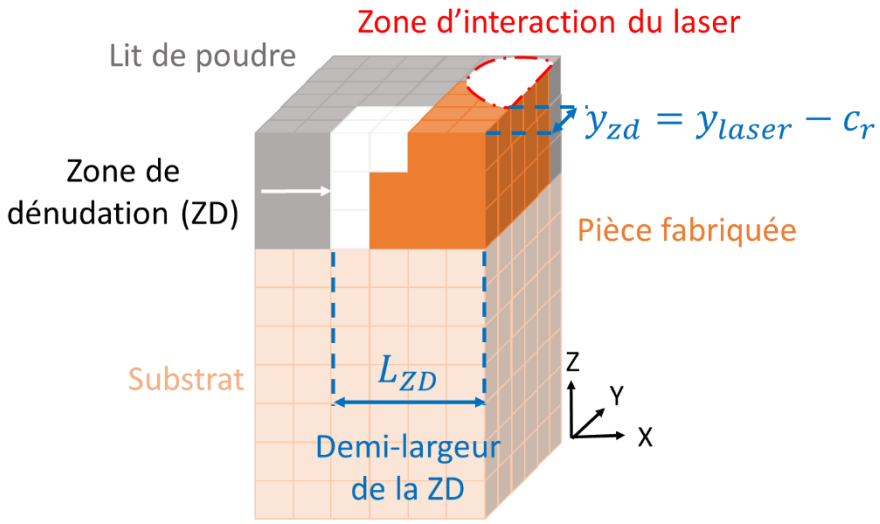


Figure 5.2. Représentation schématique des différents domaines intervenant dans la modélisation par éléments finis de la fabrication d'une géométrie monocordon

Il est important de noter que si la hauteur de matière déposée dépasse celle du lit de poudre, ce modèle n'est alors pas prédictif. En effet, seuls les éléments poudre peuvent être rattachés au matériau dense. La forme du cordon reste néanmoins uniquement pilotée par la thermique du bain.

5.1.2. Propriétés matériaux

Les propriétés des matériaux doivent être renseignées dans le modèle EF pour que l'équation de conservation de l'énergie puisse être résolue. Les grandeurs indispensables à la définition du matériau sont listées dans la section 2.2.2.5. Les valeurs attribuées au matériau dense (substrat et

cordon formé) sont extraites des travaux de thèse de Depradeux [Depradeux 2004] et sont rassemblées en Annexe 1. Concernant la poudre, nous choisissons de modéliser la couche déposée comme étant un milieu continu homogène. L'hypothèse est faite que la capacité calorifique de ce milieu C_{p_p}, est identique à celle du matériau dense C_p [Hussein 2013, Liu 2018b]. Sa conductivité thermique λ_p quant à elle, est considérée égale à 1 % de celle du substrat, λ [Zhang 2019b]. Sa densité ρ_p, est reliée à celle du substrat ρ selon la relation suivante :

$$\rho_p = \rho(1-\alpha) \tag{60}$$

où α correspond à la porosité du lit de poudre. Enfin, sa température de fusion T_{Liq_p} est fixée à 1200 °C. En comparant les densités des matériaux 316L poudre et massif (3.2), il ressort que le lit de poudre est 44 % moins dense que le substrat. Après étalement et tassement de la poudre, la valeur de porosité finale retenue pour la modélisation est de 40 %.

Les propriétés de l'air sont présentées sous forme de tableau en Annexe 1 [Çengel 2014].

5.1.3. Conditions initiales et aux limites

Les conditions initiales et aux limites sont identiques à celles appliquées pour la configuration ligne de fusion à savoir :

- Une température initiale de 20 °C appliquée sur l'ensemble du maillage ;
- Un flux de chaleur équivalent, permettant de prendre en compte l'effet de la convection, défini tel que :

$$\varphi_{eq} = h_{eq} \,.\, (T_\infty - T) \tag{61}$$

avec T_∞ et T les températures externe et du système respectivement, exprimées en °C, et h_{eq} le coefficient d'échange équivalent en W.m^{-2}.°C^{-1}.

L'effet du rayonnement est intégré *via* le choix de la valeur du coefficient équivalent d'échange, qui est fixée à 10 W.m^{-2}.°C^{-1} sur la face supérieure du lit de poudre et à 10^3 W.m^{-2}.°C^{-1} sur les autres faces, permettant ainsi de modéliser le pompage thermique du substrat. Aucune condition aux limites n'est appliquée sur la face commune au lit de poudre et au substrat.

5.1.4. Apport de chaleur

Nous avons vu précédemment qu'excepté au cours de la phase d'amorçage du faisceau laser ou dans le cas où des particules de poudre se retrouvent sous le faisceau, le laser interagit exclusivement avec le bain liquide. Notre modèle étant purement conductif, pour modéliser la distribution de chaleur dans le liquide, il a été choisi d'adopter un modèle de source volumique proche du modèle « Goldak » utilisé pour la modélisation des lignes de fusion (4.1.4). En forme de quadruple ellipsoïde, elle permet de décomposer la répartition de la chaleur en quatre zones distinctes, identifiées par les indices f ou r pour distinguer les parties avant (*front*) et arrière (*rear*) du bain respectivement, et u ou b pour repérer les parties haute (*up*) et basse (*bottom*). La source est définie par :

- Ses paramètres géométriques, représentés sur la Figure 5.3 : sa demi-largeur (a), sa hauteur (b_u), sa profondeur (b_b) et ses demi-longueurs avant et arrière (c_f) et (c_r).

- Sa puissance effective Q, correspondant à la puissance totale du laser corrigée par son rendement η, liée aux paramètres géométriques par les équations suivantes :

$$z > 0 \quad y > 0 \qquad q_{uf}(x,y,z) = \frac{3\sqrt{3}Qf_{uf}}{a.b_u.c_f.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2}+\frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_f}^2}+\frac{(z-z_0)^2}{{b_u}^2}\right)\right) \tag{62}$$

$$z > 0 \quad y < 0 \qquad q_{ur}(x,y,z) = \frac{3\sqrt{3}Qf_{ur}}{a.b_u.c_r.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2}+\frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_r}^2}+\frac{(z-z_0)^2}{{b_u}^2}\right)\right) \tag{63}$$

$$z < 0 \quad y > 0 \qquad q_{bf}(x,y,z) = \frac{3\sqrt{3}Qf_{bf}}{a.b_b.c_f.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2}+\frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_f}^2}+\frac{(z-z_0)^2}{{b_b}^2}\right)\right) \tag{64}$$

$$z < 0 \quad y < 0 \qquad q_{br}(x,y,z) = \frac{3\sqrt{3}Qf_{br}}{a.b_b.c_r.\pi\sqrt{\pi}}.exp\left(-3\left(\frac{(x-x_0)^2}{a^2}+\frac{(y-vt-y_0)^2}{{c_r}^2}+\frac{(z-z_0)^2}{{b_b}^2}\right)\right) \tag{65}$$

$$f_{uf} + f_{ur} + f_{bf} + f_{br} = 4 \tag{66}$$

où les coefficients $f_{u/b,f/r}$ correspondent aux poids de chacune des ellipsoïde, et v la vitesse de déplacement de la source se déplaçant selon l'axe Y. Dans le cas où la trajectoire serait plus complexe, il suffit simplement de modifier les valeurs de x, y et z intégrées dans les équations de densités de chaleur volumiques pour que le modèle de source volumique reste adapté.

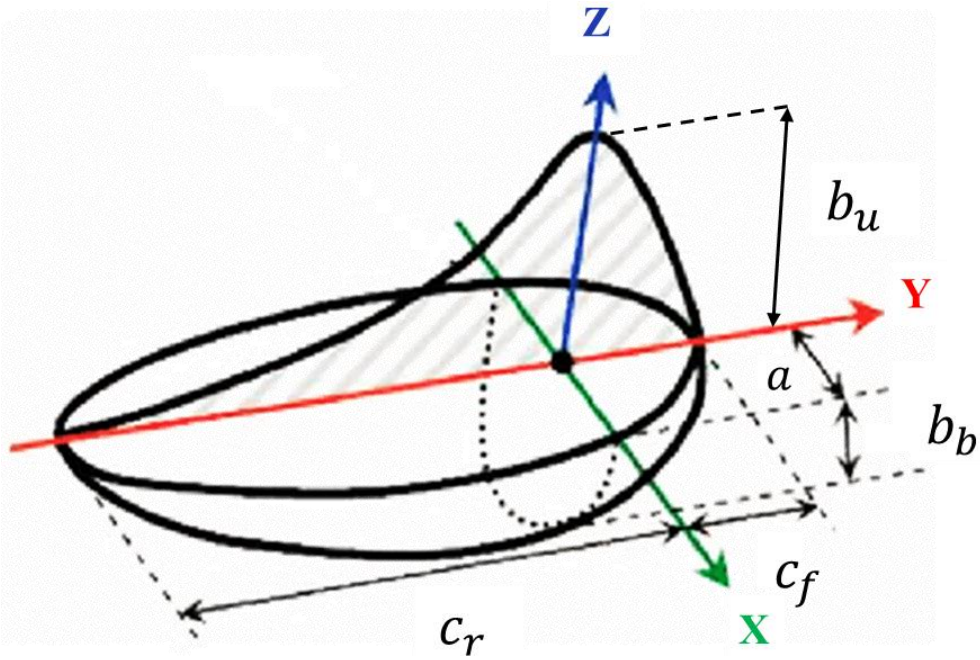


Figure 5.3. Représentation schématique de la source de chaleur volumique utilisée dans le modèle thermique du procédé pour l'application monocordon [Moradi 2016]

Le choix d'une source volumique décomposée en quatre ellipsoïdes permet de différencier l'apport de chaleur à l'avant et à l'arrière de la source mais aussi et surtout de distinguer l'apport d'énergie fourni au substrat de celui transmis au lit de poudre. En effet la source est définie de façon à ce que la contribution des termes q_{uf} et q_{ur} n'affectent que les éléments situés selon l'axe Z positif, alors

que les termes q_{bf} et q_{br} n'agissent que sur les éléments appartenant au substrat (ayant des valeurs de Z négatives). Les valeurs choisies pour les paramètres géométriques et pour le rendement sont discutées dans la section suivante.

5.1.5. Calibration de la source de chaleur

Les paramètres géométriques de la source ont été fixés à partir des dimensions du faisceau laser et de la hauteur initiale du lit de poudre. Le laser utilisé sur le banc d'essai instrumenté étant de 150 µm de diamètre focal (3.1.1), les demi-longueurs avant et arrière de la source, ainsi que sa demi largeur sont fixées à 75 µm ($c_f = c_r = a = 75$ µm). Le lit de poudre étant de 50 µm d'épaisseur, la hauteur de la source b_u est de 50 µm, et dans un souci de symétrie la profondeur de la source b_b est également établie à 50 µm. Concernant le poids de chaque ellipsoïde, le choix a été fait qu'elles contribuent à parts égales afin d'assurer une continuité du flux de chaleur, conduisant à l'égalité $f_{uf} = f_{ur} = f_{bf} = f_{br} = 1$. Afin de s'approcher des dimensions en surface du bain fondu obtenues expérimentalement (à plus ou moins 10 %), la calibration de la source de chaleur réside dans l'ajustement de son rendement. En effet, le rendement numérique permet d'intégrer les pertes d'énergie dues aux réflexions, projections et perturbations du bain. Pour rappel, le bain numérique est délimité par la surface correspondant à l'isotherme de liquidus. Les valeurs des paramètres appliqués à la source sont résumées dans le Tableau 5.3.

Tableau 5.3. Paramètres retenus pour le modèle de source de chaleur pour les deux paramétries

Paramètres (µm)	a	b_u	b_b	c_f	c_r	Q (W)	$\eta^{4^{ème}}$	$\eta^{5^{ème}}$
Valeurs	75	50	50	75	75	ηP	0.39	0.35

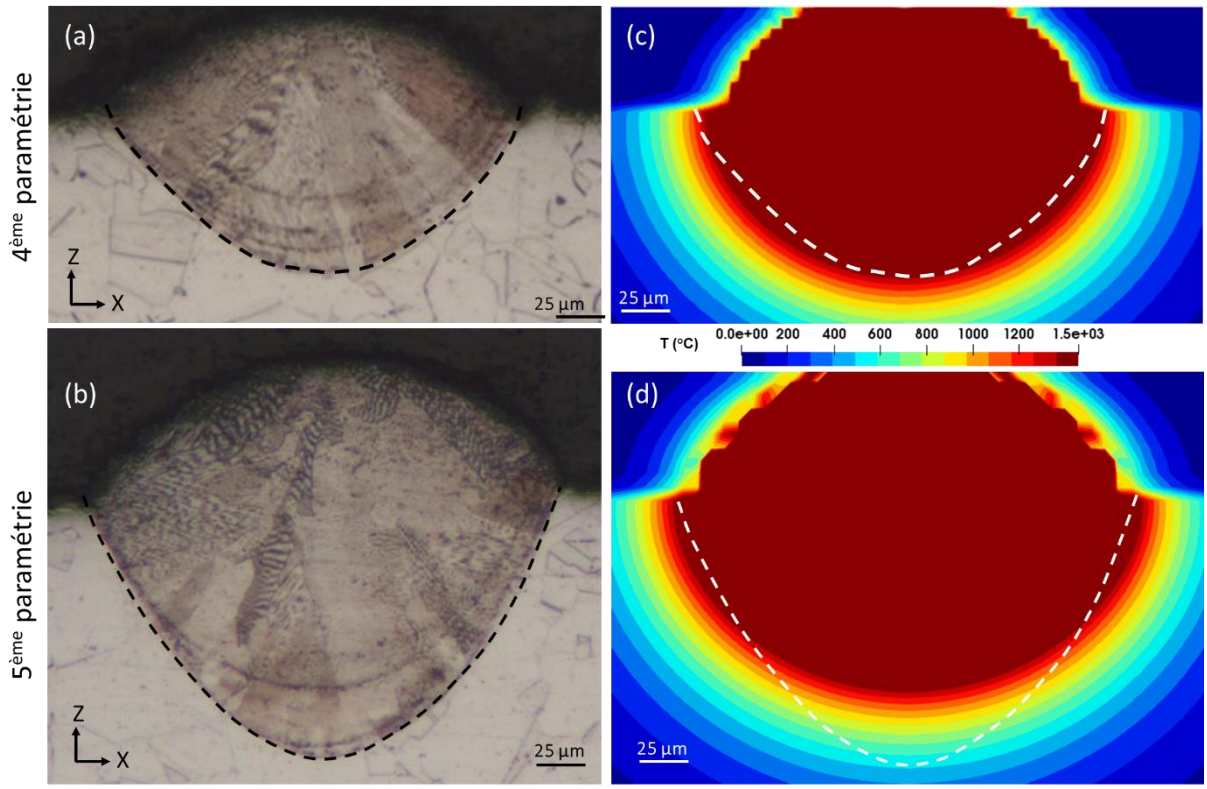


Figure 5.4. Coupes transverses du bain fondu obtenu (a-b) expérimentalement et (c-d) numériquement pour la configuration monocordon. Les lignes pointillées correspondent au contour expérimental du bain

Les coupes transverses des bains fondus expérimentaux et simulés sont visibles sur la Figure 5.4. L'échelle appliquée pour visualiser les résultats de simulation a pour valeur maximale la température de liquidus afin de simplifier la visualisation du bain. Nous pouvons constater que le bain simulé est plus arrondi que celui observé sur les microscopies optiques. Un décalage entre les largeurs de bains de fusion dans la poudre et dans le substrat peut également être observé au niveau de la ligne triple du bain simulé (figures (c) et (d)), décalage non constaté expérimentalement. Il ressort également de cette figure que le bain simulé pour la 5ème paramétrie est moins pénétrant que celui formé expérimentalement. La Figure 5.5 permet de confronter les bains réels et numériques en vue de dessus. Un bon accord en terme de géométrie de bain est constaté pour les deux configurations, bien que le bain soit plus arrondi à l'arrière dans les résultats de simulation, et très légèrement plus long pour la 4ème paramétrie.

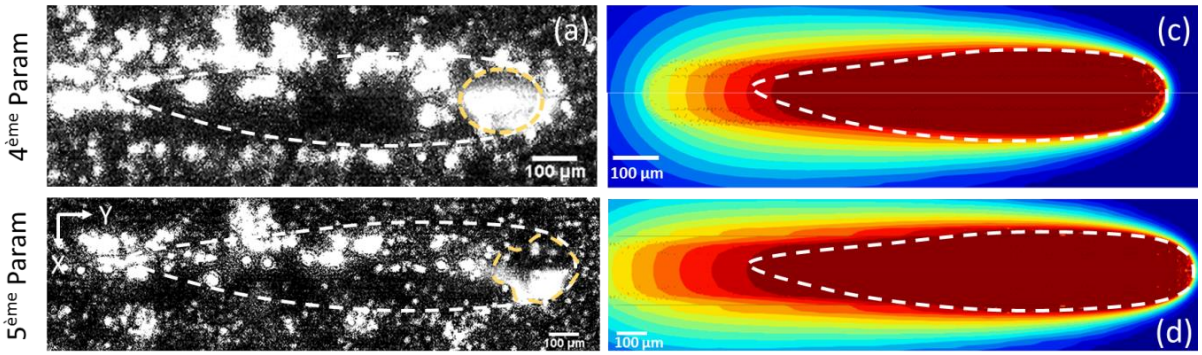


Figure 5.5. Vues de dessus du bain fondu obtenu (a-b) expérimentalement et (c-d) numériquement pour la configuration monocordon. Les lignes pointillées blanches correspondent au contour expérimental du bain

Tableau 5.4. Dimensions de bains fondus obtenus expérimentalement et numériquement pour les deux paramétries étudiées. E_r correspond à l'erreur relative calculée en prenant pour référence les données expérimentales

	4ème paramétrie (400 W, 400 mm/s)			**5ème paramétrie (600 W, 400 mm/s)**		
Valeurs (µm)	Expé.	Num. (η = 0.39)	E_r	Expé.	Num. (η = 0.35)	E_r
Largeur	222	218	- 1.8 %	242	258	6.6 %
Hauteur déposée	48	50	4.2 %	68	50	- 26.5 %
Pénétration	91	89	2.2 %	137	105	- 23.4 %
Profondeur totale	140	139	- 0.7 %	205	158	- 22.9 %
Longueur	947	984	3.9 %	1300	1303	0.2 %

Les dimensions du bain obtenu expérimentalement et numériquement sont données dans le Tableau 5.4. Nous pouvons constater un très bon accord entre les valeurs issues de la simulation et celles extraites des essais dans le cas de la 4ème paramétrie puisque l'erreur relative sur les longueur, largeur et hauteur est systématiquement inférieure à 4 %. Pour les longueurs et largeurs de la cinquième paramétrie, un bon accord est également constaté entre résultats expérimentaux et numériques (erreur relative inférieure à 7 %). Néanmoins, la profondeur totale du bain numérique est inférieure de plus de 20 % à celle observée expérimentalement. Cet écart est constaté dans la

partie pénétrante et dans la hauteur de matière déposée (insuffisantes dans la simulation). Un meilleur accord est donc obtenu pour le monocordon fabriqué avec une puissance de 400 W que pour celui réalisé à 600 W. Cette constatation peut s'expliquer par le fait que le bain formé à 400 W présente une géométrie plus circulaire qu'à 600 W, comme le montrent les deux microscopies optiques de la Figure 5.4 (a-b). Or le caractère purement conductif du modèle thermique employé ne permet pas la prise en compte des mouvements fluides. Par conséquent, il est exclu avec ce type d'approche d'obtenir un bain pénétrant comme observé expérimentalement pour la 5ème paramétrie (Figure 5.4 (a)), même en modifiant les paramètres géométriques de la source de chaleur. L'écart entre la profondeur totale du bain expérimental et numérique provient également du fait que la hauteur maximale de matière déposée est fixe dans le modèle numérique. En effet, la hauteur de poudre est déterminée au cours de la définition du maillage et constitue la hauteur maximale de matière déposée quelle que soit la paramétrie employée, contrairement aux essais au cours desquels la hauteur du cordon fabriqué est amenée à varier en fonction des paramètres procédé appliqués.

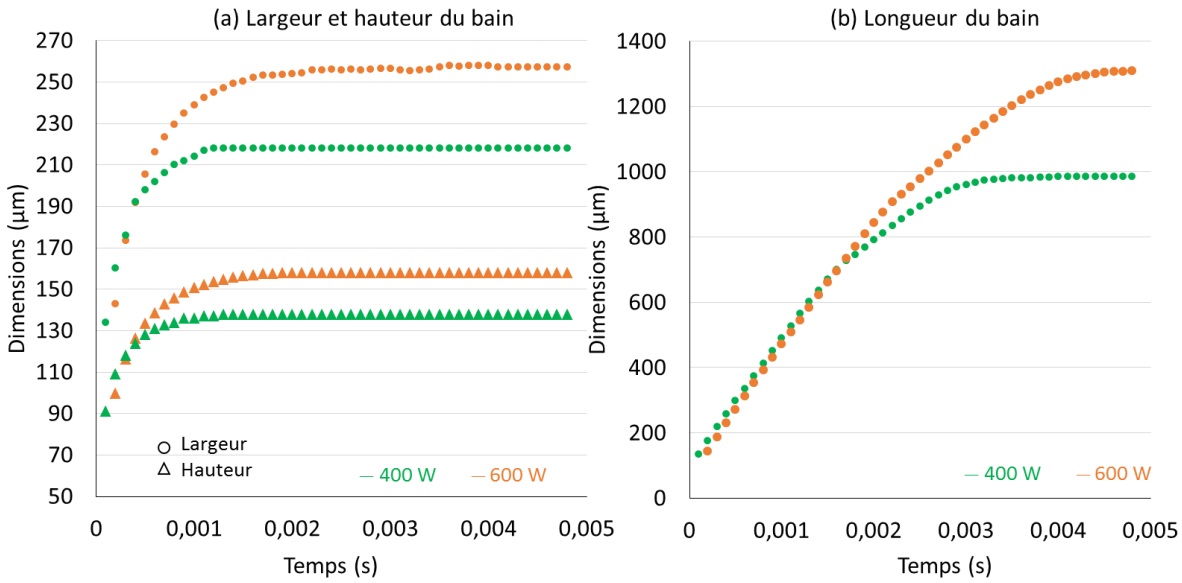


Figure 5.6. Evolution des dimensions du bain liquide au cours de la simulation du procédé

L'évolution des dimensions du bain est présentée sur la Figure 5.6 pour les deux jeux de paramètres. Nous pouvons constater que les dimensions du bain atteignent un régime stationnaire au cours du calcul. Il peut également être constaté que le bain formé à plus faible puissance (*i.e.* 400 W) se stabilise plus rapidement que celui formé à 600 W. Cette constatation s'explique par le fait que le bain étant plus grand et la vitesse constante, il lui faut davantage de temps pour atteindre sa taille définitive. Enfin, en comparant les allures des courbes des graphiques (a) et (b) de la Figure 5.6, il ressort que les largeurs et hauteurs du bain atteignent très rapidement un régime stationnaire (après 1 ms approximativement), tandis que pour atteindre la longueur maximale du bain, il faut 3 ms à 400 W et près de 4,5 ms à 600 W soit plus de 3 fois plus de temps. Cette observation vient du fait que la longueur étant alignée avec la direction de balayage du laser, le taux de refroidissement à la frontière du bain est plus faible dans cette direction que dans les autres, et donc la position du front met davantage de temps pour se stabiliser à l'arrière du bain.

5.1.6. Champs de températures et vitesses de solidification

Les résultats issus de la simulation thermique du procédé de fabrication des monocordons sont présentés dans cette section. Le gradient thermique et le taux de croissance pilotant la solidification, ces deux grandeurs sont également étudiées dans cette section.

Pour rappel, l'échelle de couleur est fixée de façon à ce que le contour du bain soit représenté par la dernière isotherme, correspondant à la valeur du liquidus. Les coupes transverses visibles sur les images (c-d) de la Figure 5.4 montrent un bain très arrondi voire quasiment circulaire, composé d'une partie pénétrant dans le substrat et d'une partie courbe située au-dessus du substrat, correspondant à la hauteur de matière déposée au cours de la fabrication. Une démarcation rompant l'aspect circulaire du bain peut être remarquée au niveau de l'interface entre le substrat et la zone modélisant le lit de poudre, du fait que la largeur de poudre fondue est légèrement moins importante que celle du bain formé dans le substrat. Les champs thermiques vus de dessus présentés sur les images (c-d) de la Figure 5.5 font état d'un bain allongé, sensiblement plus arrondi à l'avant qu'à l'arrière. Cette géométrie est principalement due à la présence d'une source de chaleur mobile au cours des essais. Malgré l'évolution des propriétés matériau de certains éléments due à un changement de groupe matière, l'absence de discontinuité dans le champ de température en avant du cordon témoigne de la bonne conservation de l'énergie calorifique stockée par les éléments avant changement d'état.

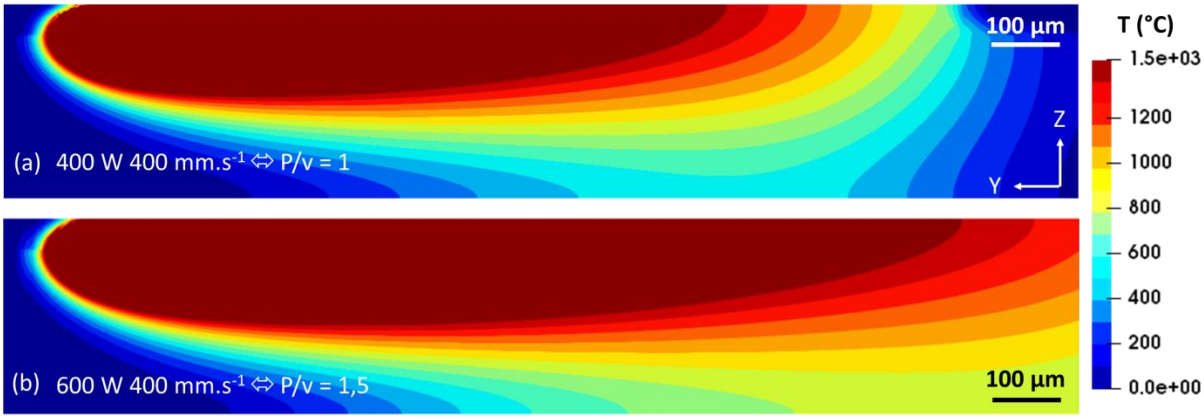


Figure 5.7. Distribution des températures en coupe longitudinale pour les deux paramétries monocordon simulées

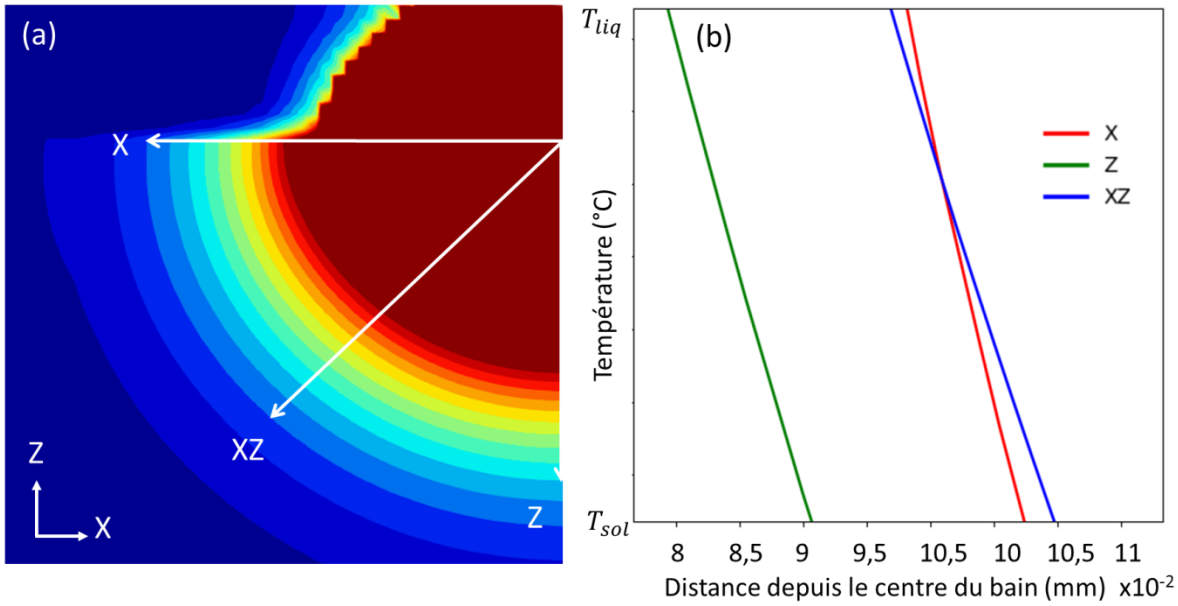


Figure 5.8. Champs thermiques obtenus pour un monocordon simulé à une puissance de 400 W et une vitesse de 400 mm.s^{-1} (4ème paramétrie) : (a) coupe transverse du maillage mettant en évidence le bain fondu, (b) évolution des températures dans l'intervalle de solidification le long des lignes représentées en blanc sur la figure (a)

Les coupes longitudinales des deux paramétries sont représentées sur La Figure 5.7. Le bain est de forme ovale et plus profond à l'avant qu'à l'arrière, où il prend une forme plus fine et pointue.

Les champs thermiques résultants de la simulation du monocordon réalisé avec la 4ème paramétrie sont visibles en coupe transverse sur la Figure 5.8 (a). L'évolution des températures le long de différentes droites représentées en blanc sur la Figure 5.8 (a) ayant pour origine le centre du bain ($x = z$ = 0), est tracée sur la Figure 5.8 (b). La finalité de notre étude étant d'appréhender la formation des structures de grains formées au cours de la fabrication du monocordon, nous nous intéressons plus particulièrement aux variations de températures dans l'intervalle de solidification (entre les températures du liquidus et du solidus). Nous pouvons remarquer que les courbes représentant l'évolution des températures dans l'intervalle de solidification le long des 2 axes situés dans le substrat (courbes vertes et bleues) et le long de l'interface substrat-lit de poudre (courbe rouge) ont la même allure, bien que la pente de cette dernière soit légèrement plus marquée.

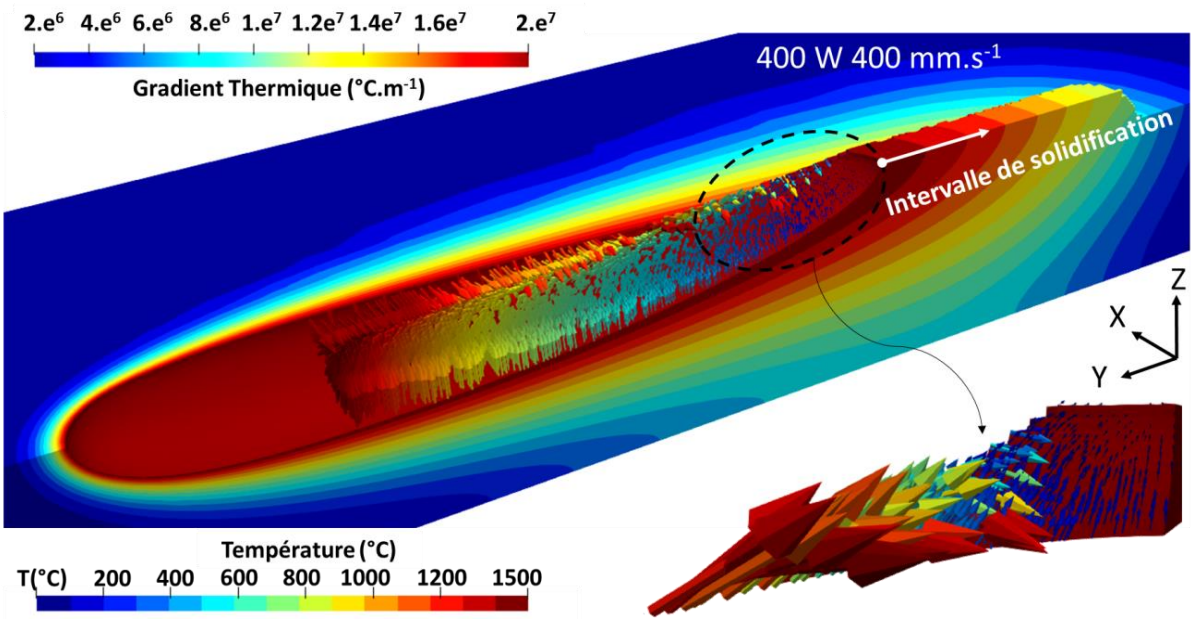


Figure 5.9. Champ de températures dans la partie solide et gradient thermique représenté sous forme de vecteurs le long du front de solidification pour un monocordon simulée à 400 W et 400 mm.s^{-1}

L'évolution de la température par unité de distance correspondant au gradient de température, ce graphique montre que la valeur du gradient est plus élevée au niveau de la surface libre du bain que dans son extrémité inférieure. Cette constatation est renforcée par la Figure 5.9 sur laquelle nous pouvons remarquer que le gradient thermique varie au sein d'un même plan normal à l'axe de balayage (*i.e.* dans une section transverse). En effet, il ressort que les vecteurs représentant le gradient sont de couleurs plus chaudes au niveau du point triple (interface entre le substrat, le bain et l'air) qu'à l'extrémité inférieure du bain, indiquant ainsi des variations de normes au sein d'un même plan transverse. Nous pouvons également remarquer sur la Figure 5.9 que la direction du gradient thermique varie le long du front de solidification différemment de ce qui a été observé dans les lignes de fusion. En effet, si l'on suit la ligne de front à l'arrière du bain située sur la surface du substrat (dans le plan de l'interface substrat/lit de poudre), on peut voir que le gradient est orienté dans la direction X (perpendiculaire au contour du bain) en début de solidification, mais qu'il s'incline ensuite de plus en plus dans la direction Z, comme le montre l'agrandissement de la zone encerclée en noir sur la Figure 5.9. Les grains se solidifiant préférentiellement selon la direction du gradient thermique, nous pouvons nous attendre à ce que les grains suivent la direction perpendiculaire au

contour du bain en début de solidification, mais qu'au cours de la solidification ils se désaxent pour s'aligner davantage avec l'axe vertical.

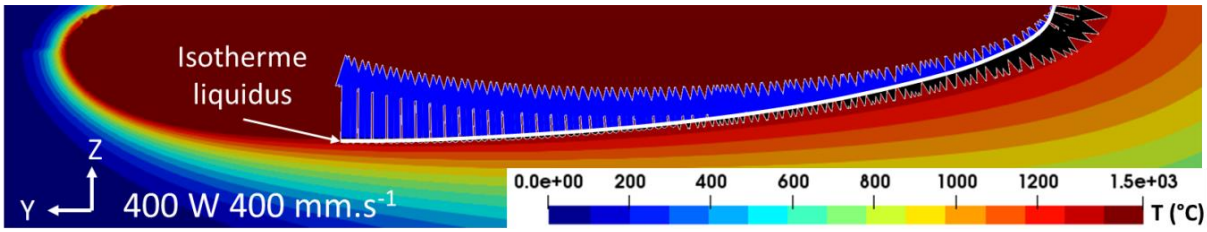


Figure 5.10. Gradient de température (vecteurs bleus) et taux de solidification (vecteurs noirs) tracés le long de l'isotherme de liquidus dans une coupe longitudinale

Les valeurs du gradient et du taux de croissance gouvernant la formation des structures de grains, ces deux grandeurs sont également étudiées le long du front de solidification. Elles sont représentées sous forme de vecteurs le long de l'isotherme de liquidus en coupe longitudinale sur la Figure 5.10. Nous pouvons constater que G est maximal en début de solidification. Son unique composante est alors verticale, et minimal en fin de solidification (*i.e.* à l'arrière du bain). A l'inverse, le taux de croissance lui est très faible en début et milieu de solidification mais maximal à la fin, où il atteint alors la vitesse de balayage du laser (400 mm.s^{-1} dans notre cas). Nous pouvons par ailleurs remarquer que l'augmentation du taux de croissance survient tardivement, comme dans le cas des lignes de fusion.

Afin d'étudier l'influence de la puissance sur les structures de solidification formées, les valeurs de températures, gradients, et taux de croissance obtenues pour chacune des paramétries sont comparées dans la suite.

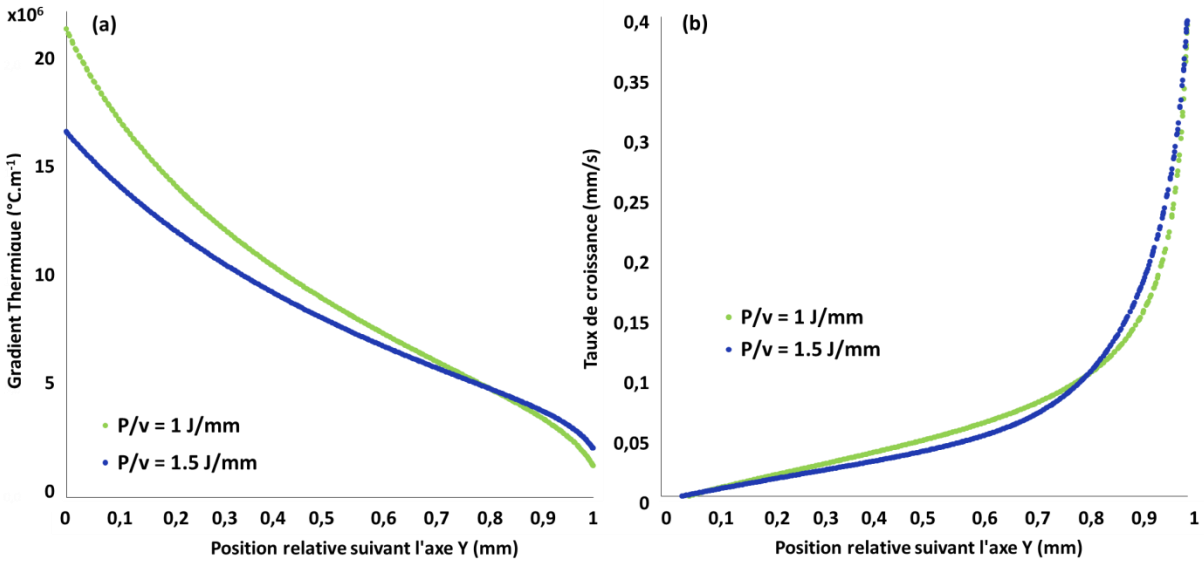


Figure 5.11. Comparaison de l'évolution le long de l'isotherme de liquidus depuis la zone de début de solidification jusqu'à la pointe arrière du bain, pour les deux paramétries testées, en coupe longitudinale : (a) du gradient thermique et (b) du taux de croissance

Les variations de G et V le long de l'isotherme de liquidus depuis la zone de début de solidification jusqu'à la pointe arrière du bain ont été comparées en coupe longitudinale. Les valeurs de G et V en fonction de la position normalisée le long du front de solidification dans une coupe longitudinale sont présentées sur la Figure 5.11. La valeur 0 des abscisses correspond au début de la zone de solidification (extrémité pointée par la flèche blanche sur la Figure 5.10) et la valeur 1 à l'extrémité

arrière du bain. Il ressort du graphique (a) que le gradient thermique du monocordon formé avec une énergie linéique de 1 J.mm^{-1} est supérieur à celui réalisé à 1.5 J.mm^{-1} en début de solidification, mais légèrement inférieur en fin de solidification. L'évolution du taux de croissance (Figure 5.11 (b)) quant à elle est quasiment identique pour les deux paramétries : le taux augmente en s'approchant de la zone de fin de solidification. Par ailleurs dans les deux cas, nous pouvons remarquer que cette augmentation survient principalement à l'extrémité du bain puisque dans les 80 premiers pourcents de la longueur totale de l'interface, le taux de croissance ne dépasse jamais 0,1 mm.s^{-1} soit à peine 25 % de la valeur maximale atteinte à l'arrière du bain. Le taux augmente donc de 75 % dans les 20 derniers pourcents de la longueur totale. Le fait de constater des évolutions de G et V similaires pour les deux paramétries peut s'expliquer par les géométries de bain similaires obtenues dans les deux cas (Figure 5.7).

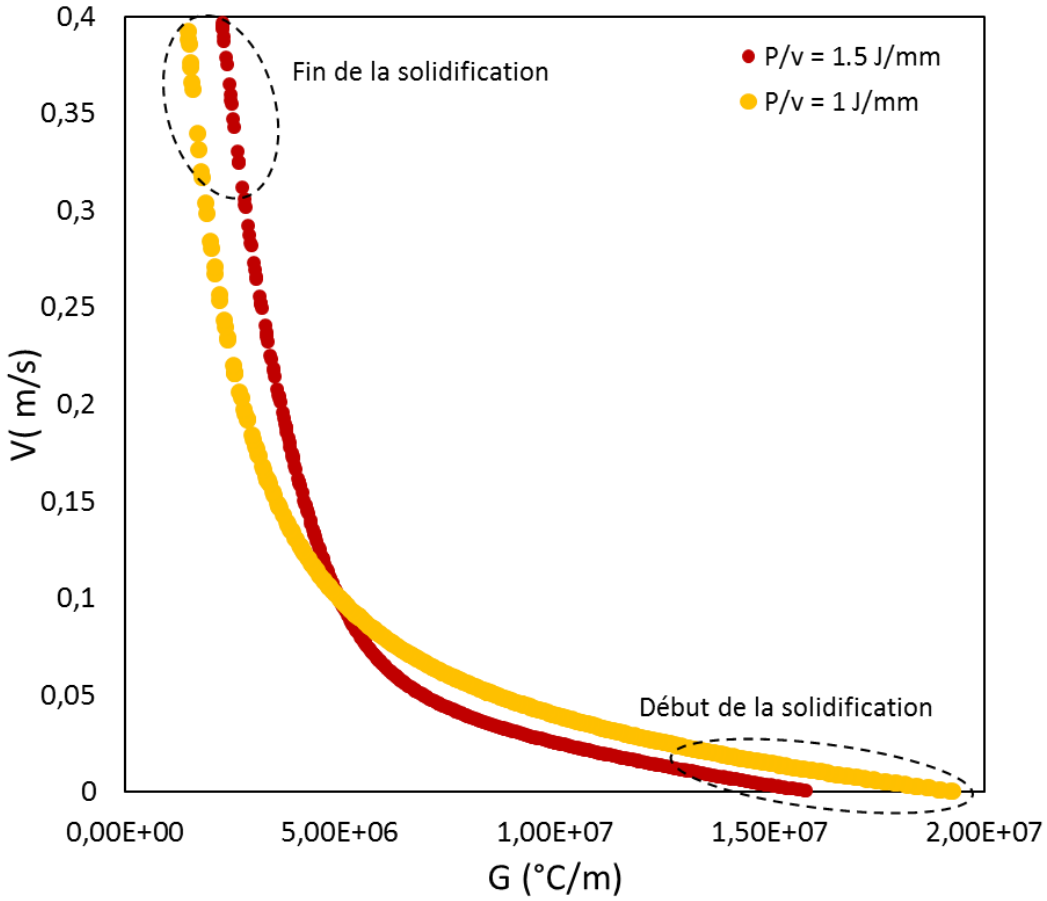


Figure 5.12. Diagramme $G - V$ décrivant les conditions de solidification de deux paramétries monocordons testées

L'évolution des valeurs de gradient et de taux de croissance obtenues pour les deux paramétries monocordons testées sont positionnées dans le diagramme G et V de la Figure 5.12. Nous pouvons constater qu'il existe une forte variation des conditions de solidification en fonction de la zone considérée. En début de solidification, le gradient est maximal alors que le taux de croissance est quasiment nul puis à mesure que l'on s'approche de l'arrière du bain nous pouvons constater que le gradient thermique diminue progressivement. Le taux de croissance quant à lui ne commence à augmenter de façon significative qu'en atteignant la zone de fin de solidification. L'évolution des conditions de solidification entre le début et l'arrière du bain ne se fait donc pas de façon progressive comme le montrent les allures des deux courbes. De plus, nous pouvons remarquer que la transition entre début et fin de solidification est d'autant plus brutale que l'énergie linéique, et donc dans notre

cas la puissance, est élevée. En terme de structures attendues et en considérant les valeurs de G et V obtenues au niveau des extrémités, nous pouvons dire que l'arrière du bain est la zone la plus propice à la formation d'une structure équiaxe, dans le cas où des valeurs suffisamment importantes de V seraient atteintes. Enfin, concernant les microstructures formées, nous pouvons constater que les points situés le plus à droite du diagramme lorsque le taux de croissance est maximal (en fin de solidification) sont associés à l'énergie linéique la plus élevée. Par conséquent, nous pouvons nous attendre à ce que les sous-structures de grains formées dans le monocordon à 600 W soient légèrement plus fines que celles formées dans celui à 400 W au centre du cordon. En revanche, elles devraient être plus grossières en périphérie du cordon.

5.1.7. Discussion

Les résultats thermiques discutés dans la section précédente ont montré la capacité du modèle conductif à reproduire la géométrie du cordon observée expérimentalement, caractérisée par une partie relativement semi-circulaire pénétrant dans le substrat et une seconde partie bombée correspondant à la couche de matière déposée sur le substrat. Le modèle a également montré sa capacité à retrouver les dimensions approximatives du bain formé après ajustement du rendement de la source de chaleur. Néanmoins, la profondeur simulée pour le bain de la 5ème paramétrie n'est pas aussi pénétrante que celle formée expérimentalement, et la hauteur de matière déposée est limitée par la hauteur du lit de poudre, fixée au cours de la définition du domaine.

Il a été constaté que pour retrouver les dimensions réelles du bain en surface, il est nécessaire de diminuer le rendement lorsque la puissance augmente. Il semblerait alors que dans le cas d'un cordon réalisé avec apport de matière, la fraction d'énergie transmise au bain par le laser diminue lorsque l'énergie linéique augmente, contrairement à ce qui a été constaté pour la configuration ligne de fusion. L'observation des vidéos de bain à 400 W et 600 W nous a permis de proposer une explication à cela. Tout d'abord, nous avons constaté que la surface libre du bain dans la zone d'interaction entre le laser et le bain est beaucoup plus instable pour une puissance élevée, comme le montrent les zones encerclées en jaune sur les images (a) et (b) de la Figure 5.5. Un bain instable favorise la réflexion du faisceau laser et augmente les chances d'éjections de métal liquide. Dans ce cas, le rendement énergétique est réduit, la chaleur emmagasinée par le bain est alors moins importante et son volume ou sa température baissent. Par ailleurs, un plus grand nombre de projections de particules de poudre est constaté à plus forte puissance. Les particules de poudre au voisinage direct du bain sont donc moins nombreuses et/ou plus éloignées, limitant ainsi la possibilité pour le bain de récupérer une partie de l'énergie du faisceau laser par réflexion sur ces particules, et réduisant donc l'énergie transmise au bain. Une explication moins physique peut également être proposée pour expliquer la diminution du rendement. En effet, le fait qu'une partie de la couche de matière déposée n'ait pas été modélisée lorsque celle-ci est supérieure à l'épaisseur du lit de poudre entraine la diminution du volume total du bain et donc de l'énergie stockée.

L'étude du gradient thermique et du taux de croissance a montré que la valeur maximale de G était atteinte en début de solidification (autours de 2.10^7 °C.m^{-1}) à l'inverse de V qui lui atteint son maximum à l'arrière du bain (0,4 m.s^{-1}). Ces observations sont semblables à celles faites pour la configuration ligne de fusion (4.1.7). Cependant, nous avons constaté que le taux de solidification augmentait beaucoup plus tardivement le long de l'isotherme que ce qui avait été observé pour les lignes de fusion. Cette constatation met en avant le fait que dans la configuration avec apport de poudre, la solidification est très lente en bord de bain, et ne s'accélère qu'en approchant de l'extrémité arrière du bain. Au niveau de l'extrémité arrière du bain, il a été constaté que le gradient n'est plus tout à fait orienté perpendiculairement au contour du bain comme initialement observé,

mais plutôt incliné selon la direction verticale. Par conséquent, les grains formés en fin de solidification ne devraient donc pas croître perpendiculairement au bain mais plutôt vers le haut et la zone centrale de la surface libre du bain. Cette analyse semble en accord avec les microscopies optiques des monocordons en coupe transverse, sur lesquelles les grains observés ne sont pas perpendiculaires au contour du bain. La microscopie présentée sur la Figure 5.13 permet d'illustrer cela : le grain encerclé en noir est orienté à 70° par rapport au bord du bain et celui repéré en blanc suit initialement une direction normale à l'interface liquide-solide puis est progressivement dévié vers le centre du bain au cours de la solidification. En plus de modifier le profil de la surface libre du bain, l'apport de matière semble donc favoriser l'alignement des grains avec la direction verticale, principalement à travers la modification de l'orientation du gradient thermique.

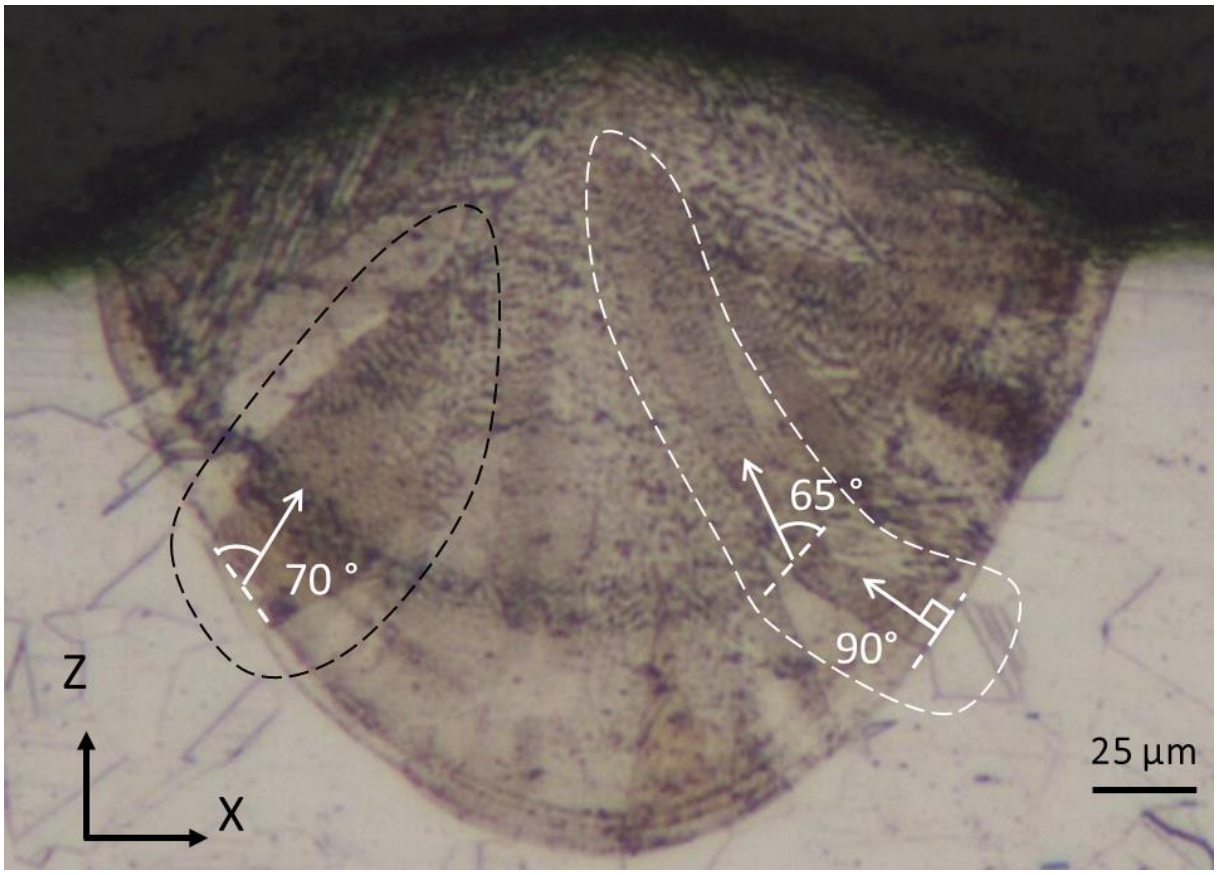


Figure 5.13. Microscopie optique d'un des monocordons de la 5ème paramétrie observé en coupe transverse

L'analyse des gradients au niveau de l'isotherme de liquidus a également mis en avant des variations au sein même des plans transverses, puisqu'il a été observé qu'il atteint son maximum en périphérie (au niveau du point triple). Ce constat peut s'expliquer par des transferts de chaleur non uniformes entre le centre du bain et sa périphérie en fonction des directions considérées. En effet, le modèle étant purement conductif, les transferts de chaleur s'effectuent uniquement par conduction dans le milieu environnant et dépendent donc directement de la capacité calorifique du milieu considéré. Celle de l'air étant très largement inférieure à celle de l'acier 316L, la chaleur diffuse alors facilement dans le substrat mais est difficilement évacuée à travers l'air, générant ainsi une valeur de gradient plus élevée dans la partie haute du bain. Cette constatation permet également d'expliquer les différences constatées entre les dimensions du bain des lignes de fusion et des monocordons réalisés à même paramétrie. Pour une même combinaison de paramètres procédé, le bain formé avec apport de matière est plus grand que celui obtenu directement par tir laser sur le substrat. Or la surface libre du bain formé dans le cas d'un monocordon n'est plus uniquement située au niveau de la

surface supérieure du substrat : elle est également située au-dessus de celui-ci. Les transferts de chaleur s'effectuant essentiellement par diffusion à travers le substrat (l'air étant très mauvais conducteur), la chaleur stockée dans la partie haute du bain est plus difficilement évacuée. La quantité de chaleur emmagasinée par le bain augmente alors, conduisant à la formation d'un bain plus grand, et notamment plus long et profond. Ces résultats confirment les résultats obtenus expérimentalement (3.5.1).

Enfin, nous pouvons également noter qu'avec le modèle de source de chaleur retenu, nous avons pu obtenir après calibration du rendement du laser des bains simulés présentant des dimensions proches des caractéristiques expérimentales du bain. Par conséquent, bien que les mouvements fluides ne soient pas modélisés, il semblerait que le choix d'un modèle conductif et d'un milieu continu pour modéliser le lit poudre suffisent à décrire la thermique du procédé de fusion laser sur lit de poudre dans une première approche. Néanmoins, la différence de pénétration du bain constatée entre simulation et expérience pour la paramétrie associée à la puissance la plus élevée, qui produit sans doute des vitesses d'écoulements de fluides plus importantes, reste un élément à considérer dans la suite des travaux et notamment lors de l'analyse des simulations des structures de grains, puisque de la géométrie du bain dépendent directement les structures de grains formées.

5.2. Simulation des structures de grains

5.2.1. Initialisation du domaine automate cellulaire

La solidification ne présentant pas de symétrie particulière, la largeur complète du cordon est modélisée. Afin de transmettre les températures issues de la simulation du procédé à l'ensemble du domaine automate cellulaire (AC), le champ thermique obtenu doit donc être symétrisé. Comme les phénomènes de fusion-solidification ne concernent que la zone de formation du cordon, le domaine AC est centré sur le maillage éléments finis (EF). L'historique thermique de la pièce jouant un rôle important en solidification, le domaine a été positionné de façon à inclure la zone initiale de formation du bain. La boîte AC mesure 0,3 mm de largeur, 0,18 mm de hauteur et 2 mm de longueur. Cette longueur permet de réduire le nombre de cellules prises en compte et donc de limiter la durée de calcul tout en permettant d'atteindre le régime stationnaire du cordon. La taille des cellules ayant été fixée à 2 µm, le domaine AC est finalement composé d'un million cinq-cents mille cellules. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 5.14, la hauteur de la pièce est décomposée en deux parties distinctes : le substrat de 130 µm d'épaisseur et le lit de poudre de 50 µm de hauteur.

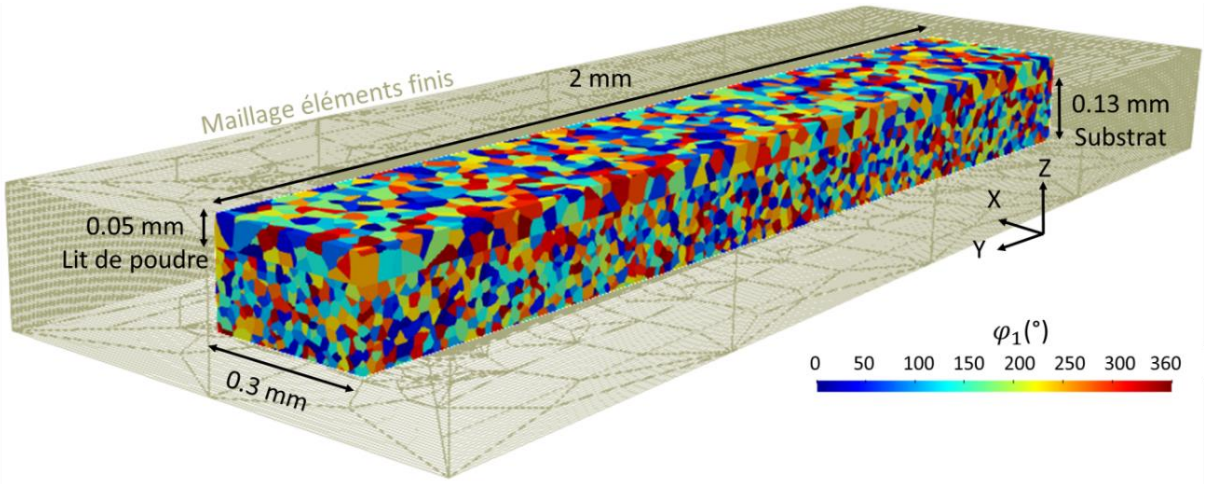


Figure 5.14. Structure granulaire initiale générée pour la configuration monocordon, décomposée en deux milieux distincts : le lit de poudre et le substrat.

Nous avons vu dans les chapitres bibliographique (Chapitre 1) et expérimental (Chapitre 3) que les grains formés dans le cordon dépendent directement de ceux initialement présents aux abords de la zone fondue (grains composant le substrat ou particules de poudre). Il est donc important de modéliser la structure granulaire initiale du substrat et des particules de poudre. Le substrat modélisé étant identique à celui utilisé dans la configuration ligne de fusion, le diamètre équivalent retenu pour les cellules de Voronoï est de 25 µm (4.2.1). Le diamètre choisi pour les cellules de Voronoï reproduisant le lit de poudre est de 30 µm et correspond à la valeur médiane des particules de poudre utilisées au cours des essais (3.2). La structure granulaire initialement formée est présentée sur la Figure 5.14, sur laquelle les grains sont distingués par leur valeur du premier angle d'Euler φ_1 (2.3.1.1).

5.2.2. Loi de croissance dendritique

Pour rappel, la modélisation de la solidification dans notre modèle repose principalement sur l'utilisation d'une loi de croissance qui permet de calculer la vitesse de solidification en pointe de dendrite des cellules situées dans le domaine pâteux. La loi de croissance choisie dans cette étude est liée à la surfusion (ΔT) par la relation suivante :

$$v_d(\Delta T) = 10^{-8}(\Delta T)^{4,8} \tag{67}$$

L'identification de cette loi est détaillée dans la section 4.2.2.

5.2.3. Évolution d'un grain au cours de la solidification

Afin de mieux appréhender les résultats obtenus sur les structures granulaires simulées, nous nous intéressons dans un premier temps à l'évolution d'un grain au cours de la solidification. Pour cela, un grain formé dans le cordon est extrait du domaine AC puis observé dans les trois directions principales.

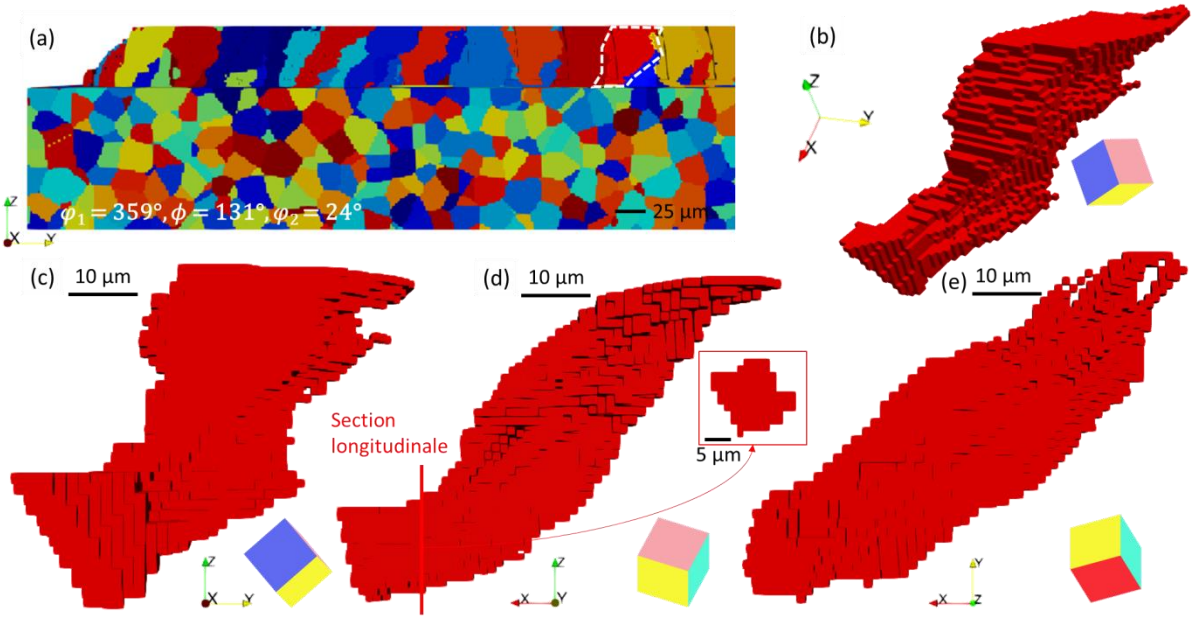


Figure 5.15. (a) Structure de grains du monocordon réalisé à 400 W et 400 mm.s^{-1} observée en coupe longitudinale. Grain solidifié extrait du cordon formé observé (b) en perspective, dans le plan (c) longitudinal, (d) transverse et (e) horizontal

Les résultats sont visibles sur la Figure 5.15. La vue de perspective (b), la coupe transverse (d) ainsi que la vue de dessus (e) montrent qu'en début de solidification, le grain croit préférentiellement selon l'axe X, et que le grain s'élargit progressivement en croissant. Les coupes longitudinale (c) et transverse (d) révèlent ensuite que le grain s'oriente progressivement vers la direction verticale (*i.e.* selon l'axe Z) et donc vers la direction du flux maximal de chaleur au fur et à mesure de sa croissance. Enfin, nous pouvons constater qu'en toute fin de solidification, le grain s'oriente selon l'axe Y, comme en témoignent les vues de perspective et de dessus représentées sur la Figure 5.15 (b et e). L'observation de ce grain solidifié dans les différents plans de l'espace met en avant le fait que la représentation du grain dans une tranche 2D variera fortement selon la direction considérée. L'aspect colonnaire du grain peut même ne pas être constaté si la coupe est faite dans une section perpendiculaire à la direction principale du grain. C'est le cas de la section longitudinale du grain représentée sur la Figure 5.15 (d), sur laquelle il serait même possible d'imaginer que le grain formé est à géométrie équiaxe. Cette information met en avant la nécessité d'observer les grains suivant plusieurs sections afin d'avoir des informations pertinentes sur les caractéristiques des grains. L'orientation cristallographique du grain est également donnée sur la Figure 5.15, et représentée sous forme de maille élémentaire dans chaque point de vue. Les directions préférentielles de croissance des aciers austénitiques étant les directions <001>, elles correspondent aux normales des faces du cube. Par conséquent, la croissance du grain représenté est favorisée lorsque le gradient thermique est orienté à ± 40° autour de l'axe X (Figure 5.15 (c)). La Figure 5.16 montre le même type de représentation pour un grain formé dans le monocordon simulé avec une puissance de 600 W. Les mêmes constatations peuvent être faites que pour le monocordon 400 W, avec l'aspect colonnaire encore plus marqué.

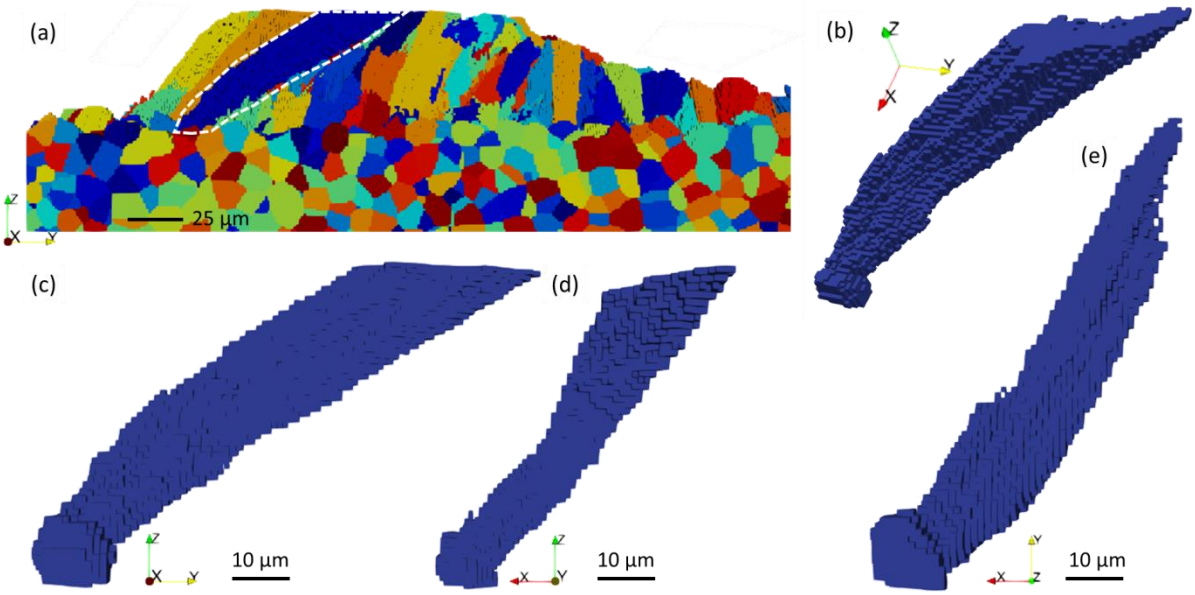


Figure 5.16. (a) Structure de grains du monocordon réalisé à 600 W et 400 mm.s^{-1} observée en coupe longitudinale. Grain solidifié extrait du cordon formé observé (b) en perspective, dans le plan (c) longitudinal, (d) transverse et (e) horizontal

5.2.4. Structures granulaires simulées

La structure de grains simulée avec la 4ème paramétrie est présentée dans la section 5.2.4.1, et les caractéristiques principales de ces structures sont comparées à celles mesurées expérimentalement. Les premiers résultats de simulation obtenus pour le monocordon de la 5ème paramétrie sont introduits dans la section 5.2.4.2.

5.2.4.1. Monocordon 400 W

Les grains formés par simulation numérique CAFE dans le cordon réalisé avec la 4ème paramétrie (puissance de 400 W et vitesse de 400 mm.s^{-1}) sont présentés en vue globale et dans les trois principaux plans de coupe sur la Figure 5.17. Nous pouvons constater que la géométrie caractéristique du monocordon est bien retrouvée puisque nous observons une partie semi-circulaire pénétrant dans le substrat et une couche de matière bombée déposée sur le substrat.

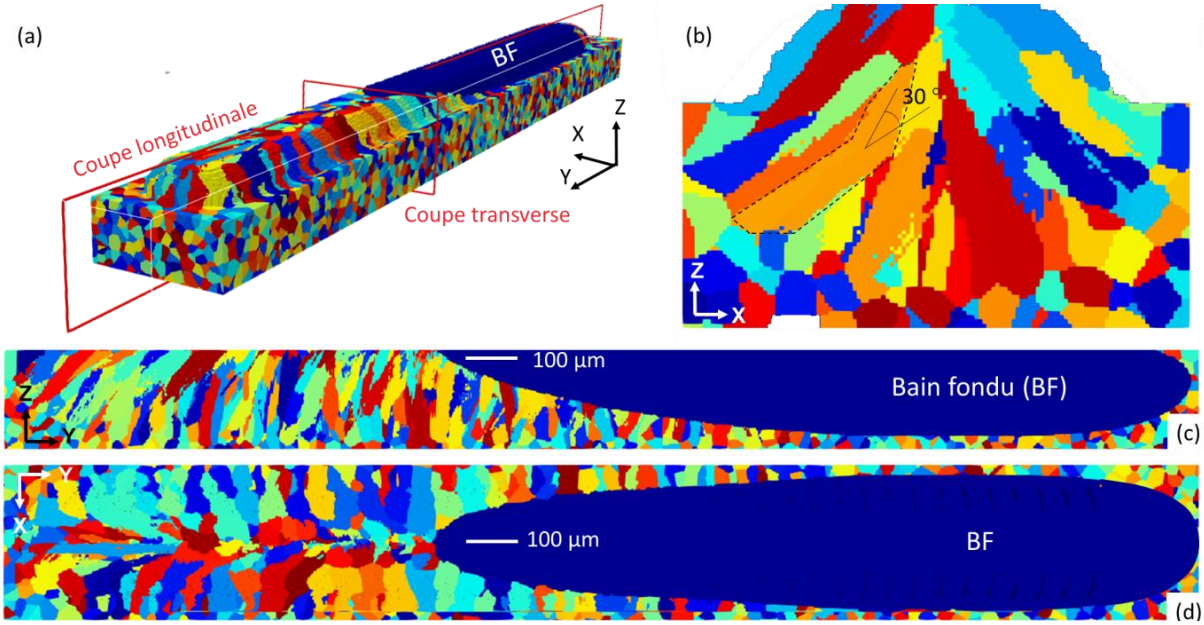


Figure 5.17. Structure de grains du monocordon réalisé avec une puissance de 400 W et une vitesse de 400 mm.s^{-1}, obtenue par simulation numérique CAFE. (a) Vue globale du cordon formé, (b) coupe transverse, (c) coupe longitudinale et (d) vue de dessus.

La structure granulaire observée sur les différentes images de la Figure 5.17 est composée de grains colonnaires, formés par épitaxie à partir des grains composant le substrat. Sur la coupe longitudinale visible sur la figure (c), nous pouvons constater que ces grains colonnaires sont légèrement penchés vers la direction de balayage du laser en début de solidification (à gauche de l'image) mais qu'ils se redressent ensuite dans la zone stationnaire du bain, prenant alors une position quasiment verticale. Sur la figure (d) représentant la vue de dessus, il ressort que les grains s'orientent de la périphérie vers le centre du bain, et qu'une zone centrale s'est formée composée des extrémités des grains colonnaires ayant cru depuis la partie inférieure du bain. L'observation de la coupe transverse présentée sur la figure (b) nous renseigne sur l'évolution des directions de croissance prises par les grains au cours de la solidification. Nous pouvons notamment remarquer qu'au début de leur croissance, les grains suivent une trajectoire normale au contour du bain liquide, mais que cette trajectoire est ensuite déviée lorsque les grains s'approchent de la zone supérieure du cordon. Le grain orange mis en relief par le contour pointillé noir sur la Figure 5.17 (b) est un exemple caractéristique de cette désorientation au cours de la solidification. En effet nous pouvons remarquer que sa direction principale de croissance initialement normale au contour du bain se désaxe ensuite d'un angle de près de 30° dans la coupe transverse en s'approchant de la zone supérieure du cordon. Ces observations sont en accord avec les résultats observés expérimentalement (Figure 5.13) et correspondent aux résultats attendus suite à l'analyse du gradient thermique. En effet nous avions remarqué dans la section 5.1.7 que le gradient thermique orienté selon la normale à l'isotherme de liquidus dans la partie basse du bain, s'alignait davantage avec l'axe vertical en fin de solidification (dans la partie haute du cordon). La simulation CAFE semble

donc être en mesure de prendre en compte les variations d'orientation du gradient au cours du procédé.

Dans la suite de cette section, les grains simulés sont comparés à ceux observés expérimentalement. Nous avons fait le choix de faire le même type de comparaison que pour la structure granulaire des lignes de fusion, en analysant les grains en coupe transverse. Seuls les grains formés dans la zone fondue (ZF) sont étudiés dans la suite. La sélection des grains appartenant à la zone fondue simulée se fait *via* un script python défini dans le cadre de cette thèse, permettant de tracer la zone fondue sur la cartographie et de ne retenir que les grains dont le centre de gravité est situé à l'intérieur de la zone.

Tableau 5.5. Caractéristiques des grains observés en coupe transverse des monocordons simulé et réel de la 4ème paramétrie. RF correspond au rapport de forme moyen des grains et NG au nombre de grains comptabilisés pour les calculs. L'erreur relative est calculée en prenant les valeurs expérimentales comme données de référence

Données	Section moyenne (µm²)	Diamètre équivalent (µm)	RF	NG
Expérimentales	376	21,9	3,06	56
Numériques	564	26,8	3,11	1299
Erreur relative	50 %	22 %	2 %	-

Le Tableau 5.5 regroupant les caractéristiques des grains des ZF obtenues expérimentalement et numériquement en coupe transverse permet la comparaison quantitative des grains. Les caractéristiques étudiées sont :

- La section moyenne des grains, équivalant à la surface des grains moyennée dans le plan transverse ;
- Le diamètre équivalent, correspondant à la valeur obtenue pour un cercle de même surface que la section moyenne calculée ;
- Le rapport de forme (RF), égal au rapport de la longueur de l'axe principal du grain sur celle de son axe secondaire dans le plan transverse.

Les valeurs expérimentales ont été calculées grâce aux résultats extraits de la cartographie EBSD effectuée sur le monocordon de la 4ème paramétrie (3.6.1.2). Les valeurs numériques ont été calculées en moyennant les données des grains situés dans les zones fondues de 20 coupes transverses réparties tout au long de la zone stationnaire du cordon. Pour repérer la zone stationnaire nous avons comparé la répartition des tailles de grains dans les différentes coupes. Une fois cette répartition sensiblement proche d'une coupe à l'autre nous avons considéré avoir atteint la zone stationnaire du cordon. Les grains dont la surface est inférieure à 50 µm² n'ont pas été comptabilisés pour les calculs des valeurs moyennes simulées et expérimentales. Le nombre total de grains utilisés est également indiqué dans la dernière colonne du Tableau 5.5. Dans un premier temps, il ressort de ce tableau que la section moyenne des grains simulés est supérieure à celle des grains réels de 50 %. L'histogramme (a) de la Figure 5.18 représente la distribution de la section des grains formant les ZF réelles et simulées. Nous pouvons constater que l'écart de moyenne obtenu entre grains numériques et expérimentaux est principalement dû à la différence de pourcentage de petits grains (grains dont la section est inférieure à 250 µm²). En effet, ces grains représentent quasiment 60 % de la structure granulaire réelle contre à peine 30 % de la zone solidifiée simulée. Il ressort également de cet histogramme que le nombre de grands grains (grains dont la surface est

supérieure à 1000 µm²) est plus de deux fois plus élevé dans la simulation que dans la ZF expérimentale (16 % contre 7 %). L'histogramme (b) de la Figure 5.18 représente la répartition du rapport de forme (RF) des grains dans la zone fondue. Nous pouvons remarquer que le nombre de grains à géométrie proche de l'équiaxe (RF < 2) est une fois et demie plus élevé dans la réalité que dans la simulation. Cependant, bien que les distributions réelles et numériques soient inégales, 80 % des grains ont une valeur de RF inférieure à 4 dans les deux cas. De plus, le RF moyen obtenu pour les deux séries est identique.

Ces différences de tailles de grains simulés et réels, déjà observées pour les lignes de fusion, peuvent en partie s'expliquer par le fait que le volume de zones fondues simulées est un peu plus important que le volume du bain réel. En particulier, la profondeur du cordon mesurée sur la cartographie EBSD utilisée pour extraire les caractéristiques des grains n'est que de 100 µm, soit 39 µm en dessous de la hauteur totale moyenne calculée (3.5.1). Nous avons pu constater précédemment que les grains formés dans la ZF progressent dans toute la hauteur du cordon fabriquée. Une profondeur de cordon réduite limite donc la distance de progression des grains au cours de la solidification, ce qui entraine alors la formation de grains plus petits. Une autre explication possible aux écarts constatés entre résultats numériques et simulés provient du nombre de grains utilisés pour calculer les valeurs caractéristiques des grains. 56 grains ont servi pour déterminer les valeurs réelles contre 1299 pour les numériques, soit 20 fois moins. La caractérisation EBSD de plus d'une coupe transverse permettrait d'exclure ou de confirmer cette source d'erreur potentielle.

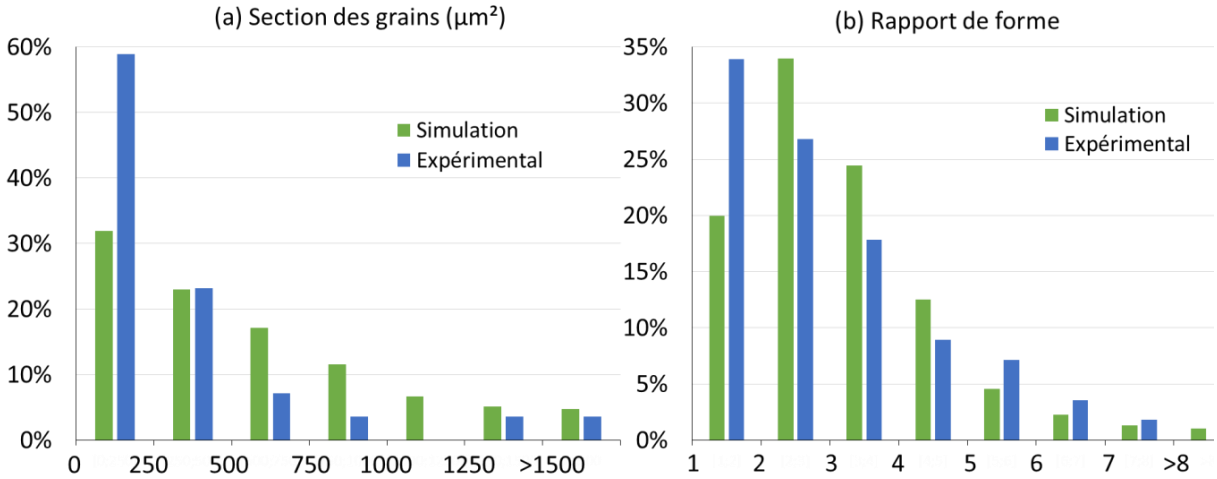


Figure 5.18. Distribution (a) de la section (µm²) et (b) du rapport de forme, des grains formés expérimentalement ou par simulation dans la zone fondue du monocordon réalisé avec la 4ème paramétrie

Une comparaison qualitative des grains a également été effectuée. Pour cela, les orientations cristallographiques des grains présents dans les ZF réelle et simulée sont étudiées. Les cartographies EBSD colorées selon les couleurs standards IPF représentant l'axe Z dans le repère du cristal sont présentées sur la Figure 5.19, ainsi que les figures de pôles associées. En s'intéressant dans un premier temps à l'orientation des grains situés dans le substrat, nous pouvons remarquer que les grains composant le substrat réel présentent une légère texture <101> selon l'axe Z, caractérisée par la couleur verte prédominant sur la Figure 5.19 (a). A l'inverse, la structure cristalline simulée dans le substrat est composée de grains de toutes les couleurs, ce qui indique l'absence de texture cristallographique dans la structure granulaire. Si nous nous penchons maintenant sur les grains formant la ZF numérique (Figure 5.19 (b)), nous retrouvons une large palette de couleurs caractéristiques d'une structure cristallographique non texturée. Néanmoins, nous pouvons remarquer que les grains dont les directions <001> sont alignées avec l'axe Z (les grains représentés

en rouge-orange) sont ceux dont la croissance est la plus étendue. Le grain rouge situé dans la zone centrale du monocordon est un bon exemple : il provient d'un grain situé dans le substrat, situé plus en retrait que ses deux voisins directs, et ayant à peine fondu, et pourtant c'est le grain dont la croissance dans la hauteur de la pièce a été la plus marquée. La ZF expérimentale montre une structure cristallographique plus hétérogène que celle constatée dans le substrat, avec cependant des grains dont les directions <001> et <101> sont assez proches de l'axe Z. Les figures de pôles associées aux cartographies expérimentales et numériques représentent la projection des directions <001> dans le plan normal à l'axe Z. Bien que des zones de plus fortes densités soient visibles dans les deux coupes, les densités restent faibles et diffuses et nous ne pouvons pas conclure à la présence d'une texture dans les cordons formés. Cette constatation est en accord avec les travaux sur géométries monocouches de Mutke *et al.* ayant montré l'absence de texture dans les cordons réalisés [Mutke 2018]. De plus, cette observation concorde avec les résultats expérimentaux présentés dans le chapitre 3 (section 3.6.1), mettant en avant la nécessité de construire plusieurs couches afin de constater l'apparition d'une texture dans les pièces fabriquées.

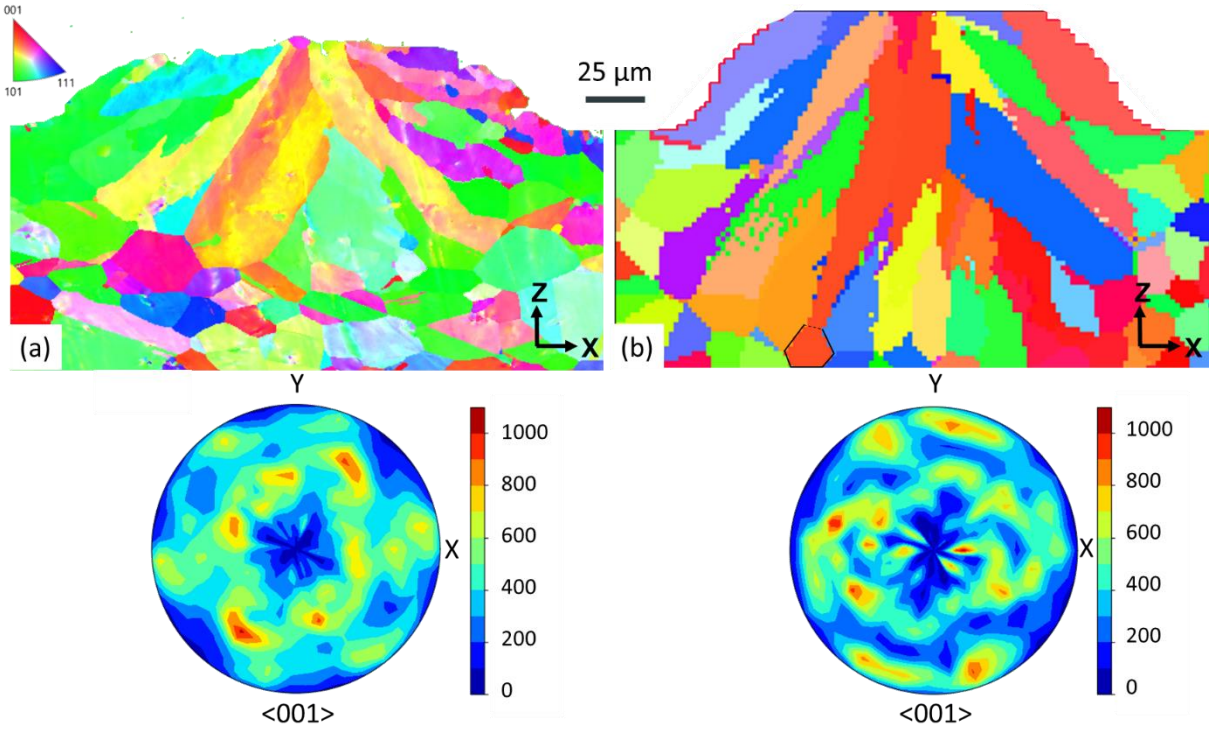


Figure 5.19. Cartographies EBSD des coupes transverses des monocordons réalisés avec la 4ème paramétrie (a) expérimentalement et (b) par simulation CAFE. Les couleurs des cartographies correspondent aux valeurs standards IPF représentant l'axe Z dans le repère global du cristal. Les figures de pôles associées projettent les directions <001> du cristal dans le plan normal à l'axe Z.

5.2.4.2. Monocordon 600 W

La structure granulaire finale du monocordon correspondant à la cinquième paramétrie obtenue à l'issue des simulations CAFE est présentée sur la Figure 5.20. Nous pouvons constater que le cordon construit est particulièrement court. Contrairement aux lignes de fusion et dans un souci de limitation des temps de calcul, seule la phase de tir laser a été modélisée, excluant alors la phase de refroidissement. Dans le cas du monocordon réalisé à 600 W, la puissance transmise au bain par le laser est supérieure à celle fournie par le tir laser à 400 W, entrainant la formation d'un bain beaucoup plus long ainsi que le ralentissement du refroidissement de la pièce.

La zone solidifiée étant localisée uniquement en début de cordon, la zone stationnaire n'a pas pu être atteinte au cours du calcul. Les statistiques concernant les caractéristiques des grains (*i.e.*

section moyenne, rapport de forme) dans la zone stationnaire ne peuvent donc malheureusement pas être exploitées, ni comparées aux résultats expérimentaux. Malgré cela, nous pouvons tout de même effectuer quelques constats et remarquer certaines tendances en s'intéressant à la Figure 5.20. Tout d'abord, comme dans les simulations précédentes, les grains formés sont colonnaires, et croissent par épitaxie à partir des grains situés dans le substrat en direction du centre du bain. En coupe longitudinale nous pouvons noter que les grains sont très fortement penchés selon la direction de balayage du laser en tout début de cordon, puis que cette désorientation semble progressivement s'atténuer. Sur la Figure 5.20 (b) nous pouvons remarquer que la couche de matière déposée n'est pas complétement bombée comme nous avons pu l'observer expérimentalement, mais aplatie dans la zone supérieure. Cette constatation provient du fait que la hauteur maximale de matière déposée dans la simulation est directement liée à la hauteur du lit de poudre fixée en début de calcul, et est donc sous-estimée dans notre calcul puisque limitée à 50 µm. Toujours sur la coupe transverse du cordon, nous pouvons remarquer que la zone fondue est plus large dans le substrat que dans la partie déposée, comme cela avait déjà été constaté à partir des résultats des simulations thermiques.

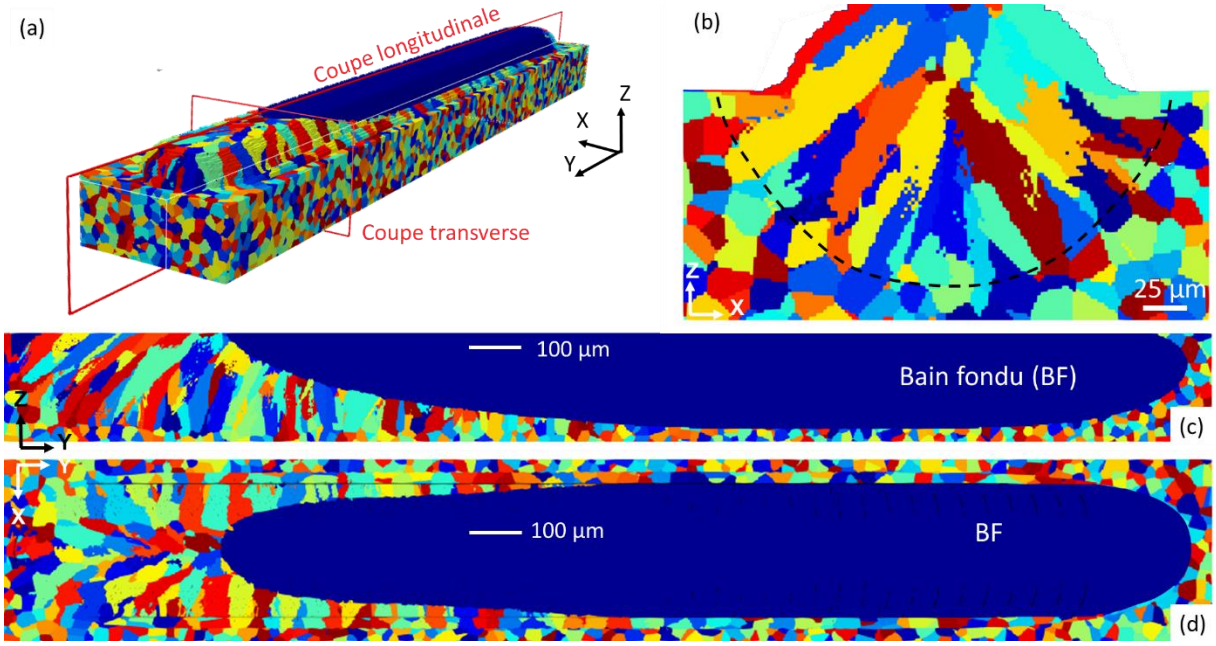


Figure 5.20. Structure de grains du monocordon réalisé avec une puissance de 600 W et une vitesse de 400 mm.s^{-1}, obtenue par simulation numérique CAFE. (a) Vue globale du cordon formé, (b) coupe transverse, (c) coupe longitudinale et (d) vue de dessus.

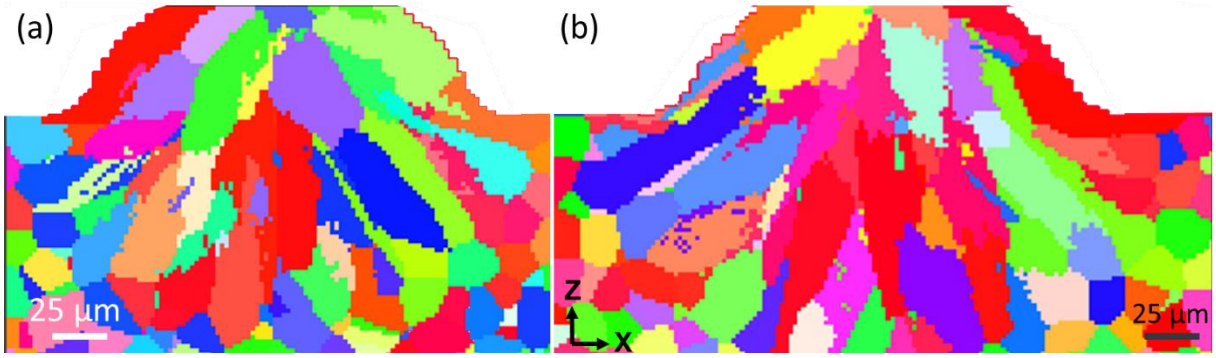


Figure 5.21. Cartographies des grains simulés en coupes transverses des monocordons réalisés avec (a) la 4ème paramétrie, et (b) la 5ème paramétrie. Les couleurs des cartographies correspondent aux valeurs standards IPF représentant l'axe Z dans le repère global du cristal.

Bien que la zone stationnaire n'ait pas été atteinte, les distributions de sections et de rapports de forme des grains observés dans les coupes transverses du monocordon simulé à 600 W ont été comparées à celles du monocordon simulé à 400 W. Pour cela, une cartographie des grains dans une coupe transverse du cordon simulé à 600 W est comparée à une cartographie des grains du monocordon 400 W dans une coupe transverse choisie dans la zone transitoire (Figure 5.21). Les diagrammes montrant les distributions de tailles et de rapports de forme sont visibles sur la Figure 5.22. Nous pouvons constater que les répartitions de rapport de forme sont très proches entre les deux paramétries, et que le pourcentage de grains très élancés (RF > 4) est plus marqué dans le cordon réalisé à plus forte puissance. Les distributions de section sont également similaires, même si nous pouvons constater que les grains sont légèrement plus grands pour une puissance plus élevée.

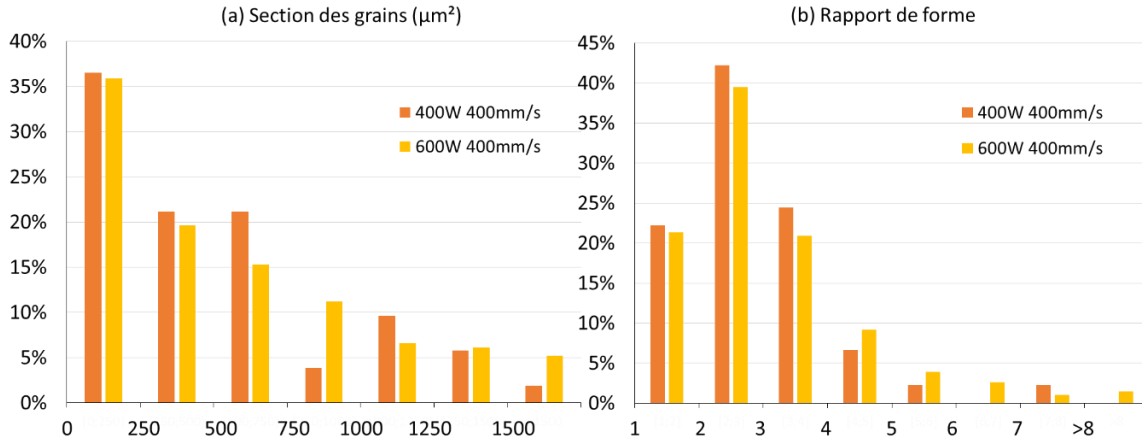


Figure 5.22. Distribution (a) de la section (µm²) et (b) du rapport de forme, des grains formés dans les monocordons simulés pour des puissances de 400 W et 600 W.

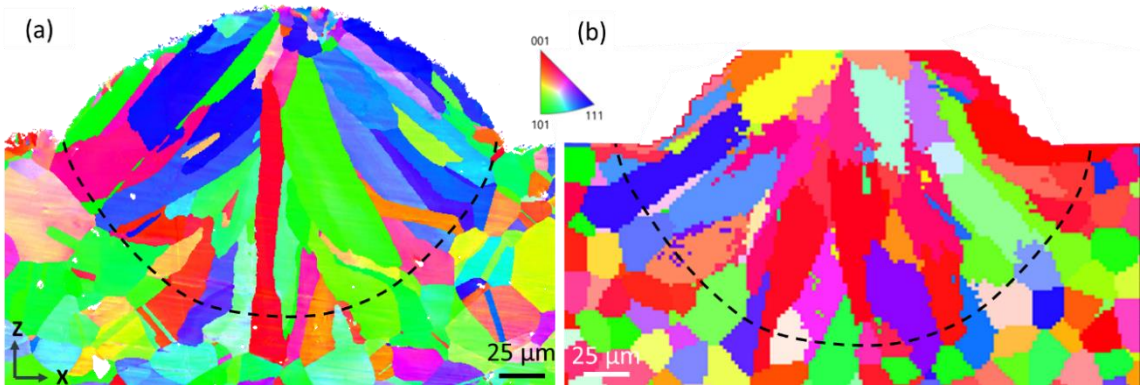


Figure 5.23. Cartographies des grains en coupes transverses des monocordons réalisés avec la 5ème paramétrie obtenus (a) expérimentalement (zone stationnaire) et (b) par simulation CAFE (zone transitoire). Les couleurs des cartographies correspondent aux valeurs standards IPF représentant l'axe Z dans le repère global du cristal.

Une cartographie des grains simulés avec une puissance de 600 W en coupe transverse a également été confrontée à titre indicatif à la cartographie EBSD obtenue expérimentalement (Figure 5.23). Comme nous avons déjà pu le constater précédemment en analysant les caractéristiques des grains réels et numériques, nous observons que les grains dont les directions <001> sont alignées avec l'axe Z (représentés en rouge) semblent avoir une croissance plus marquée que les autres, favorisant leur progression, notamment dans l'axe central du cordon. Rappelons que ces informations sont à considérer avec prudence, les grains analysés issus de la simulation se situant en tout début de solidification et dans une zone non stationnaire thermiquement.

5.3. Conclusion

5.3.1. Simulation du procédé

Afin de prédire les champs de températures générés au cours de la réalisation de monocordons par procédé LBM, les différents milieux présents dans le système, à savoir le lit de poudre, le substrat et l'air (la zone de dénudation) ont été pris en compte dans le modèle. Pour cela, chacun a été considéré comme un milieu homogène auquel sont attribuées des propriétés matériau équivalentes. Une source de chaleur a ensuite été intégrée au modèle pour prendre en compte l'apport d'énergie fourni au bain par le laser. Pour cela, à l'instar du modèle adapté aux lignes de fusion, une source volumique décomposée en plusieurs ellipsoïdes et définie grâce aux caractéristiques du laser a été choisie. L'ajustement du rendement de la source laser pour chaque paramétrie a ensuite permis de tenir compte indirectement de la fluctuation d'énergie transmise au bain en fonction des paramètres procédé appliqués. Une fois fixé pour chacune des paramétries, il s'est avéré que le rendement doit être diminué à plus forte énergie linéique pour retrouver les dimensions du bain réel, contrairement à ce qui avait été constaté dans le cas de cordons sans apport de matière. Suite à l'ajustement du rendement, le modèle a montré sa capacité à retrouver les caractéristiques dimensionnelles principales du bain. La géométrie monocordon caractérisée par sa partie supérieure bombée a notamment été retrouvée, tout comme les dimensions obtenues expérimentalement. Il a toutefois été remarqué que dans le cas d'un bain à géométrie relativement pénétrante, le modèle n'est pas en mesure de reproduire une forme similaire de par sa nature purement conductive.

Une fois le modèle défini et adapté au procédé fusion laser sur lit de poudre, des simulations monocordons ont été effectuées. Les champs thermiques résultants de ces simulations ont été étudiés. Les valeurs de gradients thermiques G et de taux de croissance V au niveau de l'interface solide-liquide ont également été évaluées, ces deux grandeurs physiques régissant la solidification. Il ressort de cette analyse que le gradient varie au sein même d'une section transverse du monocordon, à l'inverse de ce qui avait été observé pour les lignes de fusion. Par ailleurs, il s'avère que l'orientation du gradient thermique varie au cours de la solidification : en début de solidification il est aligné avec la normale au contour du bain alors qu'à l'arrière de la zone de solidification il se désaxe de la normale pour s'orienter davantage vers l'axe vertical.

Les champs de températures extraits des simulations ont également permis d'appréhender les conséquences des variations de puissance sur la thermique du procédé. Il a notamment été constaté que le gradient thermique au bord du bain (en début de solidification) est plus élevé à plus faible puissance, mais qu'il devient un peu plus faible à l'arrière du bain (en fin de solidification), probablement du fait de l'inclinaison plus marquée du gradient vers la direction verticale lorsque la puissance est plus élevée. Cependant, les évolutions de V et G le long du front de solidification sont assez proches pour les deux paramétries testées. Le diagramme $G - V$ a par ailleurs mis en évidence des conditions de solidification similaires pour les 2 paramétries étudiées dans une même zone, ce qui devrait normalement conduire à des structures de grains relativement proches dans les deux cas.

L'étude des valeurs de V et G le long de l'interface solide-liquide nous a permis d'anticiper les tendances auxquelles s'attendre à l'issu des simulations de structures de grains monocordon. Néanmoins ces valeurs variant fortement entre le début et la fin de la solidification, les résultats sont complexes à analyser. Le couplage des résultats thermiques avec le modèle automate cellulaire nous permet donc d'en apprendre davantage sur les structures de grains formées.

5.3.2. Simulation des structures de grains

Les monocordons des 4ème et 5ème paramétries ont été générés par simulations CAFE. La loi utilisée pour modéliser la croissance en pointe de dendrites est identique à celle choisie pour l'étude des lignes de fusion, définie à partir des données matériaux et des résultats extraits des premiers résultats de simulation thermique. Les différents milieux matériels ont été intégrés au modèle : le substrat, le lit de poudre, et la zone de dénudation.

Suite aux simulations nous pouvons constater un cordon à géométrie bombée, composé de grains colonnaires ayant cru par épitaxie à partir des grains composant le substrat. Il a également été remarqué que si les grains croissent initialement dans une direction normale au contour du bain, ils poursuivent ensuite leur croissance vers la zone centrale supérieure du bain. Ces tendances générales concernant les caractéristiques géométriques des grains concordent avec celles observées expérimentalement (*cf*. sections 3.5 et 3.6). La comparaison des sections transverses réelle et numérique a par ailleurs révélé que la section moyenne des grains simulés est 50 % supérieure à la section moyenne réelle des grains. Le rapport de forme quant à lui est quasiment identique (erreur relative inférieure à 2 %).

Bien que les calculs CAFE aient montré des résultats encourageants pour application LBM, les durées de calcul nécessaires aux simulations sont considérables. A titre indicatif, la simulation du monocordon construit avec une puissance de 600 W a nécessité 9 heures de calcul sur une machine avec 12 cœurs pour la thermique du procédé et 48 jours pour la solidification par AC, sur un ordinateur ayant un processeur de 2.4 GHz et une mémoire vive de 62 Go. La parallélisation du calcul apparait donc comme une perspective inévitable de la suite des travaux. Une solution alternative à court terme à la parallélisation des calculs pourrait néanmoins être proposée. L'observation du bain dans le calcul thermique a montré qu'une fois le régime stationnaire atteint, le champ thermique calculé correspond à la translation selon l'axe de balayage du laser du champ thermique obtenu au précédent pas de temps. Par conséquent, il est envisageable une fois le régime stationnaire atteint dans la thermique d'arrêter les calculs puis de simplement reconstruire l'évolution du champ thermique au cours du temps pas translations successives.

Conclusion

Ces travaux de thèse avaient pour objectif la mise en place d'un outil numérique permettant la prédiction des structures de grains formées dans un composant en acier 316L élaboré par procédé LBM. Pour cela, nous avons adopté une approche couplant la réalisation d'essais instrumentés avec la modélisation numérique.

Les campagnes d'essais ont permis l'étude de la physique du procédé et de la solidification, ainsi que le recueil d'informations relatives aux caractéristiques du bain de fusion et à celles des grains formés. Différentes combinaisons de paramètres ayant été testées, ces essais ont également offert la possibilité d'étudier l'influence des paramètres opératoires sur la thermique du procédé et donc sur les caractéristiques des structures de grains observées. Bien que le procédé LBM consiste en la réalisation de pièces multicouches, nous nous sommes essentiellement consacrés à l'étude de géométries simples (monocouches). Ce choix a permis d'appréhender la physique du procédé au cours des premiers instants de la fabrication d'une pièce, notamment dans le but d'identifier les phénomènes à intégrer au modèle numérique. En effet, une fois les premières étapes de fabrication de la pièce comprises et validées, l'étude de géométries multicouches pourra être abordée plus sereinement. Deux géométries monocouches ont été étudiées : des lignes de fusion, consistant en un tir laser directement sur le substrat, et des monocordons, formés suite à la fusion du lit de poudre déposé sur le substrat. Bien que la configuration ligne de fusion ne soit pas directement rattachée au procédé LBM, nous avons décidé de nous y intéresser afin d'évaluer l'impact de l'apport de matière sur les transferts de chaleur et sur la formation des structures de grains.

Suite à l'étude expérimentale, un modèle numérique 3D adapté au procédé LBM a été mis en place. Inspiré du modèle proposé initialement par Gandin et Rappaz [Rappaz 1993], il consiste en un couplage entre la modélisation thermique du procédé par élément finis (EF) et la modélisation de la solidification par automates cellulaires (AC). On parle alors du modèle « CAFE ». Le choix ayant été fait d'adopter un modèle purement conductif pour le procédé, les données expérimentales et plus particulièrement les caractéristiques du bain de fusion ont permis la calibration de la source de chaleur volumique représentant l'apport d'énergie fourni au bain par le laser. A l'issue de l'ajustement de la source, les champs thermiques simulés ont montré des bains fondus en bon accord avec ceux observée expérimentalement, en termes de géométrie et de dimensions. Les champs de température ont également permis d'évaluer le gradient thermique et le taux de croissance le long de l'intervalle de solidification, et donc les conditions de solidification. Après transmission des champs de température, les structures de grains formées ont été simulées. Les tendances principales constatées expérimentalement ont été retrouvées à savoir des grains colonnaires, ayant cru par épitaxie à partir des grains composant le substrat et principalement orientés selon la direction du gradient thermique. Bien qu'ayant déjà montré sa capacité à prédire les structures de grains formées pour des applications de soudage [Chen 2014], le modèle CAFE défini dans le cadre de cette thèse constitue le premier outil disponible au CEA permettant la prédiction des grains solidifiés.

Néanmoins, bien que les tendances principales concernant les champs thermiques et les caractéristiques granulaires aient été retrouvées, plusieurs voies d'amélioration du modèle ont été identifiées.

Tout d'abord, il a été constaté que dans le cas de bains réels à géométrie pénétrante, le modèle conductif ne permettait pas de reproduire la profondeur du bain. L'ajustement de la source de chaleur ayant en partie pour objectif de palier à la non prise en compte des mouvements fluides dans

le modèle, il semblerait en effet qu'elle ne suffise pas pour des combinaisons de paramètres générant des profondeurs de bain élevées. D'autre part, nous avons constaté que la hauteur de matière formée sur le substrat à l'issue des simulations CAFE dépendait directement de la hauteur du lit de poudre initialement fixée, empêchant ainsi le modèle de reproduire la hauteur réelle déposée. Enfin, le facteur le plus critique du modèle concerne les durées de calcul engendrées. En effet, les simulation CAFE monocouches ayant nécessité des temps de calculs particulièrement longs (plus de 45 jours), le modèle en l'état ne semble pas adapté à la modélisation de géométries multicouches. La loi de croissance définie dans le cadre de la thèse étant directement dépendante de la température, il pourrait être intéressant de définir une loi tenant également compte de la vitesse des écoulements. Pour cela un couplage fort devra être implémenté.

Un des objectifs à long terme du CEA étant de disposer d'un outil robuste de prédiction des structures de grains dans des pièces réalisées par procédé LBM, il est nécessaire de parvenir à simuler des pièces industrielles et donc des géométries multicouches. Pour cela, l'amélioration principale du modèle CAFE défini dans le cadre de cette thèse consistera à paralléliser le calcul AC. La possibilité de simuler des pièces multicouches dans des délais raisonnables ne pourra effectivement se faire sans la parallélisation du calcul automate cellulaire. Une solution supplémentaire envisageable pour limiter les durées de calcul consiste à identifier au cours du calcul AC les cellules concernées par les changements d'état et à ne considérer que celles-ci, réduisant ainsi fortement le domaine AC étudié au cours d'un pas de temps.

Une solution envisageable pour l'amélioration de la prédiction de la géométrie du bain et de la hauteur de matière déposée repose sur le remplacement du modèle thermo-conductif par un modèle multi-physique du procédé. La prise en compte des mouvements du fluide pourrait en effet contribuer à augmenter la profondeur du bain formé, en particulier aux fortes puissances, et participer à prédire la hauteur réelle de matière déposée sur le substrat. La géométrie des zones fondues jouant un rôle important dans la formation des structures de grains, la prédiction de ces dernières pourrait alors être plus précise. De plus, le choix d'un modèle multi-physique pour représenter le procédé permettrait de s'affranchir de l'étape d'ajustement de la source de chaleur à partir des données expérimentales.

Le comportement mécanique d'une pièce étant directement relié à sa structure granulaire, une fois parallélisé et donc capable de simuler la fabrication de pièces multicouches, le modèle CAFE pourrait être utilisé pour prédire le comportement mécanique de pièces industrielles. L'exécution d'essais mécaniques nécessitant du temps de fabrication, d'usinage et d'expérimentation, et générant des coûts de réalisation, la prévision du comportement mécanique de composants par simulation représenterait alors des économies de temps et de moyens non négligeables.

Finalement, le modèle actuel défini dans le cadre de ces travaux de thèse ne se limite pas au procédé LBM. En effet, la possibilité d'intégrer l'apport de matière dans la modélisation du procédé, que ce soit sous forme de poudre ou de fil, fait du modèle un outil adapté aux procédés de soudage laser, ainsi qu'au procédé de FA WAAM, fréquemment utilisés pour la réalisation de composants dans le domaine nucléaire.

Annexe 1 : Propriétés matériau utilisées pour la simulation

Paramètres	316L [Depradeux 2004]	Air [Çengel 2014]	T (°C)
Capacité Calorifique C_p ($J.kg^{-1}.°C^{-1}$)	450	1007	20
	490	1009	100
	525	1023	200
	545	1044	300
	560	1069	400
	580	1093	600
	625	1153	800
	660	1184	1000
	670	1204	1200
	690	1234	1500
	690	1264	10000
Conductivité thermique λ ($W.m^{-1}.°C^{-1}$)	14.7	0.02514	20
	15.8	0.03095	100
	17.2	0.03779	200
	18.6	0.04418	300
	20.0	0.05015	400
	21.1	0.05572	500
	22.2	0.06093	600
	23.2	0.06581	700
	24.1	0.07037	800
	24.8	0.07465	900
	25.5	0.07868	1000
	26.9	0.085604	1200
	28.3	0.092528	1400
	28.3	0.1113	10000
Masse volumique ρ ($kg.m^{-3}$)	8.00e03	1.2040	20
	7.93e03	0.7459	200
	7.84e03	0.5243	400
	7.75e03	0.4042	600
	7.65e03	0.3289	800
	7.55e03	0.2772	1000
	7.45e03	*0.2459*	1200
	7.35e03	*0.2146*	1400
	7.30e03	0.1990	1500
	7.30e03	0.1553	10000

Annexe 1. Propriétés matériaux utilisées dans le modèle thermique

Références

[Alhafadhi 2019] M. H. Alhafadhi, G. Krallics, *The Effect of Heat Input Parameters on Residual Stress Distribution by Numerical Simulation,* IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Vol. 613, 2019.

[Andani 2018] M. T. Andani, R. Dehghani, M. R. Karamooz-Ravari, R. Mirzaeifar, J. Ni, *A study on the effect of energy input on spatter particles creation during selective laser melting process*, Additive Manufacturing, Vol. 20, pp. 33-43, 2018.

[Andreau 2019] O. Andreau, I. Koutiri, P. Peyre, J-D. Penot, N. Saintier, E. Pessard, T. D. Terris, C. Dupuy, T. Baudin, *Texture control of 316L parts by modulation of the melt pool morphology in selective laser melting, Journal of Materials Processing Technology,* Vol. 264, pp. 21-31, 2019.

[Antony 2014] K. Antony, N. Arivazhagan, K. Senthilkumaran, *Numerical and experimental investigations on laser melting of stainless steel 316L metal powders,* Journal of Manufacturing Processes, Vol. 16, No. 3, pp. 345-355, 2014.

[Antonysamy 2013] A. A. Antonysamy, J. Meyer, P.B. Prangnell*, Effect of build geometry on the β-grain structure and texture in additive manufacture of Ti-6Al-4V by selective electron beam melting*, Materials Characterization, 2013.

[Arısoy 2019] Y. M. Arısoy, L. E. Criales, T. Özel, *Modeling and simulation of thermal field and solidification in laser powder bed fusion of nickel alloy IN625,* Optics and Laser Technology, Vol. 109, pp. 278-292, 2019.

[Attaran 2017] M. Attaran, *The rise of 3-D printing: The advantages of additive manufacturing over traditional manufacturing, Business Horizons,* Vol. 60, No. 5, pp. 677-688, 2017.

[Aurenhammer 1991] F. Aurenhammer, *Voronoi Diagrams – A survey of a fundamental geometric data structure,* ACM Computing Surveys, 1991.

[Bertoli 2017] U. S. Bertoli, A. J. Wolfer, M. J. Matthews, J-P. R. Delplanque, J. M. Schoenungn, *On the limitations of Volumetric Energy Density as a design parameter for Selective Laser Melting*, , Materials and Design, Vol. 113, pp. 331-340, 2017.

[Bertoli 2019] U. S. Bertoli, B. E. MacDonald, J. M. Schoenung, *Stability of cellular microstructure in laser powder bed fusion of 316L stainless steel*, Materials Science & Engineering A, Vol. 739, pp. 109-117, 2019.

[Bidare 2018] P. Bidare, I. Bitharas, R. M. Ward, M. M. Attallah, A. J. Moore, *Fluid and particle dynamics in laser powder bed fusion*, Acta Materialia, Vol. 142, pp. 107-120, 2018.

[Brika 2020] S. E. Brika, M. Letenneur, C. A. Dion, V. Brailovski, *Influence of particle morphology and size distribution on the powder flowability and laser powder bed fusion manufacturability of Ti-6Al-4V alloy*, Additive Manufacturing, Vol. 31, 2020.

[Brochard 2009] Michel Brochard, *Modèle couplé cathode-plasma-pièce en vue de la simulation du procédé de soudage à l'arc TIG*, Thèse de Doctorat, Université d'Aix-Marseille 1, 2009.

[Boettinger 2002] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, A. Karma. *Phase-Field simulation of solidification*. Annu. Rev. Mater. Res., Vol. 32, pp. 163-94, 2002.

[Boley 2015] C. D. Boley, S. A. Khairallah, A. M. Rubenchik, *Calculation of laser absorption by metal powders in additive manufacturing*, Applied Optics, Vol. 54, No. 9, 2015.

[Bunge 1982] H. J. Bunge, P. R. Morris, *Texture Analysis in Materials Science*, Mathematical Methods, Butterworth, London, 1982.

[Campanelli 2014] L. Campanelli, G. Casalino, N. Contuzzi, A. Angelastro, A.D. Ludovico, *Analysis of the Molten/solidified Zone in Selective Laser Melted Parts,* F. Dorsch (Ed.), p. 896311,2014.

[Carozzani 2012] T. Carozzani, *Développement d'un modèle 3D Automate Cellulaires-Eléments Finis (CAFE) parallèle pour la prédiction de structures de grains lors de la solidification d'alliages métalliques,* Thèse de Doctorat, MINES ParisTech, 2012.

[Casati 2016] R. Casati, J. Lemke, M. Vedani, *Microstructure and Fracture Behaviour of 316L Austenitic Stainless Steel Produced by Selective Laser Melting*, Journal Of Materials Science & Technology, 2016.

[Cast3M 2019] Site Cast3M, http://www-cast3m.cea.fr/, site web, 2019.

[Chen 2014] S. Chen, *Three-dimensional Cellular Automaton-Finite Element (CAFE) modelling for the grain structures development in Gas Tungsten / Metal Arc Welding processes*, Thèse de Doctorat, MINES Paris-Tech, 2014.

[Chen 2016] S. Chen, G. Guillemot, C.-A. Gandin, *Three-dimensional cellular automaton-finite element modelling of solidification grain structures for arc-welding processes*, Acta Materialia, Vol. 115, pp. 448-467, 2016.

[Chen 2017] Q. Chen, G. Guillemot, C.-A. Gandin, M. Bellet, *Three-dimensional finite element thermomechanical modelling of additive manufacturing by selective laser melting for ceramic materials*, Additive Manufacturing, Vol. 16, pp. 124-137, 2017.

[Cheng 2018] B. Cheng, J. Lydon, K. Cooper, V. Cole, P. Northrop, K. Chou, *Melt pool sensing and size analysis in laser powder-bed metal additive manufacturing*, Journal of Manufacturing Processes, Vol. 32, pp. 744-753, 2018.

[Cherry 2015] J. A. Cherry, H. M. Davies, S. Mehmood, N. P. Lavery, S. G. R. Brown, J. Sienz, *Investigation into the Effect of process parameters on microstructural and physical properties of 316L stainless steel parts by selective laser melting*, The International Journal of Advanced Manufacturing Technology Vol. 76, No. 5, pp. 869–879, 2015.

[Chniouel 2019] A. Chniouel, *Étude de l'élaboration de l'acier inoxydable 316L par fusion laser sélective sur lit de poudre : influence des paramètres du procédé, des caractéristiques de la poudre, et des traitements thermiques sur la microstructure et les propriétés mécaniques,* Thèse de Doctorat, Université Paris-Saclay, 2019.

[Choudhury 2012] A. Choudhury, K. Reuther, E. Wesner, A. August, B. Nestler, M. Rettenmayr, *Comparison of phase-field and CA models for dendritic solidification in Al–Cu alloy*, Computational Materials Science, Vol. 55, pp. 263-268, 2012.

[Ciurana 2013] J. Ciurana, L. Hernandez, J. Delgado, *Energy density analysis on single tracks formed by selective laser melting with CoCrMo powder material*, Int. J. Adv. Manuf. Technol., Vol. 68, pp. 1103–1110, 2013.

[Cook 2020] P. S. Cook, A. B. Murphy, *Simulation of melt pool behaviour during additive manufacturing: Underlying physics and progress*, Additive Manufacturing, Vol. 31, 2020.

[Cruz 2020] P. J. S. Cruz, A. Camões, B. Figueiredo, M. J. Ribeiro, J. Renault, *Additive manufacturing effect on the mechanical behaviour of architectural stoneware bricks*, Construction and building Materials, 2020.

[CustomPart 2008] http://www.custompartnet.com/wu/selective-laser-sintering, 2008.

[Çengel 2014] Y. A. Çengel, J. M. Cimbala, *Property Tables and Charts,* Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications, Ed. 3, McGraw-Hill, 2014.

[Dantzig 2009] J. A. Dantzig, M. Rappaz, Solidification, EPFL Press, 2009.

[DebRoy 2018] T. DebRoy, H. L. Wei, J. S Zuback, T. Mukherjee, J. W Elmer, J. O Milewski, A. M Beese, A. Wilson-Heid, A. De, W. Zhang, *Additive Manufacturing of metallic components – Process, structure and properties*, Progress in Materials Science, Vol. 92, pp. 112-224, 2018.

[Denlinger 2017] E. R. Denlinger, M. Gouge, J. Irwin, P. Michaleris, *Thermomechanical model development and in situ experimental validation of the Laser Powder-Bed Fusion process*, Additive Manufacturing, Vol. 16, pp. 73-80, 2017.

[Depradeux 2004] L. Depradeux, *Simulation numérique du soudage-acier 316L : validation sur cas tests de complexité croissante*, Thèse de Doctorat, Villeurbanne, INSA, 2004.

[Dezfoli 2017] A. R. A. Dezfoli, W.-S. Hwang, W.-C. Huang, T.-W. Tsai, *Determination and controlling of grain structure of metals after laser incidence: Theoretical approach*, Nature scientific reports, 2017.

[Dilthey 1997] U. Dilthey, V. Pavlyk, T. Reichel. *Mathematical modeling of weld phenomena,* London: The Institute of Materials, Vol. 3, pp. 85-105, 1997.

[Dunbar 2016] A. J. Dunbar, E. R. Denlinger, J. Heigel, P. Michaleris, P. Guerrier, R. Martukanitz, T. W. Simpson, *Development of experimental method for in situ distortion and temperature measurements during the laser powder bed fusion additive manufacturing process*, Additive Manufacturing, Vol. 12, pp. 25-30, 2016.

[Fan 2001] H. G. Fan; H. L. Tsai, S. J. Na, *Heat transfer and fluid flow in a partially or fully penetrated weld pool in gas tungsten arc welding*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 44, pp. 417-428, 2001.

[Gandin 1994] Ch-A. Gandin, M. Rappaz, *A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes,* Acta Metall. Mater. Vol. 42, No. 7, pp. 2233-2246, 1994.

[Gandin 1997] Ch-A. Gandin & M. Rappaz, *A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth*, Acta Metallurgica, Vol. 45, No. 5, pp. 2187-2195, 1994.

[Gandin 1999] Ch-A. Gandin, J.-L. Desbiolles, M. Rappaz, *A three-Dimensional Cellular Automaton-Finite Element Model for the Prediction of Solidification Grain Structures,* Metallurgical and materials transactions A, Vol. 30A, 1999.

[Gandin 2003] Ch-A. Gandin, G. Guillemot, B. Appolaire, N. T. Niane, *Boundary layer correlation for dendrite tip growth with fluid flow,* Materials Science and Engineering: A, Vol. 342, No 1-2, pp. 44-50, 2003.

[Gaumann 1999] M. Gäumann, S. Henry, F. Cléton, J.-D. Wagnière, and W. Kurz, *Epitaxial laser metal forming: analysis of microstructure formation*, Materials Science and Engineering: A271 : pp. 232 – 241, 1999.

[Gharib 2019] A. R. Gharib, F. R. Biglari, M. Shafaie, A. H. Kokabi, *Experimental and numerical investigation of fixture time on distortion of welded part*, The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, Vol 104, pp. 1121-1131, 2019.

[Goldak 1984] J. Goldak, A. Charkravarti, M. Bibby, *A New Finite Element Model for Welding Heat Sources,* Metallurgical transactions B., Vol. 15B, pp. 299-305, 1984.

[Guillemot 2004] G. Guillemot, Ch-A. Gandin, H. Combeau, R. Heringer, *A new cellular automaton- finite element coupling scheme for alloy solidification*, Modelling and simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 12, No. 3, pp. 545-556, 2004

[Gunenthiram 2018] Valérie Gunenthiram, *Compréhension de la formation de porosités en fabrication additive (LBM). Analyse expérimentale de l'interaction laser – lit de poudre – bain liquide,* Thèse de Doctorat, ParisTech, 2018.

[Gürtler 2013] F.-J. Gürtler, M. Karg, K.-H. Leitz, M. Schmidt, *Simulation of laser beam melting of steel powders using the three-dimensional volume of fluid method*, Physics Procedia, Vol. 41, pp. 881-886, 2013.

[Gustmann 2016] T. Gustmann, A. Neves, U. Kühn, P. Gargarella, C. S Kiminami, C. Bolfarini, J. Eckert, S. Pauly, *Influence of processing parameters on the fabrication of a Cu-Al-Ni-Mn shape-memory alloy by selective laser melting*, Additive Manufacturing, Vol. 11, pp. 23-31, 2016.

[Hewitt 2020] S. Hewitt, L. Margetts, A. Shterenlikht, A. Revell, *A massively parallel multiscale CAFE framework for the modelling of fracture in heterogeneous materials under dynamic loading*, Advances In Engineering Software, Vol. 139, 2020.

[Hirt 1981] C. W. Hirt, B. D. Nichols, *Volume of fluid (VOD) method for the dynamics of free boundaries*, Journal of Computational Physics, Vol. 39, No. 1, pp. 201-225, 1981.

[Hull 1984] C. W. Hull, *Apparatus for production of three-dimensional objects by stereolithography,* brevet US-6027324A, 1984.

[Holm 2001] E. A. Holm, C. C. Battaile, *The computer simulation of microstructural evolution,* Computational Materials, 2001.

[Hussein 2013] A. Hussein, L. Hao, C. Yan, R. Everson, *Finite element simulation of the temperature and stress fields in single layers built without-support in selective laser melting*, Materials and Design, Vol. 52, pp. 638-647, 2013.

[Ji 2018] Y. Ji, L. Chen, L.-Q. Chen, *Understanding Microstructure Evolution during Additive Manufacturing of Metallic Alloys Using Phase-Field Modeling*, Chapter 6 of Thermo-Mechanical Modeling of additive Manufacturing, pp. 93-116, 2018.

[Juric 1996] D. Juric, G. Tryggvason, *A Front-Tracking Method for Dendritic Solidification*, Journal of Computational Physics, Vol. 123, pp. 127-148, 1996.

[Keller 2017] T. Keller, G. Lindwall, S. Ghosh, L. Ma, B. M. Lane, F. Zhang, U. R. Kattner, E. A. Lass, J. C. Heigel, Y. Idell, M. E. Williams, A. J. Allen, J. E. Guyer, L. E. Levine *Application of finite element, phase-field, and CALPHAD-based methods to additive manufacturing of Ni-based super alloys*, Acta Materialia, Vol. 139, pp. 244-253, 2017.

[Khairallah 2016] S. A. Khairallah, A. T. Anderson, A. Rubenchik, W. E. King, *Laser powder-bed fusion additive manufacturing: Physics of complex melt flow and formation mechanisms of pores, spatter, and denudation zones*, Acta Materialia, Vol. 108, pp. 36-45, 2016.

[King 2014] W. E. King, H. D. Barth, V. M. Castillo, G. F. Gallegos, J. W. Gibbs, D. E. Hahn, C. Kamath, A. M. Rubenchik, *Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing, Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 214, pp. 2915–2925, 2014.

[Koepf 2019] J. A. Koepf, D. Soldner, M. Ramsperger, J. Mergheim, M. Markl, C. Korner, *Numerical microstructure prediction by a coupled finite element cellular automaton model for selective electron beam melting*, Computational Materials Science, Vol. 162, pp. 148-155, 2019.

[Kollár 2019] D. Kollár, B. Kövesdi, L. G. Vigh, S. Horváth, *Weld process model for simulating metal active gas welding*, the International Journal of Advanced Manufacturing Technology, Vol. 102, pp. 2063-2083, 2019

[Kong 2019] D. Kong, X. Ni, C. Dong, L. Zhang, C. Man, X. Cheng, X. Li *Anisotropy in the microstructure and mechanical property for the bulk and porous 316L stainless steel fabricated via selective laser melting*, Materials Letters, Vol. 235, pp. 1-5, 2019.

[Kruth 2010] J.P. Kruth, M. Badrossamay, E. Yasa, J. Deckers, L. Thijs, J. Van Humbeeck, *Part and material properties in selective laser melting of metals*, 16th International Symposium on Electromachining (ISEM XVI), Shanghai (Chine), 2010.

[Kurz 1984] W. Kurz, D. J. Fisher, Fundamentals of solidification, 1984.

[Kurz 1986] W. Kurz, B. Giovanola, and R. Trivedi, *Theory of microstructural development during rapid solidification,* Acta Metallurgica, Vol. 34, No. 5, pp. 823-830, 1986.

[Kurzynowski 2018] T. Kurzynowski, K. Gruber, W. Stopyra, B. Kuźnicka, E. Chlebus, *Correlation between process parameters, microstructure and properties of 316 L stainless steel processed by selective laser melting*, Materials Science & Engineering A, Vol. 718, pp. 64-73, 2018.

[Langer 1977] J. Langer and J. Muller-Krumbhaar*, Stability effects in dendritic crystal growth*, Journal of Crystal Growth, Vol. 42, pp. 11-14, 1977.

[Li 2017] L. Li, C. Lough, A. Replogle, D. Bristow, R. Landers, E. Kinzel, *Thermal modelling of 304L Selective Laser Melting*, Solid Freeform Fabrication 2017: Proceedings of the 28th Annual International, 2017.

[Li 2020] Y. Li, X. Ren, J. He, Z. Zhang, *Effect of thermal residual stresses on ductile-to-brittle transition of a bi-material specimen by using the CAFE method*, European Journal of Mechanics – A/Solids, Vol. 80, 2020.

[Lian 2018] Y. Lian, S. Lin, W. Yan, W. K. Liu, G. J. Wagner, *A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing,* Computational Mechanics, Vol. 61, pp. 543-558, 2018.

[Lipton 1987] J. Lipton, W. Kurz, R. Trivedi, *Rapid dendrite growth in undercooled alloys,* Acta Metall35-4:957-964, 1987.

[Liu 2015] Y. Liu, Y. Yang, S. Mai, D. Wang, C. Song, Investigation into spatter behaviour during selective laser melting of AISI 316L stainless steel powder, Materials & Design, Vol. 87, pp. 797-806, 2015.

[Liu 2017] Y. Liu, J. Zhang, Z. Pang, *Numerical and experimental investigation into the subsequent thermal cycling during laser melting of multi-layer 316L stainless steel*, Optics and Laser Technology, pp. 23-32, 2017.

[Liu 2018a] P. W. Liu, Y. Z. Ji, Z. Wang, C. L. Qiu, A. A. Antonysamy, L.-Q. Chen, X. Y. Cui, L. Chen, *Investigation on evolution mechanisms of site-specific grain structures during metal additive manufacturing*, Journal of Materials Processing Tech. Vol. 257, pp. 191-202, 2018.

[Liu 2018b] Y. Liu, J. Zhang, Z. Pang, *Numerical and experimental investigation into the subsequent thermal cycling during selective laser melting of multi-layer 316L stainless steel*, Optics and Laser Technology, Vol. 98, pp. 23-32, 2018

[Liu 2019] P. Liu, Z. Wang, Y. Xiao, M. F. Horstemeyer, X. Cui, L. Chen, *Insight into the mechanisms of columnar to equiaxed grain transition during metallic additive manufacturin*g, Additive Manufacturing, pp. 22-29, 2019.

[Liu 2020a] B. Liu, G. Fang, L. Lei, W. Liu*, A new ray tracing heat source model for mesoscale CFD simulation of selective laser melting (SLM)*, Applied Mathematical Modelling, Vol. 79, pp. 506-520, 2020.

[Liu 2020b] P. W. Liu, Z. Wang, Y. H. Xiao, R. A. Lebensohn, Y. C. Liu, M. F. Horstemeyer, X. Y. Cui, L. Chen, *Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials*, International Journal of Plasticity, Vol. 128, 2020.

[Liverani 2017] E. Liverani, S. Toschi, L. Ceschini, A. Fortunato, *Effect of selective laser melting (SLM) process parameters on microstructure and mechanical properties of 316L austenitic stainless steel*, Journal of Materials Processing Tech, Vol. 249, pp. 255-263, 2017.

[Lu 2018] L.-K. Lu, N. Sridhar, Y.-W. Zhang, *Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing*, Acta Materialia, Vol. 14, pp. 801-809, 2018.

[Manvatkar 2014] V. Manvatkar, A. De, T. DebRoy*, Heat transfer and material flow during laser assisted multi-layer additive manufacturing*, Journal of Applied Physics, Vol. 116, 2014.

[Manvatkar 2015] V. Manvatkar, A. De, T. DebRoy, *Spatial variation of melt pool geometry, peak temperature and solidification parameters during laser assisted additive manufacturing process*, Materials Science and Technology, Vol. 31, No. 8, pp. 924-930, 2015.

[Matthews 2016] M. J. Matthews, G. Guss, S. A. Kairallah, A. M. Rubenchik, P. J. Depond, W. E. King, *Denudation of metal powder layers in laser powder bed fusion processes,* Acta Materialia, Vol. 114, pp. 32-42, 2016.

[Metropolis 1953] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *Equation of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys. 21, pp. 1087–1092, 1953.

[Moradi 2016] M. Moradi, M. Ghoreishi, A. Rahmani, *Numerical and Experimental Study of Geometrical Dimensions on Laser-TIG Hybrid Welding of Stainless Steel 1.4418*, Journal of Modern Processes in Manufacturing and Production, Vol. 5, No. 2, 2016.

[Mukherjee 2018a] T. Mukherjee, H. L. Wei, A. Deb, T. DebRoy, *Heat and fluid flow in additive manufacturing – Part I: Modeling of powder bed fusion,* Computational Materials Science, Vol. 150, pp. 304-313, 2018.

[Mukherjee 2018b] T. Mukherjee, H. L. Wei, A. Deb, T. DebRoy, *Heat and fluid flow in additive manufacturing – Part II: Powder bed fusion of stainless steel, and titanium, nickel and aluminium base alloys,* Computational Materials Science, Vol. 150, pp. 369-380, 2018.

[Mukte 2018] C. Mutke, K. Geenen, A. Röttger, W. Theisen, *Interaction between laser radiation and metallic powder of 316L austenitic steel during selective laser melting*, Materials Characterization, Vol. 145, pp. 337-346, 2018.

[Nakamura 2015] H. Nakamura, Y. Kawahito, S. Katayama, *Fundamental study for the relationship between melt flow and spatter in high-Power Laser welding of pure Titanium*, Transactions of JWRI, Vol. 44, No. 2, 2015.

[Osher 1988] S. Osher and J. Sethian, *Fronts propagating with curvature dependant speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*, Journal of Computational Physics, Vol. 79, pp. 12-49, 1988.

[Panwisawas 2017] C. Panwisawas, C. Qiu, M. J. Anderson, Y. Sovani, R. P. Turner, M. M. Attallah, J. W. Brooks, H. C. Basoalto, *Mesoscale modelling of selective laser melting: Thermal fluid dynamics and microstructural evolution*, Computational Materials Science, Vol. 126, pp. 479-490, 2017.

[Pro3D 2020] Site de la plateforme Pro3D, https://centre-pro3d.fr/, site web, 2020.

[Rai 2016] A. Rai, M. Markl, C. Körner, *A coupled Cellular Automaton–Lattice Boltzmann model for grain structure simulation during additive manufacturing* Computational Materials Science, pp 37-48, 2016.

[Rai 2017] A. Rai, H. Helmer, C. Körner, *Simulation of grain structure evolution during powder bed based additive manufacturing*, Additive Manufacturing, Vol. 13, pp. 124-134, 2017.

[Rappaz 1993] M. Rappaz, Ch-A. Gandin, *Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes,* Acta Metallurgica Materialia. Vol. 41, No. 2, pp. 345-360, 1993.

[Revilla-León 2017] M. Revilla-León, I. Martinez Klemm, J. García-Arranz, M. Özcan, *3D Metal Printing - Additive Manufacturing Technologies for Frameworks of Implant-Borne Fixed Dental Prosthesis*, The European journal of prosthodontics and restorative dentistry, 2017.

[Rodgers 2017] T. M. Rodgers, J. D. Madison, V. Tikare, *Simulation of metal additive manufacturing microstructures using kinetic Monte Carlo*, Computational Materials Science, Vol. 135, pp. 78-89, 2017.

[Sahoo 1998] P. Sahoo, T. DebRoy, M. J. Mc Nallan, *Surface Tension of Binary Metal – Surface Active Solute systems under conditions relevant to welding metallurgy*, Metallurgical transactions B, Vol. 19B, 1998.

[Sahoo 2016] S. Sahoo, K. Chou, *Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti–6Al–4V in electron beam additive manufacturing process*, Additive Manufacturing, Vol. 9, pp. 14-24, 2016.

[Saluja 2012] R. S. Saluja, R. Ganesh, Narayanan, S. Das, *Cellular automata finite element (CAFE) model to predict the forming of friction stir welded blanks*, Computational Materials Science, Vol. 58, pp. 87-100, 2012.

[Sames 2014] W. J Sames, F. Medina, W. H, Peter, S. S Babu, R. R Dehoff, *Effect of process control and powder quality on Inconel 718 produced using electron beam melting,* Proceedings of the 8th international symposium on super alloy 718 and derivatives, p. 409, 2014.

[Sames 2016] W. J. Sames, F. A. List, S Pannala, R. R Dehoff, S. S. Babu, *The metallurgy and processing science of metal additive manufacturing*, International Materials Reviews, 2016.

[Shapiro 2016] A. A. Shapiro, J. P. Borgonia, Q. N. Chen, R. P. Dillon, B. McEnerney, R. Polit-Casillas and L. Soloway, *Additive Manufacturing for Aerospace Flight Applications*, Journal of Spacecraft and Rockets Vol. 53, No. 5, 2016.

[Solas 2017] D. Solas, *Représentation des orientations cristallographiques*, Support numérisé de formation, Université Paris Sud Orsay, 2017.

[Steinbach 1999] I. Steinbach, C. Beckermann, B. Kauerauf, Q. Li, J. Guo, *Three-dimensional modeling of equiaxed dendritic growth on a mesoscopic scale*, Acta Metallurgica, Vol. 47, No. 3, pp. 971-982, 1999.

[Sun 2017] D. Sun, X. Li, and W. Tan, *A parametric study on grain structure in selective laser melting process for stainless steel 316l*, Solid Freeform Fabrication 2017: Proceedings of the 28th Annual International, 2017.

[Sun 2019] S.-H. Sun, T. Ishimoto, K. Hagihara, Y. Tsutsumi, T. Hanawa, T. Nakano, *Excellent mechanical and corrosion properties of austenitic stainless steel with a unique crystallographic lamellar microstructure via selective laser melting,* Scripta Materialia, Vol. 159, pp. 89-93, 2019.

[Takaki 2018] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Aoki, Ch-A. Gandin, *Competitive grain growth during directional solidification of a polycrystalline binary alloy: Three-dimensional large-scale phase-field study*, Materialia, Vol. 1, pp. 104-113, 2018.

[Tan 2015] W. Tan, Y. C. Shin, *Multi-scale modeling of solidification and microstructure development in laser keyhole welding process for austenitic stainless steel*, Computational Materials Science, Vol. 98, pp. 446-458, 2015.

[Thijs 2013] L. Thijs, K. Kempen, J-P. Kruth, J. V. Humbeeck, *Fine-structured aluminium products with controllable texture by selective laser melting of pre-alloyed AlSi10Mg*, Acta Materialia, Vol. 61, pp. 1809-1819, 2013.

[Tolochko 2004] N. K. Tolochko, S. E. Mozzharov, I. A. Yadroitsev, T. Laoui, L. Froyen, V. I. Titov, *Balling processes during selective laser treatment of powders*, Rapid Prototyping Journal, Vol. 10, No. pp. 78–87, 2004.

[Tryggvason 2001] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, Y.-J. Jan, *A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow*, Journal of Computational Physics, Vol. 169, pp. 708-759, 2001.

[Tucker 2013] J. C. Tucker, *Synthetic Microstructure-Based Lifing of Ni-Based Superalloys*, Thèse de Doctorat, Carnegie Mellon University, 2013

[Wang 2011] L. Wang, Q. S. Wei, Y. S. Shi, J. H. Liu, W. T. He, *Experimental investigation into the single-track of selective laser melting of IN625*, Adv. Mater. Res., 2011.

[Wang 2016] D. Wang, C. Song, Y. Yang, Y. Bai, *Investigation of crystal growth mechanism during selective laser melting and mechanical property characterization of 316L stainless steel parts*, Materials and Design, Vol. 100, pp. 291-299, 2016.

[Wang 2018] Y. M. Wang, T. Voisin, J. T. McKeown, J. Ye, N. P. Calta, Z. Li, Z. Zeng, Y. Zhang, W. Chen, T. T. Roehling, R. T. Ott, M. K. Santala, P. J. Depond, M. J. Matthews, A. V. Hamza and T. Zhu, *Additively manufactured hierarchical stainless steels with high strength and ductility*, Nature Materials, Vol. 17, 2018.

[Wang 2019] L. Wang, K. Wang, *Investigation on microstructural patterns and hot crack in the molten pool via integrated finite-element and phase-field modeling*, Journal of Manufacturing Processes, Vol. 48, pp. 191-198, 2019.

[Winston 2005] R. Winston, J. C. Miñano, P. Benitez, *Some basic ideas in geometrical optics*, Chapter 2 of Nonimaging Optics, 2005.

[Yadroitsev 2010] I. Yadroitsev, A. Gusarov, I. Yadroitsava, I. Smurov, *Single track formation in selective laser melting of metal powders*, Journal of Materials Processing Technology, pp. 1624-1631, 2010.

[Yadroitsev 2013] I. Yadroitsev, P. Bertrand, G. Antonenkova, S. Grigoriev, I. Smurov, *Use of track/layer morphology to develop functional parts by selective laser melting*, Journal of Laser Applications, Vol. 25, 2013.

[Yasa 2011] E. Yasa, J. P Kruth, *Microstructural investigation of Selective Laser Melting 316L stainless steel parts exposed to laser re-melting*, Procedia Engineering, Vol. 19, pp. 389 – 395. 2011

[Yang 2018a] Y. Yang, M. F. Knol, F. V. Keulen, C. Ayas, *Laser energy absorption behavior of powder particles using ray tracing method during selective laser melting additive manufacturing of aluminum alloy*, Materials and design, Vol. 143, pp. 12-19, 2018.

[Yang 2018b] Y. Yang, D. Gu, D. Dai, C. Ma, *A semi-analytical thermal modelling approach for selective laser melting,* Additive Manufacturing, Vol. 21, pp. 284-297, 2018.

[Yin 2011] H. Yin, S. D. Felicelli, L. Wang, *Simulation of a dendritic microstructure with the lattice Boltzmann and cellular automaton methods*, Acta Materialia, Vol. 59, pp. 3124-3136, 2011.

[Yin 2019] J. Yin, L. Yang, X. Yang, H. Zhu, D. Wang, L. Ke, Z. Wang, G. Wang, X. Zeng, *High-Power laser-matter interaction during laser powder bed fusion*, Additive Manufacturing, Vol. 29, 2019.

[Zhang 2013] B. Zhang, L. Dembinski, C. Coddet, *The study of the laser parameters and environment variables effect on mechanical properties of high compact parts elaborated by selective laser melting 316L powder*, Materials Science & Engineering A, Vol. 584, pp. 21-31, 2013.

[Zhang 2016] J. Zhang, F. Liou, W. Seufzer, K. Taminger, *A coupled finite element cellular automaton model to predict thermalhistory and grain morphology of Ti-6Al-4V during direct metaldeposition (DMD),* Additive Manufacturing, Vol. 11, pp. 32-39, 2016.

[Zhang 2018] Y. Zhang, G. Guillemot, M. Bernacki, M. Bellet, *Macroscopic thermal finite element modeling of additive metal manufacturing by selective laser melting process*, Computational Methods in Applied mechanics and Engineering, Vol. 331, pp. 541-535, 2018.

[Zhang 2019a] Y. Zhang, X. Xiao, J. Zhang, *Kinetic Monte Carlo simulation of sintering behavior of additively manufactured stainless steel powder particles using reconstructed microstructures from synchrotron X-ray micro tomography*, Results in Physics, Vol. 13, 2019.

[Zhang 2019b] Z. Zhang, Y. Huang, A. R. Kasinathan, S. I. Shahabad, U. Ali, Y. Mahmoodkhani, E. Toyserkani*, 3-Dimensional heat transfer modeling for laser powder-bed fusion additive manufacturing with volumetric heat sources based on varied thermal conductivity and absorptivity*, Optics & Laser Technology, Vol. 109, pp. 297-312, 2019.

[Zhang 2019c] Z. Zhang, Z. J. Tan, X. X. Yao, C. P. Hu , P. Ge, Z. Y. Wan, J. Y. Li, Q. Wu, *Numerical methods for microstructural evolutions in laser additive manufacturing*, Computers and Mathematics with Applications, Vol. 78, pp. 2296-2307, 2019.

[Zhong 2015] Y. Zhong, L. Liu, S. Wikman, D. Cui, Z. Shen, *Intragranular cellular segregation network structure strengthening 316L stainless steel prepared by selective laser melting*, Journal Of Nuclear Materials, 2015.

[Zinoviev 2016] A. Zinoviev, O. Zinovieva, V. Ploshikhin, V. Romanova, R. Balokhonov *Evolution of grain structure during laser additive manufacturing. Simulation by a cellular automata method*, Materials And Desgin, Vol. 106, pp. 312-329, 2016.

[Zinovieva 2019] O. Zinovieva, A. Zinoviev, *Numerical analysis of the grain morphology and texture in 316L steel produced by selective laser melting*, AIP Conference Proceedings, 2019.

Prédiction des structures de grains d'un composant en acier 316L élaboré par fabrication additive fusion laser sur lit de poudre

Résumé : Les potentialités de la fabrication additive (FA) sont en cours d'étude au Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA). En particulier, la possibilité de réaliser par fusion laser sur lit de poudre des composants en acier austénitique utilisés pour des applications nucléaires est étudiée. Il a été constaté que les métaux issus du procédé fusion laser sur lit de poudre (*Laser Beam Melting* – LBM) présentaient généralement une anisotropie de leurs propriétés mécaniques, provenant principalement des caractéristiques des structures de solidification (morphologie, taille, orientation et texture cristallographique des grains), elles-mêmes dépendantes des paramètres opératoires. Dans ce contexte, la formation des structures de grains de géométries monocordons en acier inoxydable 316L est étudiée, notamment afin d'appréhender les phénomènes régissant la solidification. Pour cela, une approche couplant essais expérimentaux, modélisation et simulations numériques est adoptée. Deux campagnes d'essais ont été effectuées. Au cours de la première des cordons monocouches ont été réalisés avec instrumentation optique grâce à l'utilisation d'une caméra rapide, ce qui nous a permis d'observer la formation et l'évolution du bain au cours de la fabrication. Lors de la seconde campagne, des pièces monocordons à section carrée, formées par la superposition d'un grand nombre de couches ont été réalisées afin d'appréhender le comportement des grains dans le cas de multiples cycles de fusion-solidification. La caractérisation métallurgique des grains présents dans les différentes maquettes combinée aux vidéos de bain enregistrées au cours des essais nous ont permis de recueillir les caractéristiques morphologiques et cristallographiques des structures de grains formées ainsi que celles du bain de fusion. Par ailleurs, plusieurs combinaisons de paramètres opératoires ayant été testées au cours des essais, les liens entre paramètres opératoires, mécanismes de transfert de chaleur et structure granulaire formée ont pu être appréhendés. Suite à cela, un modèle numérique de prédiction des structures de grains a été mis en place et développé, intégrant les principaux phénomènes physiques identifiés au cours de l'étude expérimentale. Ce modèle est basé sur un chainage entre un modèle thermique du procédé utilisant la méthode Eléments Finis (EF), et un modèle de formation des grains employant la méthode automate cellulaire (AC). On parle de modèle « CAFE ». Le modèle EF choisi est purement conductif. Il a été défini à l'aide des essais instrumentés et ajusté grâce aux dimensions et à la géométrie des zones fondues expérimentales. Les simulations « CAFE » ont permis de prédire les structures de grains formées dans les géométries monocordons. Enfin des comparaisons entre résultats expérimentaux et simulés ont été effectuées, et les résultats numériques discutés en lien avec le modèle de croissance et les paramètres opératoires appliqués.

Mots clés : Fabrication Additive (FA), fusion laser sur lit de poudre, modèle CAFE, acier 316L, solidification, structure de grains.

Numerical prediction of grain structure formation in a 316L stainless steel component obtained by laser powder beam fusion

Abstract : The French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA) is currently estimating the potential of Additive Manufacturing (AM) processes. Especially, the construction of stainless steel components used in nuclear applications using the Laser Beam Melting (LBM) technology is evaluated. An anisotropic mechanical behaviour is frequently observed in parts manufactured by LBM, directly linked to the component's grain structure characteristics, themselves dependant on the process parameters. In this context, the formation of grain structure during the construction by LBM of 316L stainless steel melt run geometries has been investigated, in particular to comprehend the phenomenon involved during solidification. For that purpose, an approach combining experiments, and numerical modelling and simulations is adopted. Two experimental campaigns were held. The first one consisted in building single-layer tracks and melt-runs on an instrumented LBM bench that enables the observation of the formation and evolution of the melt pool during the process. The second campaign consisted in building geometries composed of multi-layers melt-runs, in order to study the grains behaviour while undergoing fusion-solidification cycles. The metallographic characterisation of the produced samples combined to the high-speed camera recordings during the tests allowed determining grains characteristics and melt-pool sizes and geometries. Besides, because several values of process parameters had been used, the relations between operating parameters, heat transfer mechanisms and generated grain structure are studied. After that, a numerical grain structure formation modelling has been implemented and developed, incorporating the main physical phenomenon identified during the experimental investigations. The numerical modelling is based on a three-dimensional "CAFE" model, which couples Cellular Automata (CA) and Finite Elements (FE) simulations. The thermal model defined is conductive. It has been calibrated from the instrumented experiments and validated comparing the size and shape of the numerical and experimental molten zones. Finally, numerical grain characteristics resulting from the simulations are compared to the experimental ones, and numerical results are discussed with regards to the growth models and the process parameters chosen.

Keywords : Additive Manufacturing (AM), Laser Powder Bed Fusion (LPBF), CAFE model, 316L stainless steel, solidification, grain structure.