Région Hauts-de-France

Université de Lille

Université de Lille

École doctorale : **ENGSYS**

Unité de recherche : **Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle (LaMcube) - UMR 9013**

Thèse présentée par **Victor Lalleman**

En vue de l'obtention du grade de docteur de l'Université de Lille

Spécialité : **Mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces**

Modélisation multi-échelle de la plasticité et des interactions de frottement dans les assemblages ferroviaires essieu-roue

Soutenue le 28 Novembre 2024 devant le jury d'examen :

Présidente	Shabnam ARBAB CHIRANI, Professeure à l'ENSTA Bretagne
Rapporteur	Guilhem MOLLON, Maître de conférences HDR à l'INSA Lyon
Rapporteur	Robin BOUCLIER, Professeur à l'INSA Toulouse
Examinateur	Olivier ALLIX, Professeur à l'ENS Paris-Saclay
Invité	Philippe DUFRENOY, Professeur à Polytech'Lille
Invité	Omar BETTINOTTI, SIMULIA Technology Senior Manager
Directeur de thèse	Vincent MAGNIER, Maître de conférences HDR à Polytech'Lille
Co-directeur de thèse	Pierre GOSSELET, Directeur de recherche au CNRS
Encadrant de thèse	Cédric HUBERT, Maître de conférences à l'INSA HdF, UPHF
Encadrant de thèse	Stéphane SALENGRO, Responsable pôle R&D à Valdunes Industries

Cette thèse a été préparée au

Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle (LaMcube) UMR 9013

Bâtiment ESPRIT, Cité Scientifique,
Boulevard Paul Langevin
59655 Villeneuve d'Ascq
France

☎ (33)(0)3 20 33 71 74
Site https://lamcube.univ-lille.fr/



Modélisation multi-échelle de la plasticité et des interactions de frottement dans les assemblages ferroviaires essieu-roue

Résumé

Cette thèse propose une approche multi-échelle pour modéliser les phénomènes mécaniques dans les assemblages ferroviaires en vue de leur dimensionnement. L'étude se concentre sur deux aspects principaux : l'influence des défauts de surface sur le comportement mécanique lors du calage des roues sur les essieux, et l'impact du gradient de microstructure induit par le processus de forgeage sur la durée de vie en fatigue des essieux. Dans une première partie, un modèle numérique est développé pour simuler les interactions de frottement entre deux surfaces rugueuses, en tenant compte de l'usure progressive pendant le processus de calage. Cette approche est basée sur une modélisation par éléments discrets couplée à de l'IA, permettant de représenter fidèlement les effets de surface sur la tenue mécanique. La seconde partie intègre les effets du gradient de microstructure dans le calcul à l'aide d'une technique de couplage global-local. Cet historique engendre un état de précontrainte et déformation plastique susceptible d'affecter la tenue en fatigue de l'essieu monté sous chargement de flexion rotative, en particulier à cause du fretting aux bords des portées de calage. En combinant ces deux approches, cette thèse propose un modèle multi-échelle amélioré, visant à mieux comprendre et prédire la durée de vie des essieux montés. Une grandeur d'intérêt en vue du dimensionnement est le cycle élastoplastique stabilisé pour l'estimation duquel une association originale du couplage global-local et de la méthode cyclique directe est proposée.

Mots clés : frottement multi-échelle, cosimulation, plasticité, microstructure

Abstract

This thesis proposes a multi-scale approach to modeling mechanical phenomena in railway assemblies with a view to their dimensioning. The study focuses on two main aspects: the influence of surface defects on the mechanical behavior of wheelsets, and the impact of the microstructure gradient induced by the forging process on the fatigue life of axles. In the first part, a numerical model is developed to simulate frictional interactions between two rough surfaces, taking into account progressive wear during the assembly process. This approach is based on discrete-element modeling coupled with AI, enabling surface effects on mechanical strength to be faithfully represented. The second part integrates the effects of the microstructure gradient into the calculation using a global-local coupling technique. This history generates a state of prestress and plastic deformation likely to affect the fatigue life of the axle under rotary bending loading, in particular due to fretting at the edges of the wedge spans. By combining these two approaches, this thesis proposes an improved multi-scale model, aimed at better understanding and predicting the service life of axles. The stabilized elastoplastic cycle is of particular interest for design purposes, and an original combination of global-local coupling and the direct cyclic method is proposed for its estimation.

Keywords: multi-scale friction, cosimulation, plasticity, microstructure

Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle (LaMcube) UMR 9013
Bâtiment ESPRIT, Cité Scientifique, – Boulevard Paul Langevin – 59655 Villeneuve d'Ascq – France

Remerciements

Tout d'abord, je remercie l'Université de Lille, la région Hauts-de-France et l'entreprise MG-Valdunes qui ont financé cette thèse.

Ensuite, je souhaite remercier grandement mon directeur de thèse, Vincent Magnier. L'avoir en tant qu'enseignant pendant mes études en école d'ingénieur était déjà un grand plaisir, et celui-ci a pu être prolongé à travers la thèse. Son mentorat, sa vision de la recherche et sa volonté à toujours aller plus loin dans la découverte et l'interprétation ont permis de cultiver en moi une passion pour le domaine de la recherche. Enfin, sa capacité à toujours relativiser et à trouver une solution en quelques secondes ont permis à plusieurs reprises de débloquer la situation.

Un immense merci également à mon co-directeur de thèse, Pierre Gosselet, dont la gentillesse, la patience et les compétences scientifiques et informatiques n'ont d'égal que son amour pour le café. Sans sa motivation et son acharnement pour trouver une solution à tout problème, tout cela n'aurait pas été possible. Ses multiples interventions ont définitivement permis la réussite de cette thèse, que ce soit à travers l'idée même du couplage global/local, l'installation des multiples logiciels de calculs, ou encore la mise en place des machines virtuelles pour la création de la base de données de l'IA.

Pour finir sur l'équipe encadrante, je remercie également grandement mon co-encadrant Cédric Hubert, qui a supervisé toute la partie simulation par éléments discrets. Rares étaient les jours où je ne l'ai pas contacté au moment où je travaillais sur cette partie, pour lui demander un conseil, un avis ou même de l'aide. Et c'est toujours rapidement et avec patience, pédagogie et précision qu'il répondait et me permettait de progresser.

Je tiens également à remercier toute personne qui a participé de près ou de loin à l'accomplissement de cette thèse, avec entre autres : Philippe Dufrenoy, directeur du Swit'Lab, pour son soutien, sa disponibilité et sa vision inspirante ; Stéphane Salengro pour sa supervision côté Valdunes et le partage des informations nécessaires à la réalisation de cette thèse ; Omar Bettinotti et Stéphane

Guinard pour avoir fourni les fichiers nécessaires à la co-simulation et pour leurs précieux conseils.

Un grand merci aux rapporteurs, Guilhem Mollon et Robin Bouclier, pour le temps qu'ils ont consacré à l'évaluation minutieuse de mon travail. Leurs observations pertinentes et leurs retours constructifs m'ont permis d'améliorer la qualité de ce manuscrit et d'approfondir certaines réflexions.

Je remercie sincèrement les examinateurs, Shabnam Arbab Chirani et Olivier Allix, pour leur participation à la soutenance et pour les échanges enrichissants qui ont eu lieu à cette occasion. Leurs questions et remarques m'ont permis de mettre en perpective mes travaux et d'élargir ma vision sur les thématiques abordées. Je leur suis reconnaissant pour leur bienveillance et l'intérêt qu'ils ont porté à cette recherche.

Je remercie également le personnel administratif du laboratoire, Jean-Baptiste Colliat, Nathalie Labaeye et Baptiste Vanderpert pour leur accueil chaleureux.

Mes sincères remerciements à tous mes collègues et amis (Nikzad, Valentin, Mathis, Morgane, Michel, Eddy, Lucas, Sophie, Guillaume, Adil et Quentin pour n'en citer que quelques uns). Que ce soit à travers nos discussions, nos rigolades, les parties de tarot, les séances d'escalades, les escape games et bien d'autres encore, c'est grâce à vous tous que j'ai autant apprécié ce temps passé au laboratoire. Vous avez rendu ces 3 dernières années inoubliables et je ne vous en remercierai jamais assez.

Je souhaite ensuite exprimer ma profonde gratitude à l'ensemble de ma famille, et en particulier à mes parents, mes soeurs et mon frère pour leur amour inconditionnel, leur soutien émotionnel, et pour avoir toujours cru en moi. Tous autant que vous êtes, vous avez été une source de motivation et d'encouragements pour moi, et c'est grâce à vous que je suis parvenu à affronter toutes les difficultés.

Et enfin, en dernier mais clairement pas des moindres, mes profonds remerciements à ma supportrice numéro un, ma conjointe Anaïs, pour tout l'amour qu'elle me donne chaque jour, pour ses encouragements et pour sa capacité à me remotiver même dans les moments les plus difficiles. Je profite alors de ce moment pour lui présenter mes excuses pour les nombreuses soirées qui ont été sacrifiées pour travailler, et lui promet de prendre plus de temps pour nous deux par la suite.

Sommaire

Résumé **v**

Remerciements **vii**

Sommaire **ix**

Liste des tableaux **xiii**

Table des figures **xv**

Introduction générale **1**

1 Mise en contexte et état de l'art **5**
1.1 Projet Swit'Lab 7
1.1.1 Essieu-axe 7
1.1.2 Fretting-fatigue 9
1.1.3 Microstructure de l'essieu 10
1.1.4 Vers la conception du jumeau numérique 11
1.2 Détermination du coefficient de frottement 14
1.2.1 Définition 14
1.2.2 Méthode des éléments discrets 17
1.2.3 GranOO 19
1.3 Intelligence artificielle 19
1.3.1 Présentation générale de l'IA 20
1.3.2 Architecture d'une IA de type Deep Learning 21
1.3.3 Validation du modèle 24
1.3.4 Convolution 26
1.4 Méthode de couplage local/global 27
1.4.1 Présentation générale de la méthode 27
1.4.2 Description de la méthode 29
1.5 Méthodologie globale 30

2 Modélisation multi-échelle du frottement **33**
2.1 Échelle macroscopique 36
2.2 Echelle mésoscopique 39
2.2.1 Génération des surfaces rugueuses 39
2.2.2 Calibration des paramètres microscopiques 41
2.2.3 Adaptation des conditions limites 45
2.2.4 Modélisation de l'usure 49
2.2.5 Post-traitement 49
2.3 Influence de la rugosité 51
2.4 Conclusions 52

3 Généralisation des résultats **53**
3.1 Prédiction du coefficient de frottement 55
3.1.1 Premier modèle : prédiction directe du frottement 55
3.1.2 Deuxième modèle : prédiction des efforts à partir des surfaces 62
3.1.3 Troisième modèle : prédiction à partir des vecteurs normaux de contact 65
3.2 Intégration dans le modèle éléments finis 72
3.2.1 Influence du coefficient de frottement microscopique . . . 73
3.2.2 Influence des surfaces en contact 75
3.2.3 Influence de l'usure 77
3.3 Conclusions 83

4 Prise en compte du gradient de microstructure **85**
4.1 Modélisation de la microstructure 87
4.1.1 Choix du modèle local 87
4.1.2 Définition du domaine 90
4.1.3 Création du gradient de microstructure 91
4.1.4 Génération du modèle 3D 97
4.1.5 Définition de la limite élastique selon la loi de Hall-Petch 99
4.2 Couplage global/local 99
4.2.1 Présentation de la méthode 99
4.2.2 Application au système essieu-roue 106
4.3 Conclusions 114

5 Application **115**
5.1 Co-simulation séquentielle complète 117
5.1.1 Adaptation de la méthode d'intégration des coefficients de frottement dans le cas 3D 118
5.1.2 Résultats de l'opération de calage 121
5.1.3 Résultat de l'opération de flexion rotative 125

5.2 Recherche du cycle limite 128
5.2.1 Méthodes numériques 129
5.2.2 Développement d'une méthode de couplage global/local pour une analyse directe cyclique 131
5.2.3 Application au système essieu-roue 140
5.3 Conclusion 146

Perspectives **149**

Bibliographie **151**

A Définition des domaines locaux **159**
A.1 Domaine A 160
A.2 Domaine B 161

Liste des tableaux

2.1 Paramètres matériaux identifiés pour l'acier EA1N, selon Hendrycks 38
2.2 Paramètres matériaux identifiés pour l'acier ER7, selon Langueh 39
2.3 Influence du coefficient de Poisson microscopique ν_μ sur les paramètres macroscopiques 43

3.1 Paramètres du modèle IA 67
3.2 Description de l'architecte du modèle IA 68
3.3 Métriques sur la qualité des prédictions (troisième modèle) . . 71

4.1 Temps nécessaire pour la résolution pour les méthodes direct, *1-way* et *2-way* 106
4.2 Chaîne numérique pour le modèle calage + flexion rotative . . 107

5.1 Définition des variables pour le cas test 136

A.1 Position des points délimitant la région 1 du domaine A 160
A.2 Position des points délimitant la région 2 du domaine A 161
A.3 Position des points délimitant le domaine B 161

Table des figures

1.1 MG-Valdunes, site de Valenciennes 7
1.2 Schéma d'un bogie de train selon Baudoin, 2015 8
1.3 Schéma d'un essieu selon Yameogo, 2004 8
1.4 Fissure sur le bord de la portée de calage. Longueur : 35 mm . 9
1.5 Microstructure de l'EA1N à différentes profondeurs, état forgé 10
1.6 Maillage 2D du système Essieu + Roue 12
1.7 Courbe (noire) de calage d'une roue sur l'essieu-axe et enveloppe normative selon Hendrycks, 2023 13
1.8 Prédictions de l'effort fourni par la presse pour le coefficient de frottement μ dans $[0\ ;\ 0.1]$ selon Hendrycks 13
1.9 Modèle éléments finis de la sollicitation cyclique de l'essieu . . 14
1.10 Représentation de la liaison cohésive entre deux éléments discrets selon André et al., 2012 18
1.11 Réseau de neurones artificiels 22
1.12 Représentation de l'*underfitting*, du *good fitting* et de l'*overfitting* (de gauche à droite) via les prédictions 25
1.13 Illustration du gradient de microstructure et des contraintes résiduelles dans l'essieu, selon Baudoin 27
1.14 Illustration des modèles global et local (Allix et Gosselet, 2020) 28
1.15 Comparaison *1-way* et *2-way* 29

2.1 Méthodologie pour la prise en compte de la rugosité 35
2.2 Modèle éléments finis de l'opération de calage de la roue sur l'essieu 36
2.3 Représentation de l'écrouissage (a) cinématique et (b) isotrope en traction-compression dans l'espace des contraintes, selon Hendrycks 37
2.4 Exemple de maillage surfacique par l'algorithme *Diamond-Square* et domaine compact associé. Dimensions du domaine : 2mm x 1mm x 0.4mm 39
2.5 Étapes de l'algorithme *Diamond-Square* 40

2.6 Exemples de maillage surfacique. Gauche : n = 5 | Droite : n = 3 41
2.7 Influence du coefficient de Poisson microscopique ν_μ sur les paramètres macroscopiques 43
2.8 Influence des paramètres microscopiques sur les paramètres macroscopiques 44
2.9 Nouveaux domaines (ajout d'éléments) 46
2.10 Analogie entre domaine réel et domaine éléments discrets . . . 47
2.11 Évolution des efforts normal et tangentiel, et du coefficient de frottement global 50
2.12 Évolution du coefficient de frottement au cours du glissement pour 3 modèles différents 51

3.1 Reconstruction d'une surface via interpolation (visualisation en 3D à gauche et en 2D à droite) 57
3.2 Architecture du modèle IA 59
3.3 Évolution du *loss* pendant l'apprentissage (Modèle 1) 61
3.4 Prédiction du coefficient de frottement (Modèle 1) 61
3.5 Évolution du *loss* pendant l'apprentissage (Modèle 2) 63
3.6 Prédiction de l'effort normal (Modèle 2) 63
3.7 Prédiction de l'effort tangentiel (Modèle 2) 64
3.8 Comparaison surface réelle et surface interpolée 65
3.9 Visualisation des vecteurs normaux des contacts (côté roue) . . 66
3.10 Schématisation du troisième modèle de régression 67
3.11 Évolution du *loss* pendant l'apprentissage 69
3.12 Comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles de coefficient de frottement (normalisé) 69
3.13 Comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles de coefficient de frottement 70
3.14 Schématisation de l'intégration des coefficients de frottements dans le modèle éléments finis 73
3.15 Evolution de l'effort tangentiel 74
3.16 Champ de contrainte dans la roue et l'essieu a) Coefficient de frottement uniforme b) Coefficient de frottement enrichi 75
3.17 Zoom sur le chanfrein 75
3.18 Évolution de l'effort tangentiel 76
3.19 Champ de contrainte dans la roue et l'essieu 76
3.20 Définition du scénario pour l'évolution de la rugosité de la roue 78
3.21 Coefficients de frottements générés via l'intelligence artificielle 79
3.22 Loi d'évolution du facteur de Coulomb en fonction de la pression de contact, selon Hendrycks 80

3.23 Effort de calage calculé avec μ fonction de la pression de contact, selon Hendrycks 80
3.24 Effort de calage et coefficient de frottement global calculés avec μ déterminé par la DEM 81
3.25 Visualisation du champ de contrainte dans la système essieu/roue dans le modèle de Hendrycks (gauche) et le modèle enrichi (droite) 82
3.26 Visualisation de la plasticité au sein de l'essieu dans le modèle de Hendrycks (gauche) et le modèle enrichi (droite) 82

4.1 Méthodologie pour la prise en compte de la microstructure . . 87
4.2 Zoom sur le bord de la portée de calage (2D) 88
4.3 Zoom sur le bord de la portée de calage (3D) 89
4.4 Exemple de domaine A (avec et sans congé de raccordement) et B en 3D avec 100 grains 91
4.5 Génération de gradients de microstructure numériques selon Baudoin 92
4.6 Évolution de la taille de grains dans le domaine 94
4.7 Visualisation 3D du plan P 95
4.8 Evolution de la taille de grains dans le chanfrein du domaine A 96
4.9 Tessellation 3D des domaines A (gauche) et B (droite) 98
4.10 Maillage 3D des domaines A et B obtenus avec Neper 98
4.11 Exemple d'application du couplage global/local : Traction sur une plaque trouée 101
4.12 Comparaison des résultats sur la contrainte issus du modèle direct et du couplage global/local en *1-way* (submodel) 105
4.13 Comparaison des résultats sur la contrainte issus du modèle direct et du couplage global/local en *2-way* 105
4.14 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue) 108
4.15 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue) 109
4.16 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après calage de la roue) 109
4.17 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après calage de la roue) 110

4.18 Comparaison des champs de contraintes entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative) 111
4.19 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative) 111
4.20 Comparaison des champs de contraintes entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion rotative) 112
4.21 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion rotative) 112
4.22 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative) - modification de l'échelle du modèle couplé 113

5.1 Résumé de l'enrichissement du modèle de calage à travers la DEM et l'IA 119
5.2 Visualisation des surfaces cylindriques créés pour l'intégration des coefficients de frottement 120
5.3 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue) 122
5.4 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue) 122
5.5 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après calage de la roue) 123
5.6 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début fin de portée (après calage de la roue) 123
5.7 Évolution de l'effort de calage en fonction du déplacement de la roue, pour le modèle initial et les modèles couplés 124
5.8 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion) 125
5.9 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion) 126

5.10 Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion) 127
5.11 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion) 127
5.12 États limites sous chargement cyclique (Maitournam, 2002 . . 129
5.13 Schématisation du fonctionnement de la méthode de couplage 132
5.14 Evolution du résidu maximal pendant le couplage avec et sans relaxation 137
5.15 Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python 138
5.16 Comparaison de la plasticité entre le modèle direct et le modèle couplé via python 138
5.17 Comparaison du champ de contrainte dans la plaque trouée entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA) 139
5.18 Comparaison du champ de déformation plastique dans la plaque trouée entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA) 140
5.19 Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté congé 141
5.20 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté congé 141
5.21 Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté chanfrein . . 142
5.22 Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté chanfrein 142
5.23 Comparaison du champ de contrainte entre les modèles couplés via python (DCA en *1-way* à gauche, DCA en *2-way* à droite) - côté chanfrein 143
5.24 Comparaison du champ de déformation plastique entre les modèles couplés via python (DCA en *1-way* à gauche, DCA en *2-way* à droite) - côté chanfrein 144
5.25 Cartographie de l'indice de Dang-Van - modèle initial (sans microstructure) 145
5.26 Cartographie de l'indice de Dang-Van - modèle local (avec microstructure) 145

A.1 Définition des domaines A (gauche) et B (droite) pour la génération des microstructures 160

Introduction générale

Aujourd'hui, les essieux ferroviaires, éléments centraux des trains à grande vitesse, sont soumis à des sollicitations mécaniques extrêmes, avec des millions de cycles de chargement au cours de leur vie. Cela nécessite une maîtrise accrue des phénomènes mécaniques qui influencent leur résistance à la fatigue et leur fiabilité en service. L'objectif industriel est clair : réduire les défaillances, améliorer les performances mécaniques des assemblages essieu-roue, et prolonger la durée de vie des composants pour limiter les interventions coûteuses de maintenance. Jusqu'à présent, le dimensionnement de ces assemblages reposait essentiellement sur l'expérience pratique, mais cette approche se révèle de plus en plus insuffisante face aux besoins croissants. Le développement de modèles numériques avancés est donc devenu indispensable pour répondre à ces attentes.

Dans ce cadre, cette thèse s'inscrit au sein du projet SWIT'LAB (Science for WheelsetInnovative Technology), découlant de l'association du Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle avec l'entreprise Valdunes Industries (anciennement MG-Valdunes), spécialisée dans la conception et la fabrication d'organes de roulements ferroviaires, et le Laboratoire d'Automatique de Mécanique et d'Informatique industrielles et Humaines. Les deux grandes problématiques du projet portent sur la modification et l'amélioration des procédés de fabrication des essieux ferroviaires, dans un but de réduire la matière, et d'augmenter la durée de vie des pièces.

Dans ce contexte, un premier modèle éléments finis a été mis en place pour simuler le calage des roues sur les essieux et les sollicitations cycliques [Hendrycks, 2023 ; Saad, 2016]. Cependant, ce modèle ne permet pas encore d'intégrer certaines réalités industrielles cruciales telles que les effets de sur-

face (rugosité et usure) et les gradients de microstructure liés aux procédés de fabrication, deux facteurs qui influencent directement la tenue en fatigue des essieux. Ce modèle a permis d'avoir une meilleure compréhension des phénomènes macroscopiques ayant lieu pendant l'opération de calage, avec entres autres l'apparition d'un champ de contraintes résiduelles, et les conséquences de celle-ci sur la tenue en fatigue de l'essieu lors des sollicitations cycliques. L'objectif est maintenant d'enrichir ce modèle au travers le multi-échelle sur deux aspects.

D'une part, la prise en compte de l'évolution des surfaces de contact au cours de l'assemblage, en intégrant des approches tribologiques fines via la méthode des éléments discrets (DEM), afin de mieux représenter les interactions entre les surfaces rugueuses et de simuler l'usure progressive. D'autre part, l'intégration du gradient de microstructure généré lors du processus de forgeage de l'essieu, qui est cruciale pour estimer de manière réaliste les contraintes internes et leur impact sur la durée de vie. Ces deux aspects essentiels sont ainsi à prendre dans le modèle déjà développé. L'objectif de cette thèse est donc de développer un modèle multi-échelle simulant l'opération de calage et les sollicitations cycliques (échelle macroscopique), prenant en compte l'évolution de la rugosité des surfaces de contact lors de l'assemblage (échelle mésoscopique) et le gradient de microstructure au sein de l'essieu (échelle microscopique).

Le premier chapitre s'attache à détailler le contexte dans lequel se déroule la thèse, l'objet de l'étude, la problématique qui se dessine derrière la nécessité de prendre en compte la rugosité des surfaces en contact et la microstructure au sein du simulation numérique, et donne quelques explications concernant les différents outils utilisés durant ces travaux avant de définir la méthodologie globale de cette thèse.

Le deuxième chapitre détaille la première partie du modèle de Hendrycks qui consiste à simuler l'opération de calage, et propose une méthode pour y ajouter l'impact des rugosités des surfaces en contact. Celles-ci sont traduites sous la forme d'un coefficient de frottement évolutif au cours du calage, nécessitant ainsi une calibration. Pour cela, une nouvelle modélisation de l'opération de calage à une échelle plus locale est réalisée à l'aide de la méthode des éléments

discrets. Cette dernière permet premièrement de générer des surfaces avec une topologie aléatoire mais ayant des caractéristiques similaires à celles obtenues expérimentalement, puis d'utiliser ces domaines discrets pour modéliser le frottement entre deux surfaces rugueuses et évaluer le coefficient de frottement résultant de l'interaction de ces deux surfaces.

Le troisième chapitre porte sur le développement de plusieurs modèles d'intelligence artificielle pour la généralisation des résultats issus du modèle éléments discrets. En effet, étant donné la grande diversité de défauts et le temps de calcul relativement élevé, plusieurs modèles IA sont développés et étudiés pour parvenir à outrepasser ce coût computationnel et temporel en prédisant le coefficient de frottement à partir de deux topologies. Enfin, les résultats obtenus avec la DEM et généralisé avec l'IA sont introduits dans le modèle FEM pour obtenir un modèle enrichi.

Le chapitre quatre présente la seconde partie du modèle de Hendrycks, qui modélise la sollicitation cyclique de l'essieu, avant d'y intégrer le gradient de microstructure. Cette dernière est modélisée à partir des observations de Baudoin et Yameogo, et à l'aide du logiciel Neper. Les propriétés des matériaux sont ensuite définies à l'aide de la loi de Hall-Petch. En raison de la taille relativement petite des grains et donc des éléments finis modélisant la microstructure, la modélisation se concentre sur les zones les plus critiques qui sont les extrémités de la portée de calage de l'essieu. Enfin, pour prendre en compte cette microstructure dans le modèle éléments finis et passer outre le problème d'incompatibilité de maillage entre les zones où le matériau est homogène (permettant d'avoir un maillage grossier), et les zones modélisant le gradient de microstructure (ce qui engendre une taille d'élément très fine), une technique de couplage global/local est présentée, puis appliqué à notre problématique.

Enfin, le dernier chapitre regroupe les outils développés dans les parties précédentes (prise en compte de la rugosité des surfaces en contact pendant le calage avec la DEM et l'IA + modélisation du gradient de microstructure dans les extrémités de la portée de calage de l'essieu) pour obtenir un modèle multi-échelle et plus réaliste. Étant donné le grand nombre de cycles pour atteindre l'état stabilisé et le coût computationnel et temporel élevé, une méthode directe

cyclique est appliqué à notre modèle pour obtenir directement le cycle limite. Le développement d'une nouvelle méthode de couplage est alors nécessaire pour permettre son utilisation avec une analyse directe cyclique.

Chapitre 1

Mise en contexte et état de l'art

Sommaire du présent chapitre

1.1 Projet Swit'Lab **7**
- 1.1.1 Essieu-axe . . . 7
- 1.1.2 Fretting-fatigue . . . 9
- 1.1.3 Microstructure de l'essieu . . . 10
- 1.1.4 Vers la conception du jumeau numérique . . . 11

1.2 Détermination du coefficient de frottement **14**
- 1.2.1 Définition . . . 14
- 1.2.2 Méthode des éléments discrets . . . 17
- 1.2.3 GranOO . . . 19

1.3 Intelligence artificielle **19**
- 1.3.1 Présentation générale de l'IA . . . 20
- 1.3.2 Architecture d'une IA de type Deep Learning . . . 21
- 1.3.3 Validation du modèle . . . 24
- 1.3.4 Convolution . . . 26

1.4 Méthode de couplage local/global **27**
- 1.4.1 Présentation générale de la méthode . . . 27
- 1.4.2 Description de la méthode . . . 29

1.5 Méthodologie globale **30**

1.1 Projet Swit'Lab

1.1.1 Essieu-axe

Cette thèse découle de l'association entre l'Université de Lille, l'Université Polytechnique Hauts-de-France et la société MG-Valdunes (cf figure 1.1) pour la création d'un laboratoire de recherche commun spécialisé dans le développement des organes de roulement. La société Valdunes est responsable de la fabrication des essieux examinés dans le projet "Swit'Lab", et occupe la position de premier producteur européen d'essieux-axes pour les applications ferroviaires.



FIGURE 1.1 – MG-Valdunes, site de Valenciennes

Les TGV en France utilisent des bogies pour supporter leur structure. Ces bogies se placent entre les voitures consécutives, renforçant ainsi la solidité du convoi. Chaque bogie est équipé de deux essieux-axes. Lorsque ces essieux sont équipés de leurs composants de roulement tels que les roues, les disques de frein et les boîtes d'essieu, on les désigne comme des essieux montés. Les roues et les disques de frein sont fixés à l'essieu par frettage à l'aide d'une presse, et les bogies reposent sur les fusées, comme illustré sur les figures 1.2 et 1.3.

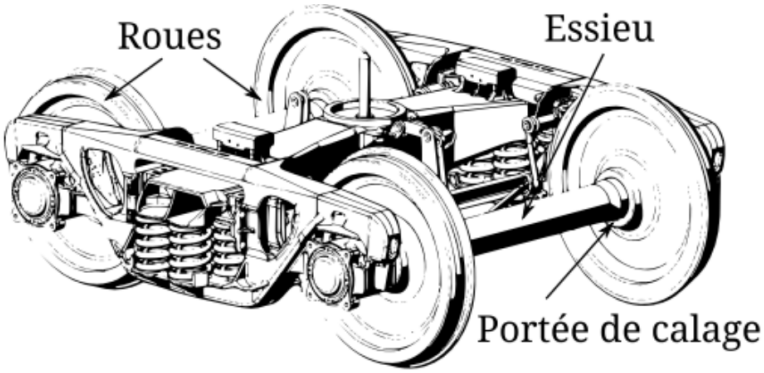


FIGURE 1.2 – Schéma d'un bogie de train selon BAUDOIN, 2015

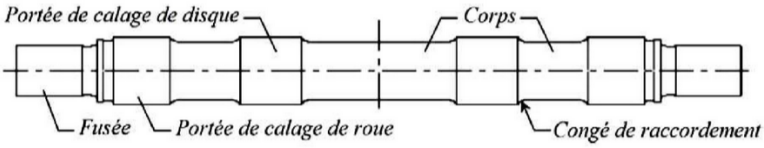


FIGURE 1.3 – Schéma d'un essieu selon YAMEOGO, 2004

La sécurité du convoi dépend en grande partie des essieux. Bien que les défaillances en service de ces derniers soient extrêmement rares, elles peuvent avoir des conséquences catastrophiques. Au cours de leur durée de vie, les essieux parcourent des millions de kilomètres, bien plus que la durée de vie de leurs éléments de roulement, comme les roues par exemple, qui sont remplacées cinq fois au cours de la vie d'un essieu. Assurer une conception appropriée pour résister à la fatigue due à ces nombreux cycles est donc d'une importance capitale. Les fissures de fatigue commencent généralement soit sous les zones de contact des roues (ce qu'on appelle sollicitation de fretting-fatigue), soit dans les zones d'angle situées à proximité de ces zones de contact (ce qu'on appelle flexion-rotative).

Il est donc nécessaire de développer des outils suffisamment pertinents et précis pour évaluer la résistance de ces pièces. Des travaux ont déjà été réalisés par ROUX, 2016 sur les roues. Les résultats montrent l'importance de prendre en compte la multiaxialité des contraintes et les variations réelles des chargements pour une évaluation plus précise de la durée de vie des roues. Nous tâchons ici de nous intéresser aux essieux.

1.1.2 Fretting-fatigue

Le phénomène de fretting-fatigue émerge de l'interaction entre deux phénomènes intimement liés : la fatigue des matériaux et le fretting, un terme dérivé de la fusion entre « friction » et « usure » en anglais. Cette interaction se manifeste lors de mouvements microscopiques mais répétés entre deux surfaces en contact partiel, et elle peut avoir des conséquences significatives sur la durabilité et la résistance des matériaux.

À l'échelle microscopique, ces mouvements infimes entre les surfaces en contact surviennent souvent en raison de vibrations, de contraintes cycliques ou d'autres forces environnementales. Même si la charge totale imposée sur les matériaux peut sembler relativement faible, ces mouvements incessants créent localement des contraintes de contact élevées. Cette accumulation de contraintes locales peut entraîner la formation de micro-fissures à l'intérieur des matériaux, en particulier dans les zones de contact maximal entre les surfaces, comme celle visible dans la figure 1.4. Avec le temps et à mesure que les cycles de charge se répètent, ces micro-fissures ont tendance à s'agrandir et à se propager progressivement à travers le matériau.

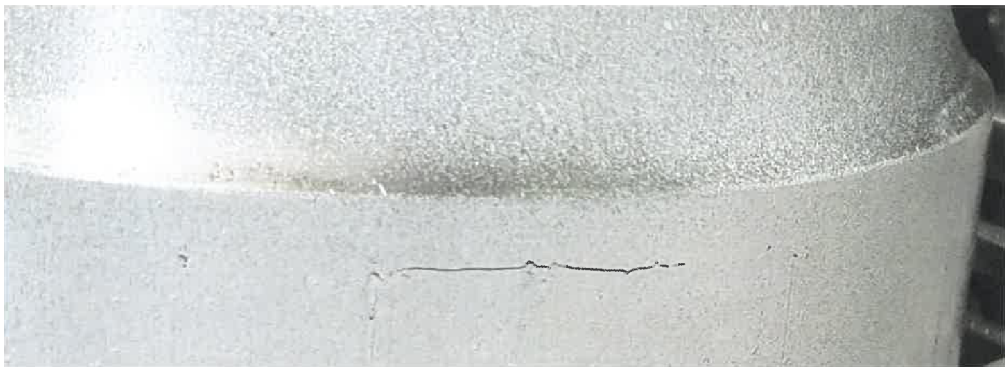


Figure 1.4 – Fissure sur le bord de la portée de calage. Longueur : 35 mm

Le danger inhérent au phénomène de fretting-fatigue réside dans le fait que ces micro-fissures, bien que minuscules, peuvent s'étendre de manière invisible jusqu'à ce qu'elles atteignent une taille critique, affaiblissant ainsi de manière significative l'intégrité du système. Dans des cas extrêmes, cette dégradation silencieuse peut éventuellement entraîner une défaillance catastrophique et sou-

daine de la structure ou du composant, avec des conséquences potentiellement désastreuses.

En service, les axes sont principalement sollicités en flexion rotative cyclique et en fretting-fatigue au niveau des portées de calage où les organes de roulement sont montés par frettage. Ce phénomène de fretting-fatigue engendre alors au bord des portées de calage l'apparition et la propagation de fissures comme il est possible de le constater sur la figure 1.4.

1.1.3 Microstructure de l'essieu

Les essieux de la société MG-Valdunes sont obtenus par forgeage. Ce mode opératoire est susceptible de générer un « gradient » de microstructure au sein de l'essieu. Le terme « gradient » fait ici référence à une variation de la taille des grains de l'acier EA1N qui compose la pièce, avec une taille de grains plus élevée au coeur de l'essieu qu'à la surface. Ce gradient de microstructure est alors accompagné d'un gradient de propriétés, étudié par Baudoin, 2015 (cf figure 1.5).

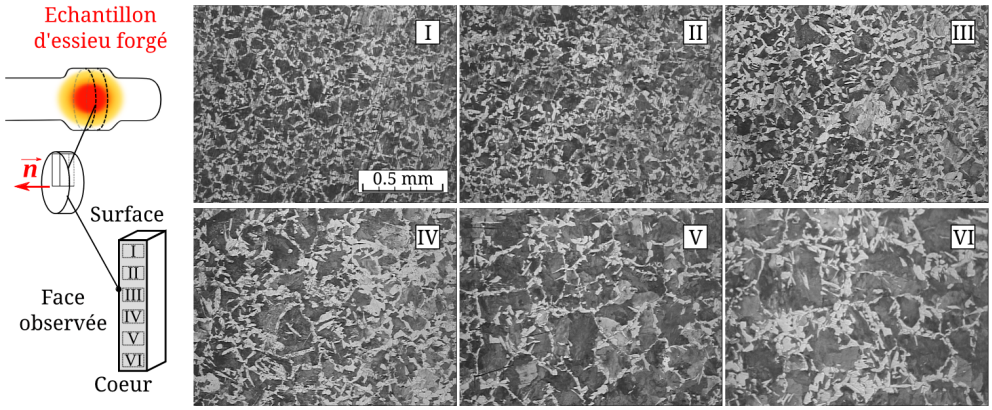


Figure 2.4 – Microstructure de l'EA1N à différentes profondeurs, état forgé

Figure 1.5 – Microstructure de l'EA1N à différentes profondeurs, état forgé

Ce dernier a notamment caractérisé le gradient de microstructure, et déterminé qu'immédiatement sous la surface, la taille caractéristique de grain moyenne est de l'ordre de 100 μm et évolue progressivement dans la profondeur jusqu'à atteindre une taille de 500 μm au cœur de la pièce. De plus, il souligne

le rôle positif de la microstructure sur le comportement en fatigue des essieux. L'amorçage des fissures se situe à l'échelle de la microstructure, des modèles comme celui de Csati, 2019 permettent de le modéliser ainsi que la propagation de fissures dans les matériaux cohésifs à grains.

1.1.4 Vers la conception du jumeau numérique

Une fois l'essieu et la roue obtenus, cette dernière est montée sur l'essieu par frettage à l'aide d'une presse. Un premier modèle développé par Hendrycks, 2023 a ainsi été conçu pour l'assemblage et la sollicitation de l'essieu monté. Le modèle est divisé en deux parties :

— un premier modèle 2D axisymétrique pour le calage de la roue sur l'essieu ;
— un second modèle 3D, obtenu en faisant une révolution de la géométrie et des résultats du modèle précédent, pour la flexion rotative.

Le maillage utilisé est celui de Hendrycks qui a été validé dans ses travaux :

— des éléments quadrangles linéaires de type CAX4 ;
— une taille de maille globale de 10mm ;
— une taille de maille de 1mm pour les surfaces en contact ;
— une taille de maille de 0.3mm pour les extrémités de l'essieu ou sont localisés les efforts les plus importants.

Calage

Le modèle de calage contient trois pièces qui sont l'essieu, la roue et la presse qui est modélisée par une simple surface rigide. La presse entre en contact avec la roue et pousse cette dernière pour la déplacer le long de l'essieu.

La géométrie et le maillage des pièces sont visibles dans la figure 1.6.

Les trois contacts définis par Hendrycks, et leur coefficient de frottement μ, sont les suivants :

1. Congé + Gorge de la roue / Portée de l'essieu : $\mu = 0.055$;
2. Moyeu / Portée : $\mu = 0.11$;
3. Presse / Galet : $\mu = 0$.

Les conditions aux limites sont :

1. un déplacement radial nul de l'axe de révolution de l'essieu ;
2. un déplacement axial nul des extrémités de l'essieu ;
3. une translation de la presse le long de l'essieu pour déplacer la roue et la caler.

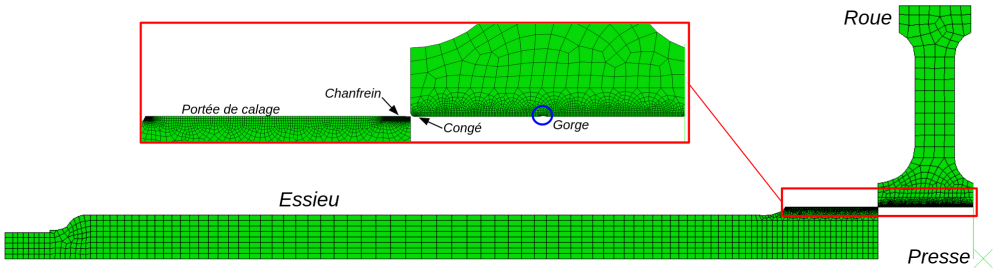


FIGURE 1.6 – Maillage 2D du système Essieu + Roue

En industrie, une courbe de calage est tracée pendant l'opération d'assemblage, comme celle visible dans la figure 1.7. Cette dernière représente l'effort de poussée nécessaire pour déplacer la roue le long de l'essieu, et permet à l'opérateur sur place de vérifier le bon déroulement de l'opération. Plus précisément, une fenêtre de validité dans laquelle la courbe de calage doit se trouver a été définie par le bureau d'étude.

Dans son modèle, Hendrycks a notamment mis en évidence l'impact du coefficient de frottement sur l'opération de calage, aboutissant à un comportement en fatigue différent. Comme constaté dans la figure 1.8, une augmentation du coefficient de frottement global entraîne une augmentation de l'amplitude de la courbe sans en modifier le profil. Il est ainsi nécessaire de calibrer ce paramètre et de mettre en lien l'état de surface et l'évolution de la courbe de calage en distinguant surface de contact réelle et surface apparente. En effet, le modèle considère que le contact se réalise sur l'ensemble de la portée de calage, tandis que dans la réalité, en raison des irrégularités de surfaces, les pièces ne se touchent pas uniformément sur toute la surface apparente. Le contact réel se fait alors sur un ensemble d'aspérités, donnant une taille de surface de contact inférieure à la surface apparente.

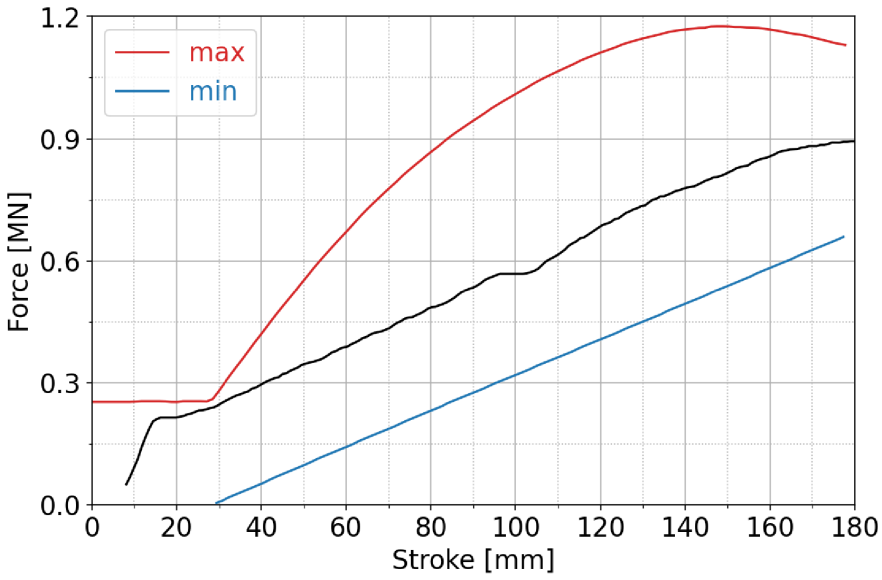


FIGURE 1.7 – Courbe (noire) de calage d'une roue sur l'essieu-axe et enveloppe normative selon HENDRYCKS, 2023

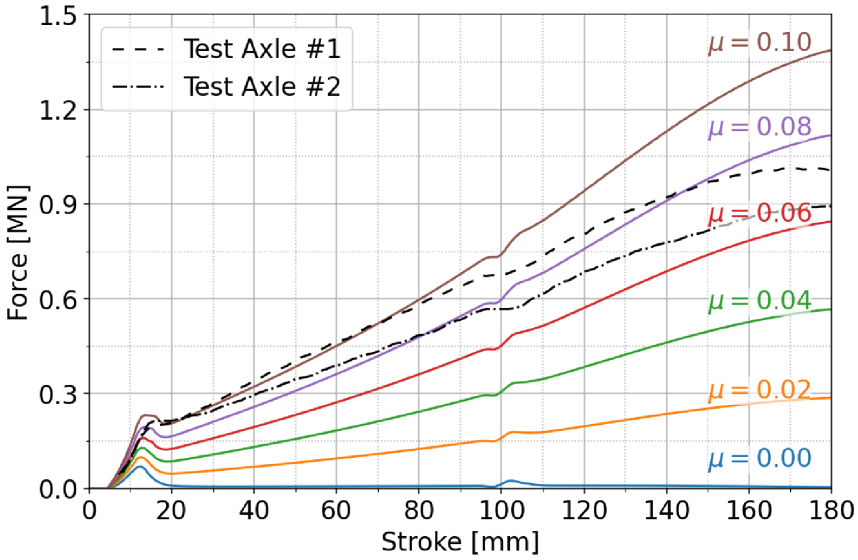


FIGURE 1.8 – Prédictions de l'effort fourni par la presse pour le coefficient de frottement μ dans $[0\ ;\ 0.1]$ selon Hendrycks

De plus, les matériaux utilisés pour ce modèle sont homogènes et ne prennent

pas compte du gradient de microstructure, et donc de propriétés. Un enrichissement sur ce point est également nécessaire.

Flexion rotative

Le côté externe de la roue est bloqué radialement, et deux charges sinusoïdales F_x et F_y respectivement selon x et y et déphasées de $\frac{\pi}{2}$ sont modélisées à l'extrémité de l'essieu, pour représenter une charge tournante. Les résultats après un cycle sont affichés dans la figure 1.9.

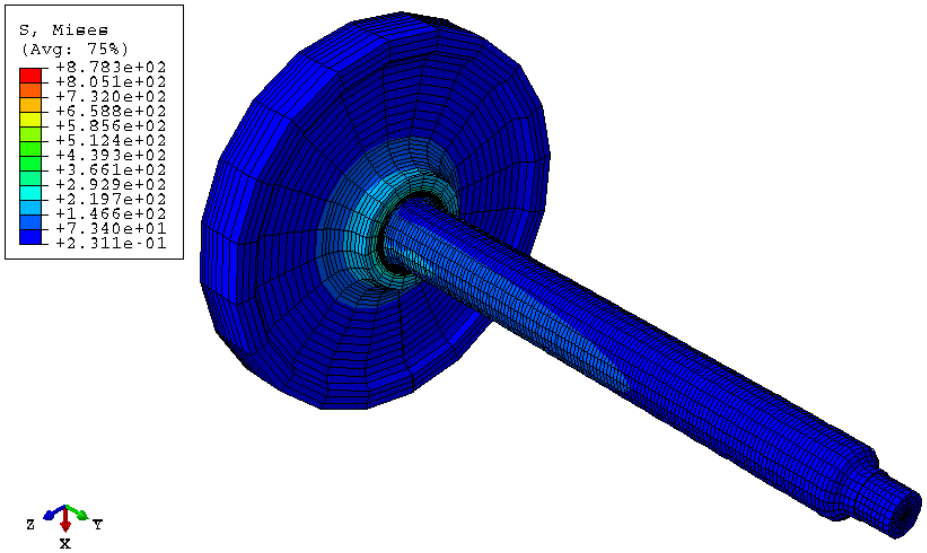


FIGURE 1.9 – Modèle éléments finis de la sollicitation cyclique de l'essieu

1.2 Détermination du coefficient de frottement

1.2.1 Définition

La détermination du coefficient de frottement est cruciale dans l'analyse numérique, en particulier lorsqu'il s'agit de comprendre et de modéliser le comportement des matériaux en présence de défauts de surface ou d'hétérogénéités. Les défauts de surface tels que la rugosité et les hétérogénéités des matériaux peuvent influencer de manière significative le frottement entre deux

surfaces de contact, affectant ainsi les performances et la fiabilité des composants mécaniques.

Au fil des années, une gamme de méthodes a été développée pour mesurer le coefficient de frottement, chacune présentant ses avantages, ses limites et son domaine d'application spécifique. La méthode classique du plan incliné, remontant aux travaux de Léonard de Vinci (Dugas, 1988), consiste à mesurer l'angle d'inclinaison à partir duquel un objet commence à glisser sur une surface donnée. Cette approche simple offre des résultats approximatifs et est plus adaptée aux situations où les coefficients de frottement statique et cinétique sont similaires.

Ses résultats sont tout de même validés par Amontons, 1999 en 1699 lorsqu'il obtient les mêmes lois que celles proposées par de Vinci : l'effort normal F_n et l'effort tangentiel F_t évoluent de manière proportionnelle, et l'aire de contact apparent n'a pas d'impact sur l'effort de frottement.

C'est finalement Coulomb, 1809 qui définit un coefficient égal au rapport entre l'effort normal et l'effort de frottement et qu'il appelle coefficient de frottement :

$$\mu = \frac{F_t}{F_n} \tag{1.1}$$

Il montre ainsi que le coefficient de frottement ne dépend pas de la vitesse de glissement.

Toutefois, les applications modernes nécessitent une précision supérieure. Les approches numériques, comme la méthode des éléments finis, sont souvent utilisées pour simuler le comportement du frottement dans des conditions complexes. Ces simulations permettent de prédire les forces de frottement et d'analyser l'impact des défauts de surface et des hétérogénéités sur le comportement global du système. Des études ont montré que la précision de ces modèles numériques dépend fortement de la capacité à caractériser correctement les propriétés de la surface et les conditions de contact.

Karupannasamy et al., 2013 présentent un modèle de contact multi-échelle pour les processus de formage des tôles, soulignant l'importance de la géométrie des surfaces rugueuses dans la prédiction des coefficients de frottement sous différentes pressions de contact nominales. L'avènement de la modélisation in-

formatique a également ouvert de nouvelles perspectives dans la détermination du coefficient de frottement. Temizer et Wriggers, 2008 proposent une technique d'homogénéisation du contact pour extraire le coefficient de frottement macroscopique d'un système de frottement à trois corps constitués de particules rigides encastrées entre un solide élastique à déformation finie et une surface rigide. Moghaddam et al., 2018 ont développé et validé un modèle éléments finis à plusieurs échelles pour analyser les interactions de frottement entre la chaussure et le sol, en tenant compte des caractéristiques microscopiques et macroscopiques, et en comparant les résultats du modèle avec des données expérimentales pour évaluer sa validité. Waddad, 2017 a considéré la rugosité comme une rigidité normale au contact et a comparé l'évolution de la pression de contact et de la température entre un modèle parfait (c'est-à-dire des surfaces parfaitement lisses) et un modèle avec rugosité. Chaise, 2011 a développé des méthodes semi-analytiques pour prédire les contraintes résiduelles et leurs effets sur les processus mécaniques, en tenant compte de l'influence du frottement, en particulier dans le laminage, les impacts et le grenaillage ultrasonique, fournissant ainsi des outils précieux pour améliorer la durée de vie des composants mécaniques. Les tests tribologiques, tels que le tribomètre à bille sur disque (Passerat, 2000), permettent une caractérisation plus fine des interactions entre les surfaces en mouvement. Cette méthode s'applique à des domaines allant de la fabrication de roulements à billes aux revêtements de composants mécaniques.

L'enrichissement du modèle de calage se fait alors à travers l'intégration des défauts des surfaces en contact dans le modèle. La stratégie habituelle consiste à utiliser la méthode des éléments finis, mais cette dernière est limitée lorsqu'il s'agit de modéliser l'interaction entre des particules ou pour modéliser des matériaux discontinus. Une nouvelle modélisation de l'opération de calage est alors réalisée, cette fois-ci à l'échelle mésoscopique, à l'aide de la méthode des éléments discrets. Le but est de visualiser l'impact des défauts de surface (défauts de forme, rugosité, etc.) sur l'évolution du coefficient de frottement au cours de l'opération de calage, et de généraliser cela à tout type de surface afin d'introduire ces résultats dans le modèle de Hendrycks.

1.2.2 Méthode des éléments discrets

La DEM est une approche de modélisation numérique qui a évolué au fil des décennies pour devenir un outil puissant pour simuler le comportement de systèmes granulaires et de particules discrètes. Son histoire remonte aux années 1970, avec les travaux pionniers de Cundall et Strack, 1979, qui ont jeté les bases de cette méthode. Elle repose sur le principe de discrétisation d'un système en particules, chacune considérée comme un objet individuel ayant sa propre masse, sa géométrie, sa position et sa vitesse.

Le fonctionnement de la DEM implique la simulation des interactions entre les particules. Les forces interparticulaires, telles que la répulsion, l'attraction, le frottement et l'élasticité, sont prises en compte pour calculer les mouvements et les déformations au fil du temps. Lorsque des particules interagissent, elles transmettent des forces les unes aux autres, modifiant ainsi leurs trajectoires et leurs états. Cette simulation de l'interaction entre les particules permet d'étudier une grande variété de phénomènes, tels que les écoulements granulaires, les collisions, les compactages, les ruptures, et bien d'autres. Cette méthode présente l'avantage de pouvoir prendre en compte la nature discrète des particules, ce qui la rend particulièrement adaptée à la modélisation de matériaux granulaires et de systèmes où les interactions individuelles des particules sont essentielles.

Les méthodes de calcul par éléments discrets sont classées selon trois familles :

— méthode « lattice » où les domaines sont modélisés par des poutres élastiques, permettant d'obtenir des informations sur l'amorçage et la propagation de fissures (Schlangen et Garboczi, 1997) ;
— méthode « particulaire », dans laquelle les domaines sont modélisées par des particules reliées entre elles par des ressorts. Elle permet alors de modéliser l'élasticité des domaines. (Gotoh et al., 1978) ;
— méthode « hybride » ou « lattice-poutre », qui consiste à combiner l'avantage des deux méthodes précédentes en modélisant la matière par des sphères, reliées entre elles par des poutres d'Euler-Bernoulli. Cela permet ainsi de modéliser le comportement élastique des matériaux, et d'obtenir des résultats sur l'amorçage, la propagation et la fermeture des fissures

au sein du modèle.

Dans le cadre de notre étude, nous utilisons ici une méthode hybride, illustrée dans la figure 1.10.

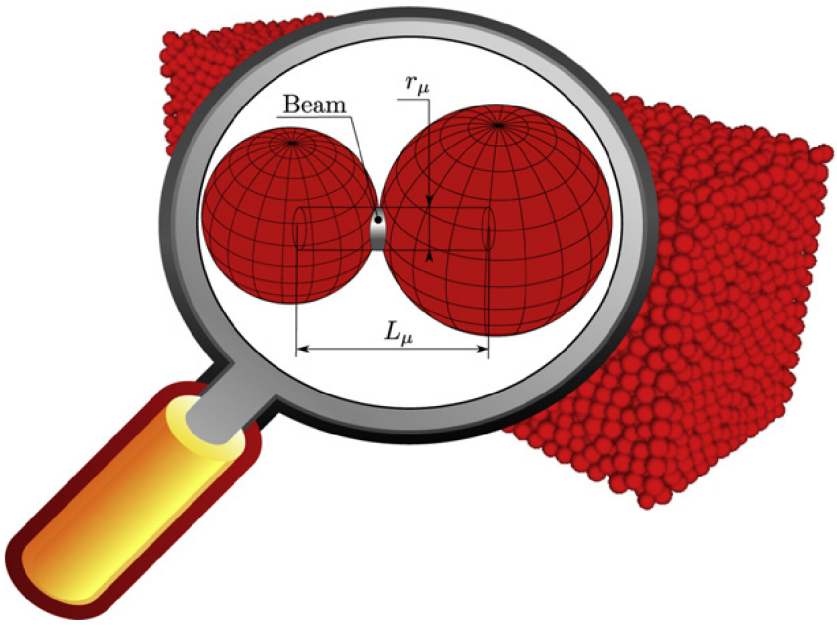


FIGURE 1.10 – Représentation de la liaison cohésive entre deux éléments discrets selon ANDRÉ et al., 2012

La DEM trouve des applications dans de nombreux domaines. Les simulations numériques basées sur des méthodes telles que la dynamique moléculaire permettent de prédire le comportement de systèmes complexes à différentes échelles (KOUNOUDJI et al., 2015a), des molécules individuelles aux structures macroscopiques. KOUNOUDJI et al., 2015b analysent les assemblages boulonnés en se concentrant sur le frottement aux interfaces des filets pour mieux comprendre les interactions tribologiques. TABOADA et RENOUF, 2023 étudient l'initiation et la croissance d'une zone de cisaillement granulaire sèche sous l'effet d'un cisaillement sismique et d'un chauffage instantané. Démontrant sa polyvalence, IORDANOFF et al., 2010 illustre comment la méthode des éléments discrets peut compléter les études des processus de formage en examinant les effets thermiques dans les processus de coupe, en analysant les dommages sous la surface pendant l'abrasion et en caractérisant les joints de soudure dans le soudage par

friction-malaxage. Il est également possible de modéliser des matériaux hétérogènes comme cela a été fait par Rousseau, 2009 pour modéliser le comportement du béton armé. Hubert et al., 2016 combine cette méthode avec la théorie des graphes pour simuler la conduction électrique dans les continuums, obtenant une précision satisfaisante dans la prédiction de la conduction et du chauffage par effet Joule dans divers domaines, avec des applications potentielles dans la détection des fissures. Bouillanne et al., 2022 modélise un 3e corps et étudie l'impact que peuvent avoir la cohésion, la rigidité et la viscosité de particules déformables dans les contacts tribologiques. On observe alors à travers ces différentes applications qu'il n'y a jamais de généralisation directe ou de transfert d'informations de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.

1.2.3 GranOO

Le logiciel utilisé est GranOO, qui est une collection de librairies et d'outils codés en C++ permettant de réaliser des simulations basées sur la DEM. Ce logiciel a été développé par André et al., 2012 durant sa thèse.

GranOO est un code DEM dynamique explicite spécialisé dans la modélisation de matériaux présentant un grand nombre de discontinuités. Il intègre des modèles mécaniques, thermiques et électriques afin de réaliser des simulations multiphysiques. GranOO met en œuvre des lois de contact régulières, différents types d'interactions et plusieurs schémas temporels explicites. Cette configuration est bien adaptée pour résoudre des problèmes dynamiques discontinus multiphysiques tels que l'usure, la multi-fracturation, les impacts, etc.

1.3 Intelligence artificielle

La DEM peut être utilisée pour construire des modèles à fine échelle, fournissant des informations spécifiques, mais souffre de temps de calcul relativement longs. Dans une optique de généralisation, une idée que nous allons défendre est de relier les surfaces en contact au coefficient de frottement à l'échelle de la simulation grâce à l'utilisation de l'intelligence artificielle.

1.3.1 Présentation générale de l'IA

L'IA est un vaste domaine de l'informatique qui se consacre à la création de systèmes capables d'effectuer des tâches qui, lorsqu'accomplies par des humains, nécessitent généralement une intelligence humaine, comme la perception visuelle, le langage naturel, la prise de décision et bien plus encore. L'un des sous-domaines essentiels de l'IA est le *machine learning* (apprentissage automatique). Cette approche repose sur l'idée que les systèmes informatiques peuvent apprendre et s'améliorer à partir de données, sans être explicitement programmés pour chaque tâche. Les algorithmes de *machine learning* identifient des motifs et des relations dans les données, ce qui les rend extrêmement utiles pour des applications telles que la classification d'images, la prédiction de tendances et l'automatisation de processus.

Le *deep learning* (apprentissage profond) est une sous-branche du machine learning qui a connu une montée en puissance considérable ces dernières années. Il repose sur des réseaux de neurones artificiels inspirés du fonctionnement du cerveau humain. Ce qui distingue le *deep learning* sont les architectures de réseaux neuronaux profonds, composées de multiples couches de neurones interconnectées, qui permettent de traiter des données de manière hiérarchique et d'extraire des caractéristiques complexes. Cette technologie a permis des avancées spectaculaires dans des domaines tels que la vision par ordinateur, la reconnaissance vocale, la traduction automatique et la compréhension du langage naturel, faisant de l'IA une réalité de plus en plus présente dans notre vie quotidienne.

L'intégration de l'IA dans les domaines scientifiques et techniques a révolutionné la façon d'aborder les problèmes complexes et multidimensionnels. Grâce aux progrès de l'IA, les chercheurs et les ingénieurs peuvent exploiter des algorithmes d'apprentissage automatique capables d'analyser divers ensembles de données. Sur la base de ces données, les modèles d'IA peuvent identifier des tendances subtiles et des relations non triviales. Ces modèles sont utilisés en tribologie pour la segmentation et l'analyse morphologique des images de traces d'usure/de particules (Bouchot et al., 2022), et pour prédire et comprendre les effets tribologiques sur les performances des systèmes (Motamedi et al., 2023).

L'intérêt d'utiliser l'IA pour prédire le coefficient de frottement réside dans sa capacité à accélérer considérablement le processus de caractérisation. Au lieu de s'appuyer uniquement sur des expériences répétées souvent fastidieuses, les chercheurs peuvent utiliser des modèles d'IA pour simuler des interactions virtuelles entre différentes surfaces et conditions. En outre, l'IA peut aider à surmonter les limitations liées à la disponibilité des données expérimentales, en extrapolant les relations entre les propriétés des matériaux et le coefficient de frottement dans des situations moins étudiées.

1.3.2 Architecture d'une IA de type Deep Learning

Une IA programmée en *deep learning* repose sur la construction de réseaux de neurones artificiels (McCulloch et Pitts, 1943 ; Rosenblatt, 1957). Le neurone est un modèle binaire, c'est-à-dire qu'il ne peut avoir en sortie que 0 ou 1. Pour obtenir ce résultat, le neurone réalise une somme de toutes ses entrées, qui sont elles-mêmes la sortie de plusieurs neurones, associées à un poids qui leur sont propres. Enfin, le neurone applique une fonction d'activation à seuil : si la somme pondérée dépasse un certain seuil, alors la fonction s'active et produit comme valeur 1. Sinon, elle ressort 0. Le modèle du neurone est donc une fonction à N variables et à valeur réelle, telle que celle décrite ci-dessous :

$$f(w_0 + \sum_{i=1}^{N} w_i x_i) = y \tag{1.2}$$

avec :

— f, la fonction d'activation ;
— w_0, un biais ;
— w_i avec $i \in [1;N]$, les poids ;
— x_i avec $i \in [1;N]$, les entrées ;
— y, la sortie.

Un réseau neuronal est ainsi composé de plusieurs couches de neurones (une couche d'entrée, une couche de sortie et une ou plusieurs couches cachées) où chaque neurone est connecté à plusieurs autres neurones, comme illustré dans la figure 1.11. Enfin, les réseaux de neurones convolutifs qui seront utilisés ici

permettent de reconnaître et de traiter des images (LeCun et al., 2010).

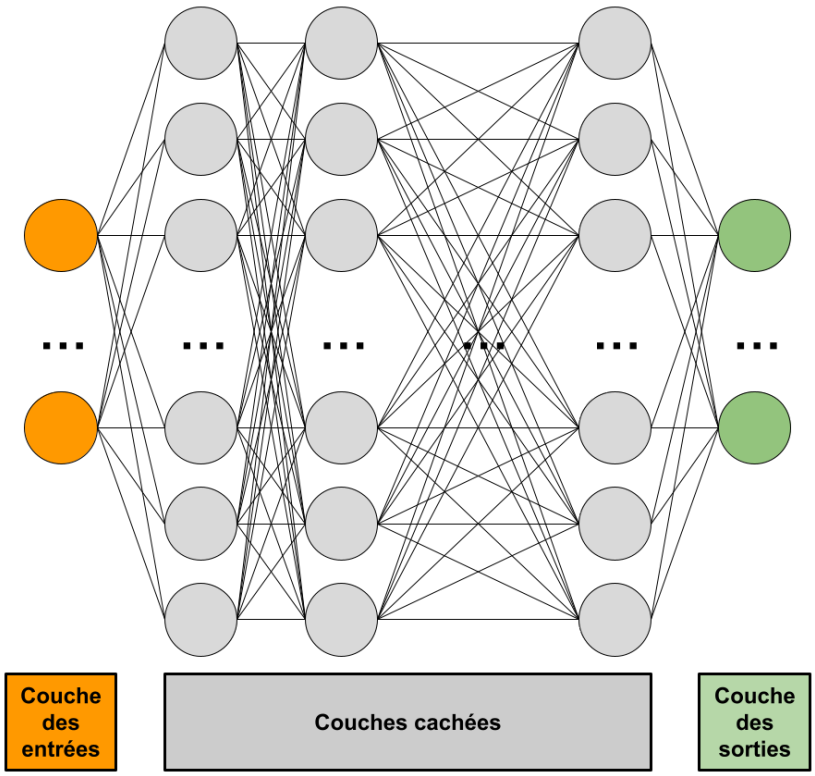


Figure 1.11 – Réseau de neurones artificiels

Dans le cadre d'un apprentissage supervisé, il existe deux classes d'intelligence artificielle :

classification : le programme identifie à quelle catégorie un objet appartient ;

régression : le programme prédit la valeur d'une variable continue, en fonction des valeurs d'autres variables.

Une fois le programme conçu, le modèle passe par deux étapes : l'apprentissage et la prédiction.

L'apprentissage (ou l'entraînement) est l'étape qui permet de construire le modèle. Une base de données comprenant un certain nombre d'exemples est fournie à l'IA pour qu'elle puisse apprendre par l'expérience. Au départ, lorsque l'algorithme considère les premiers exemples, il produit des réponses qui ne sont

a priori pas très pertinentes. Puis, au fur et à mesure qu'il intègre de nouveaux cas dans sa phase d'apprentissage, il s'adapte, se transforme, jusqu'à devenir prêt (Rumelhart et al., 1986). Ainsi, il est nécessaire de construire une base de données suffisamment dense pour que l'IA fasse des prédictions précises et fiables.

Lors de l'apprentissage de l'IA, la base de données est divisée en deux groupes : un groupe d'entraînement, et un groupe de test. L'IA étudie d'abord les exemples de la base d'apprentissage et essaye de déterminer la fonction qui relie les entrées à la sortie. Puis elle s'auto-évalue avec la base de test, et produit un score qui correspond à l'écart entre les valeurs prédites et les valeurs réelles. Cela permet à l'utilisateur d'avoir un retour concernant l'apprentissage et de conclure sur la possible utilisation ou non de l'IA.

Les composantes d'un programme en *deep learning* sont les suivantes :

— L'entrée X ;

— La sortie Y ;

— Des données : $((x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_N, y_N)$

— Une hypothèse : Il existe une fonction $f : X \longrightarrow Y$.

L'objectif de l'IA est donc lors de la phase d'apprentissage d'approximer la fonction f à partir des données d'entraînement pour lesquelles on connaît la sortie, puis d'utiliser cette fonction sur d'autres données dont on ne connaît pas la sortie. Pour cela, les données d'entraînement font un premier trajet à travers les couches de l'IA afin d'obtenir une valeur prédite y'. L'IA calcule ensuite une différence entre la valeur prédite et la valeur réelle via une fonction de perte, puis modifie en conséquence à l'aide de l'optimiseur les valeurs des poids $w_1, w_2, ..., w_N$. Toutes ces étapes sont alors réitérées autant de fois que nécessaire, c'est à dire jusqu'à ce que les prédictions de l'IA sur la base de données de test soient suffisamment proches des valeurs réelles. Les itérations sont appelées *epochs*, et c'est à l'utilisateur de spécifier le nombre d'*epochs* lors de la phase d'apprentissage.

La fonction d'optimisation joue un rôle crucial, puisque c'est elle qui guide le processus d'apprentissage du modèle en ajustant les poids. À chaque *epochs*, les gradients de la fonction de perte par rapport aux paramètres du modèle sont calculés, indiquant la direction dans laquelle les paramètres doivent être ajustés

pour réduire la perte. Les optimiseurs utilisent ensuite ces gradients pour mettre à jour les paramètres de manière appropriée, en utilisant des méthodes telles que la descente de gradient, dont la formule est la suivante :

$$w_{n+1} = w_n - \eta.\nabla J(w_n) \tag{1.3}$$

avec :

- w_n, les paramètres du modèle à l'itération n ;
- η, le taux d'apprentissage (ou *learning rate*) qui contrôle la taille des pas que l'optimiseur prend à chaque itération ;
- $J(w_n)$, la fonction de perte (ou *loss function*) à minimiser ;
- $\nabla J(w_n)$, le gradient de la fonction de perte par rapport aux paramètres w_n, qui indique la direction dans laquelle la fonction de perte augmente le plus rapidement.

Des variantes plus avancées comme Adam sont possibles. Ce processus se répète sur de nombreuses itérations jusqu'à ce que le modèle converge vers un ensemble de paramètres qui minimise la fonction de perte et produit des prédictions précises sur de nouvelles données.

1.3.3 Validation du modèle

En plus de l'architecture globale de l'IA (nombre de couches, nombre de neurones par couches, etc.), plusieurs paramètres sont à définir par l'utilisateur comme le nombre d'*epochs* ou la répartition des données en deux groupes distincts comme dit précédemment, mais aussi les fonctions d'activation dans les couches (ReLU, sigmoid, tangente hyperbolique, etc..), le taux d'apprentissage, le choix de la fonction de perte etc. La combinaison de ces différents paramètres, associée à la taille de la base de données et à la complexité du problème, peuvent entraîner deux phénomènes cruciaux dans l'apprentissage des modèles de *deep learning*, l'*overfitting* et l'*underfitting* qui sont illustrées dans la figure 1.12, car ils influencent la capacité d'un modèle à généraliser à de nouvelles données non fournies.

L'*overfitting* se produit lorsque le modèle s'adapte trop étroitement aux données d'entraînement, capturant même le bruit et les variations aléatoires présents

dans ces données. En conséquence, le modèle peut avoir une excellente performance sur les données d'entraînement, mais il se comporte mal sur de nouvelles données, car il ne parvient pas à saisir les schémas sous-jacents et généralisables. Les signes d'*overfitting* incluent une faible erreur d'entraînement mais une erreur de validation ou de test élevée.

À l'opposée, l'*underfitting* se produit lorsque le modèle est trop simple pour capturer les structures complexes présentes dans les données. Cela se traduit par une mauvaise performance tant sur les données d'entraînement que sur les nouvelles données. Un modèle sous-ajusté ne peut pas saisir les caractéristiques importantes des données et ne parvient pas à réaliser une représentation adéquate.

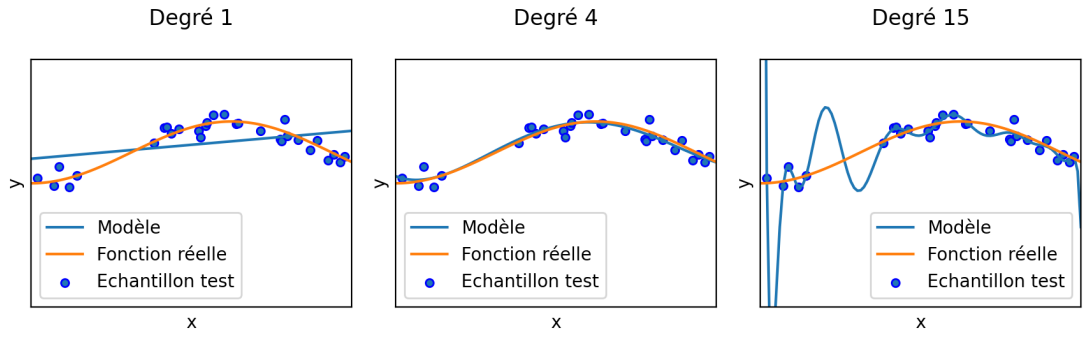


FIGURE 1.12 – Représentation de l'*underfitting*, du *good fitting* et de l'*overfitting* (de gauche à droite) via les prédictions

Pour éviter ces problèmes, il est essentiel de trouver un équilibre entre complexité et généralisation. Cela implique souvent des techniques telles que la collecte de données supplémentaires, le choix judicieux de l'architecture du modèle, le fractionnement des données, l'ajustement des hyperparamètres etc. En surveillant attentivement les courbes d'apprentissage et de validation, et les prédictions sur la base de données de validation, l'utilisateur peut atténuer les problèmes d'*overfitting* et d'*underfitting* pour créer des modèles performants et généralisables.

1.3.4 Convolution

Le principe de convolution est au cœur des réseaux de neurones convolutifs (CNN), une architecture fondamentale dans le domaine du traitement des images et de la vision par ordinateur. La convolution est une opération mathématique qui permet de détecter des motifs et des caractéristiques dans une image en appliquant un noyau (ou filtre) sur des zones locales de l'image.

Le fonctionnement de la convolution consiste en plusieurs étapes. Tout d'abord, l'image d'entrée est divisée en petites régions, généralement appelées fenêtres ou patchs. Ensuite, un noyau de petite taille est appliqué à chaque fenêtre. Le noyau est une matrice de poids qui agit comme un détecteur de motifs. En effectuant une multiplication élément par élément entre les valeurs de la fenêtre et les poids du noyau, suivie d'une sommation, on obtient une seule valeur, qui représente la réponse du filtre à cette région de l'image. Ce processus est répété pour chaque position en se déplaçant avec un pas (*stride*) donné, produisant ainsi une carte d'activation qui représente les réponses du filtre sur différentes régions de l'image.

Mathématiquement, la convolution discrète entre une image I et un noyau K est définie comme suit :

$$S(i,j) = (I * K)(i,j) = \sum_m \sum_n I(m,n).K(i-m, j-n) \tag{1.4}$$

où $S(i,j)$ est la valeur résultante à la position (i,j) de la carte d'activation, $I(m,n)$ est la valeur du pixel dans l'image d'entrée à la position (m,n), et $K(i-m, j-n)$ est la valeur du noyau à la position correspondante.

Les CNN apprennent automatiquement les poids des filtres lors de la phase d'entraînement. À mesure que les filtres évoluent à travers les couches du réseau, ils deviennent capables de détecter des caractéristiques de plus en plus abstraites. Les premières couches apprennent souvent des bords, des coins et des textures simples, tandis que les couches plus profondes capturent des formes complexes et des objets.

En somme, la convolution permet aux réseaux de neurones convolutifs d'exploiter les relations spatiales entre les pixels d'une image et d'extraire des in-

formations significatives grâce à l'application de filtres. Cette méthode d'apprentissage automatique a révolutionné la vision par ordinateur en permettant aux machines de réaliser des tâches telles que la reconnaissance d'objets, la détection de visages, la segmentation d'images et bien plus encore, avec des hautes performances.

1.4 Méthode de couplage local/global

1.4.1 Présentation générale de la méthode

Les travaux présentés dans la section 1.1 ont montré que le procédé de forgeage sur les essieux induit un champ de contrainte résiduelle et qu'il subsiste un gradient de microstructure avec une évolution de la taille de grain, liés au refroidissement de l'essieu, qui sont illustrés dans la figure 1.13.

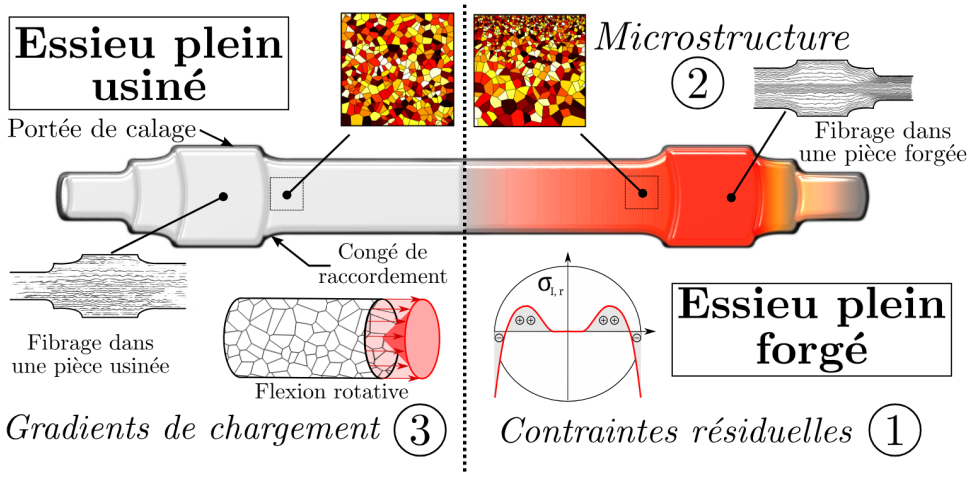


FIGURE 1.13 – Illustration du gradient de microstructure et des contraintes résiduelles dans l'essieu, selon Baudoin

L'introduction directe de ce gradient de microstructure dans un modèle numérique nécessiterait la création d'un modèle complexe et coûteux en termes de temps et de puissance de calcul. Nous proposons alors l'utilisation d'une méthode de couplage global/local non-intrusive par substitution, consistant à

mettre en concurrence deux modèles : un modèle global qui contient la structure entière de l'essieu, avec un matériau homogène, et un modèle local qui se limite à la zone d'observation du fretting-fatigue et qui modélise le gradient de microstructure.

Dans un modèle éléments finis, une structure est discrétisée en un maillage d'éléments finis. Pour certaines applications, comme des problèmes comportant des discontinuités ou des variations brusques dans les propriétés des matériaux, il est souvent nécessaire de modéliser certains détails de manière plus précise. Cependant, une modélisation très fine à l'échelle globale peut être très coûteuse en temps de calcul et en ressources informatiques. Pour résoudre ce problème d'optimisation et de coût, une option demeure le couplage global/local non intrusif (Gendre et al., 2009) qui combine une modélisation grossière à l'échelle globale avec une modélisation plus fine à l'échelle locale, là où c'est nécessaire, comme illustré sur la figure 1.14.

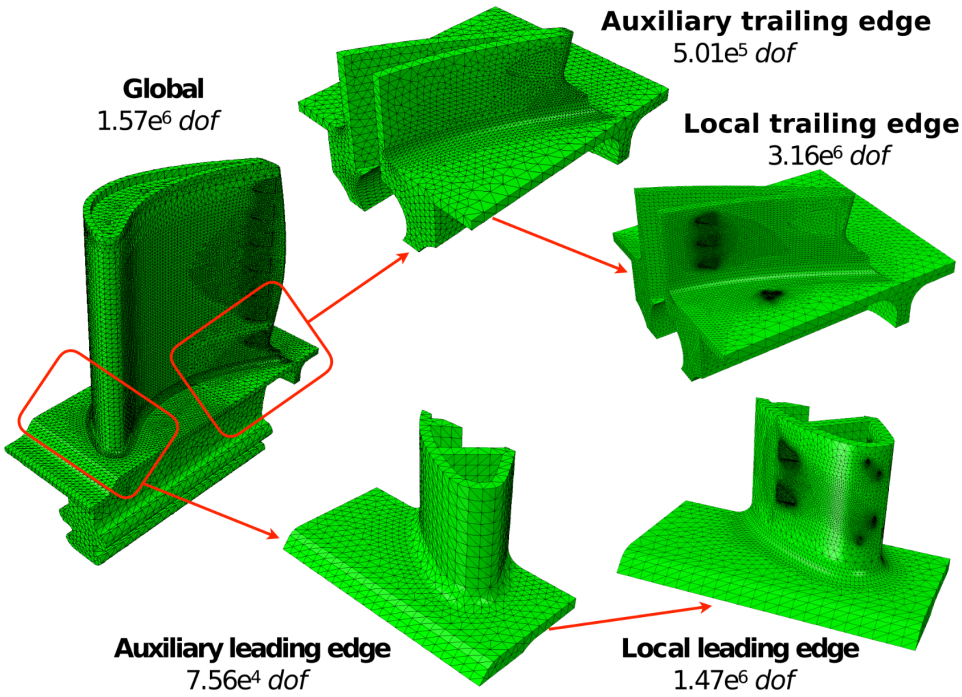


Figure 1.14 – Illustration des modèles global et local (Allix et Gosselet, 2020)

Contrairement aux méthodes de couplage intrusif où les modèles globaux

et locaux sont intégrés dans un seul schéma de calcul, le couplage global/local non intrusif permet une séparation des modèles globaux et locaux, ce qui facilite leur développement et leur maintenance. Dans cette approche, le modèle global est résolu de manière traditionnelle sur un maillage grossier, tandis que des modèles locaux plus détaillés sont utilisés pour représenter les zones critiques ou les phénomènes spécifiques sur des maillages plus fins. Ces modèles locaux peuvent être résolus indépendamment du modèle global, et les résultats locaux sont ensuite utilisés pour informer ou modifier le modèle global.

1.4.2 Description de la méthode

Nous distinguons ici deux approches différentes pour le couplage global/local non-intrusif, qui sont schématisées sur la figure 1.15

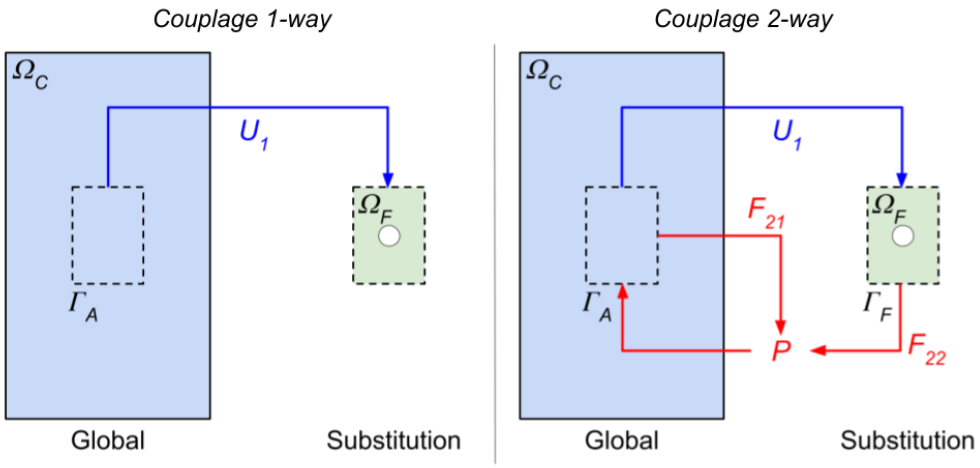


FIGURE 1.15 – Comparaison *1-way* et *2-way*

1-way submodeling (sous-modélisation unilatérale)

Dans cette approche, le modèle global est résolu en premier lieu de manière indépendante. Ensuite, des zones spécifiques du modèle global où des détails locaux sont importants sont identifiées. Des modèles locaux plus détaillés, souvent appelés sous-modèles, sont ensuite créés pour ces zones critiques. Ces sous-modèles sont ensuite résolus séparément, généralement à une résolution

plus fine que le modèle global. Cette méthode est appelée unilatérale car l'information circule uniquement du modèle global vers les sous-modèles, mais pas dans l'autre sens.

***2-way submodeling* (sous-modélisation bilatérale)**

Contrairement à la rechnique précédente, le *2-way submodeling* permet un échange bidirectionnel d'informations entre le modèle global et les sous-modèles. Dans cette approche, après la résolution du modèle global et des sous-modèles locaux, les résultats obtenus sont utilisés pour mettre à jour mutuellement les deux niveaux de modélisation. Cela signifie que les résultats des sous-modèles sont utilisés pour raffiner le modèle global ce qui permet à l'itération suivante de mettre en place des interactions entre patchs disjoints. Cette bidirectionnalité permet une meilleure intégration des informations entre les différentes échelles spatiales ou temporelles, ce qui peut conduire à une meilleure précision des résultats.

1.5 Méthodologie globale

La thèse est globalement divisée en deux parties. La première porte sur la prise en compte de la rugosité des surfaces en contact au sein de calculs de structures. Pour cela, nous effectuons une nouvelle modélisation à méso-échelle de l'opération de calage en utilisant la méthode des éléments discrets. L'objectif est de visualiser l'impact des défauts de surface (imperfections de forme, rugosité, etc.) sur l'évolution du coefficient de frottement, puis de généraliser cela à tout type de surface en utilisant une IA et d'introduire ces résultats dans le modèle par éléments finis de l'opération de calage à l'échelle d'un élément fin.

Dans la deuxième partie, nous ajoutons à la simulation existante le gradient de microstructure et l'hétérogénéité de l'essieu à travers un couplage global/local. Le modèle global correspond à la simulation éléments finis déjà existante, avec un matériau homogène, et le modèle local représente le bord de la portée de calage de l'essieu, où se situe le fretting-fatigue, et contient la microstructure réelle de l'essieu. La génération de la microstructure se fait via Neper (Quey et al.,

2011), un logiciel de génération de microstructures polycristallines. L'objectif de cette partie est de voir l'impact de cette microstructure et du champ de contrainte sur la tenue en fatigue. Ainsi, la dernière partie consiste à créer un modèle prenant en compte à la fois la rugosité des surfaces en contact, et le gradient de microstructure de l'essieu.

Chapitre 2

Modélisation multi-échelle du frottement : vers une meilleure compréhension des paramètres-clés de l'opération de calage

Sommaire du présent chapitre

2.1 Échelle macroscopique **36**

2.2 Echelle mésoscopique **39**

2.2.1 Génération des surfaces rugueuses 39

2.2.2 Calibration des paramètres microscopiques 41

2.2.3 Adaptation des conditions limites 45

2.2.4 Modélisation de l'usure 49

2.2.5 Post-traitement 49

2.3 Influence de la rugosité **51**

2.4 Conclusions **52**

Comme dit précédemment, il a été montré que l'ensemble des étapes de la chaîne de fabrication et d'assemblage doit être pris en compte pour un dimensionnement pertinent du système [Saad, 2016]. Une première chaîne numérique a ainsi été développée par Hendrycks, 2023 permettant de modéliser l'ensemble de ces étapes. On retrouve ainsi une modélisation de l'étape du calage de la roue sur l'essieu. Hendrycks a pu mettre en évidence l'impact du coefficient de frottement sur cette opération de calage. Le but de cette partie est ainsi de mettre en lien l'état de surface et l'évolution de la courbe de calage.

Parallèlement à la modélisation macroscopique de l'opération de calage, nous effectuons une seconde modélisation de l'opération à une échelle plus locale en utilisant la méthode des éléments discrets. Cela nous permet de modéliser les défauts de surface observés expérimentalement sur les surfaces rugueuses. Les résultats sont ensuite introduits dans un système d'intelligence artificielle à apprentissage profond afin de généraliser les conclusions. L'objectif est de prédire le coefficient de frottement résultant de l'interaction de deux nouvelles surfaces rugueuses. Grâce à cette méthode, nous générons un nombre suffisant de coefficients de frottement pour les incorporer dans notre modèle à éléments finis. Nous disposons ainsi d'une simulation qui tient compte de la rugosité.

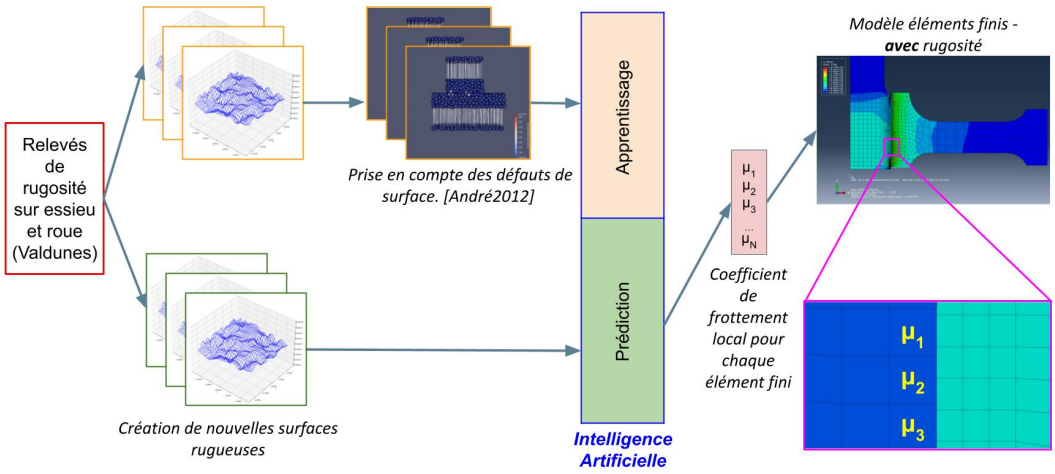


Figure 2.1 – Méthodologie pour la prise en compte de la rugosité

La stratégie multi-échelles se décompose en deux étapes. Tout d'abord une modélisation basée sur la DEM est réalisée pour modéliser les défauts de surface

(échelle microscopique). Dans un second temps, les résultats issus de la DEM sont injectés dans un calcul par éléments finis (échelle macroscopique) considérant implicitement les défauts. À la vue de la grande diversité des défauts de surface (taille, dispersion, hauteur, etc.) que l'on peut obtenir, un grande nombre de simulations DEM est proposé, couplé à une architecture de deep learning. Le lien entre les deux échelles se fait par le transfert du coefficient de frottement obtenu par l'IA qui est réinjecté au sein du calcul FEM dans l'opération de calage. La méthodologie est résumée dans la figure 2.1.

2.1 Échelle macroscopique

Dans Hendrycks, 2023, la simulation macroscopique de l'opération de calage de la roue est réalisée via la méthode des éléments finis, comme montré sur la figure 2.2. Le modèle est axisymétrique et contient une surface rigide correspondant à la presse, et deux pièces avec le même axe de révolution : la roue et l'essieu. Un déplacement à vitesse constante est imposé sur la presse en contact avec la roue, afin de la glisser le long de l'essieu et de la positionner. Le serrage (différence entre le rayon externe de l'essieu et le rayon interne de la roue) est d'environ 0.3 mm et un coefficient de frottement global de 0.11 est imposé entre la roue et l'essieu.

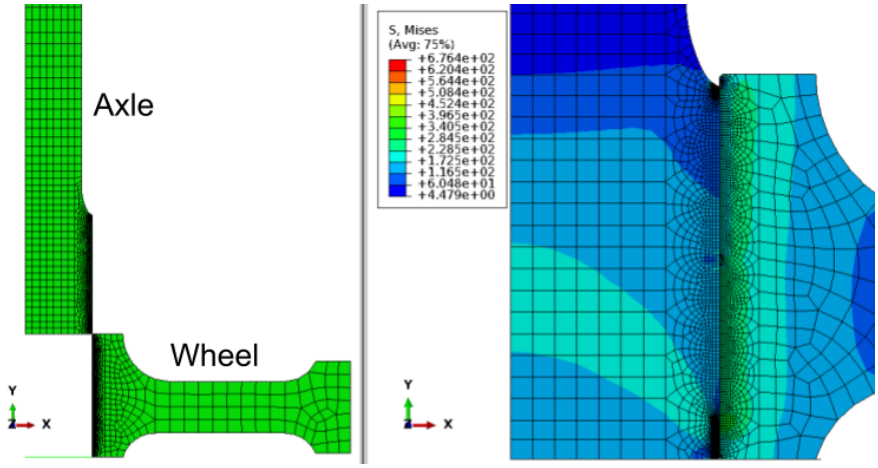


Figure 2.2 – Modèle éléments finis de l'opération de calage de la roue sur l'essieu

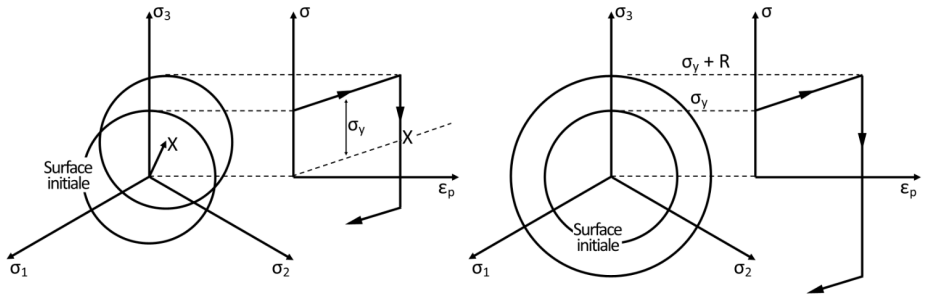
Les matériaux utilisés sont identiques à ceux du modèle de Hendrycks. Pour l'essieu, il s'agit de l'acier EA1n qui est un acier de type XC38 caractérisé en traction monotone par Yameogo, 2004 et Baudoin, 2015. Afin de prendre en compte la réponse monotone et cyclique du matériau, un modèle de Chaboche (Lemaitre et al., 2020) est utilisé pour considérer l'écrouissage cinématique et isotrope.

Pour cela, une fonction de charge f est définie, de telle sorte que le domaine élastique soit représenté par $f < 0$ et que la surface seuil de plasticité soit obtenue avec $f = 0$. Le domaine d'élasticité étant amené à changer pendant l'opération, comme illustré dans la figure 2.3, deux variables sont définies : la variable tensorielle X qui spécifie la position du domaine élastique, et la variable scalaire R qui détermine la variation de sa taille. Le critère de plasticité peut alors écrire sous la forme suivante :

$$f = J_2(\sigma - X) - R - \sigma_y \tag{2.1}$$

avec :

— J_2 : la norme correspondant au critère de von Mises ;
— σ_y : la limite d'élasticité initiale en traction.



(a) (b)

Figure 2.3 – Représentation de l'écrouissage (a) cinématique et (b) isotrope en traction-compression dans l'espace des contraintes, selon Hendrycks

Ainsi, d'une part pour modéliser l'écrouissage cinématique, un modèle superposant plusieurs variables cinématiques indépendantes est utilisé (2.2), et d'autre part un second modèle similaire est employé pour modéliser l'écrouissage

isotrope (2.3) :

$$\begin{aligned} X &= \sum_i X_i, \\ \dot{X}_i &= \frac{2}{3} C_i \dot{\epsilon}^p - \gamma_i X_i \dot{p}, \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\begin{aligned} R &= \sum_i R_i, \\ \dot{R}_i &= b_i (R_{\infty_i} - R_i) \dot{p}, \end{aligned} \tag{2.3}$$

avec :

- $p = \int \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon}^p(\tau) : \dot{\epsilon}^p(\tau)} d\tau$: la déformation plastique cumulée ;
- C_i : le module tangent initial de l'écrouissage i ;
- γ_i : le terme de rappel dynamique de l'écrouissage i ;
- R_{∞_i} : la valeur asymptotique de la variable d'écrouissage isotrope R_i ;
- b_i : terme définissant la rapidité de stabilisation de la variable d'écrouissage isotrope R_i ;
- $\dot{u}$: la dérivée temporelle de u.

Les paramètres identifiés par Hendrycks sont ainsi donnés dans le tableau 2.1.

Domaine élastique			
E [MPa]		σ_y [MPa]	
203000		200	
Ecrouissage isotrope			
R_{∞_1} [MPa]	b_1	R_{∞_2} [MPa]	b_2
-286	91,1	286	25,6
Ecrouissage cinématique			
C_1 [MPa]	γ_1	C_2 [MPa]	γ_2
162400	1279	20553	71,1

Tableau 2.1 – Paramètres matériaux identifiés pour l'acier EA1N, selon Hendrycks

Enfin, pour la roue, il s'agit d'un acier ER7, dont le comportement est simulé par un modèle élasto-plastique d'Armstrong-Frederick, caractérisé par Langueh et al., 2013, et dont les paramètres identifiés sont donnés dans le tableau 2.2.

E [MPa]	σ_y [MPa]	C [MPa]	γ
208550	296	128900	276

Tableau 2.2 – Paramètres matériaux identifiés pour l'acier ER7, selon Langueh

2.2 Echelle mésoscopique

2.2.1 Génération des surfaces rugueuses

La création des domaines compacts passe par trois étapes :

1. La création d'un fichier .off qui définit les surfaces géométriques de l'objet 3D à l'aide de sommets et de polygones. Cela correspond à la « boîte » qui contient les éléments discrets ;
2. La création d'un fichier .offset qui répartit certains polygones du fichier .off en groupes. Ces groupes permettent ainsi de nommer les faces du modèle (exemple : xMin, xMax, yMin, etc.), ce qui est utile dans la simulation pour définir les conditions aux limites et pour extraire les résultats ;
3. L'utilisation des deux fichiers précédents dans l'outil « Cooker », intégré au logiciel GranOO, qui permet de créer des domaines discrets 3D. L'outil utilise l'enveloppe géométrique définie dans le fichier .off, et la remplit d'éléments discrets avec un rayon et une position spatiale aléatoires. Ces éléments discrets sont ensuite répartis selon les groupes définis dans le fichier .offset.

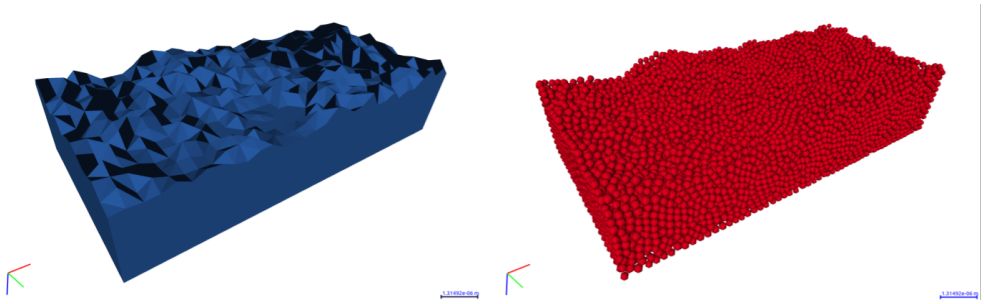


Figure 2.4 – Exemple de maillage surfacique par l'algorithme *Diamond-Square* et domaine compact associé. Dimensions du domaine : 2mm x 1mm x 0.4mm

La génération de la rugosité intervient au moment de la création du fichier .off à travers un algorithme *Diamond-Square* (Fournier et al., 1982 ; Miller, 1986), une méthode permettant de réaliser des terrains fractals (Jürgens et Saupe, 2006). Elle consiste à définir une matrice carrée de taille $2^n + 1$ avec n entier. Les quatre coins de la matrice sont initialisés avec une valeur aléatoire comprise dans un intervalle $[a; b]$. Dans notre cas, nous choisissons l'intervalle $[-\frac{R}{2}; \frac{R}{2}]$ avec R la hauteur maximale de défaut relevée sur les essieux et les roues, afin d'obtenir un intervalle de taille R. On parcourt ensuite la matrice en alternant les phases « diamant » et « carré », avant de diviser le pas par 2 pour continuer le remplissage de la matrice :

1. Diamant : on affecte au centre de chaque carré la moyenne des 4 points formant le carré et on y additionne une valeur aléatoire ;
2. Carré : on affecte au centre de chaque losange la moyenne des 4 points formant le losange et on y additionne une valeur aléatoire ;
3. Itération : on divise le pas par deux et on recommence à partir de l'étape du Diamant.

Une fois la matrice entièrement remplie, l'algorithme s'arrête.

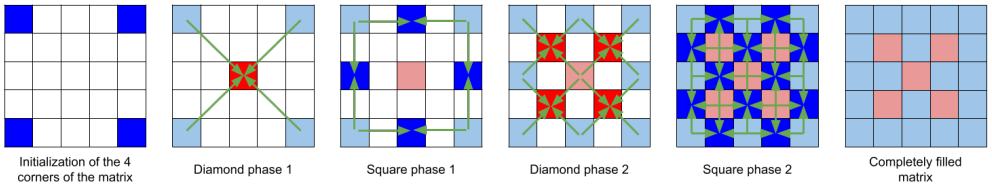


Figure 2.5 – Étapes de l'algorithme *Diamond-Square*

L'emplacement de la composante dans la matrice correspond ainsi à la position (x_c, y_c) de la surface, sachant que les points sont tous uniformément répartis selon les deux directions x et y, et la valeur de la composante correspond à la hauteur du point associé. On utilise cet algorithme à deux reprises pour obtenir deux nuages de points : un pour la roue et un pour l'essieu.

À partir d'un nuage de points, il est possible de générer un maillage surfacique passant par l'intégralité de ces points. Pour cela, il suffit de définir des facettes triangulaires dont les sommets sont les points issus de l'algorithme

Diamond-Square. En procédant ainsi avec l'ensemble des points, et avec les deux nuages de points, nous obtenons deux maillages surfaciques sous la forme de deux boîtes, dont l'une des faces est la surface rugueuse. De plus, en faisant varier le paramètre *n* dans l'algorithme *Diamond-Square*, il est possible d'obtenir plus ou moins de défauts dans les surfaces rugueuses.

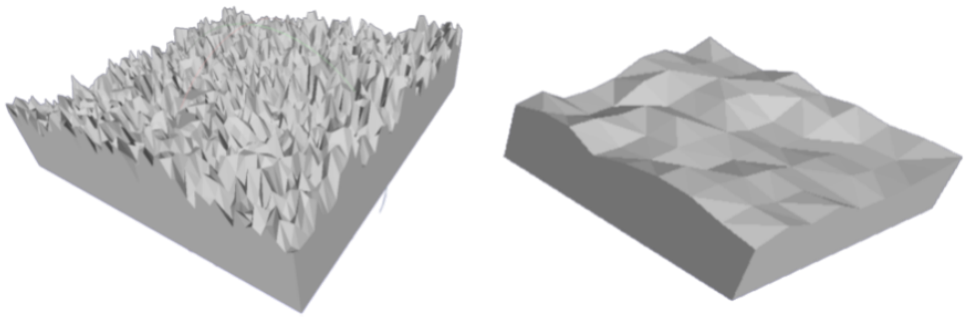


FIGURE 2.6 – Exemples de maillage surfacique. Gauche : n = 5 | Droite : n = 3

Les deux maillages surfaciques sont introduits dans l'outil Cooker pour les remplir d'éléments discrets. Ces derniers sont ensuite appairés aux DE voisins afin de mettre en place leur interaction. Ce sont ces agglomérats de particules qui constituent les deux domaines discrets.

2.2.2 Calibration des paramètres microscopiques

Afin de retrouver le comportement du matériau dans notre modélisation, il est nécessaire de quantifier les lois d'interactions reliant les éléments discrets entre eux, via la calibration de paramètres dits microscopique. Dans notre cas, les éléments sont reliés par des poutres cylindriques de type Bernoulli, permettant ainsi de décrire la géométrie de la poutre avec uniquement deux paramètres : la longueur de la poutre, qui est calculée automatiquement par le logiciel, et le rayon de la poutre, qui est à définir dans GranOO via un autre paramètre, le rayon adimensionné :

$$\tilde{r_\mu} = \frac{r_\mu}{(r_1 + r_2)/2} \tag{2.4}$$

avec :

— $\tilde{r_\mu}$, le rayon adimensionné de la poutre cohésive ;
— r_1, le rayon du premier élément ;
— r_2, le rayon du second élément ;
— r_μ, le rayon de la poutre.

Les paramètres mécaniques sont quant à eux définis par le module de Young, le coefficient de Poisson et la limite de rupture à échelle microscopique.

L'objectif est donc de déterminer les paramètres microscopiques permettant de restituer le même comportement macroscopique dans la simulation que celui obtenu expérimentalement. La méthode proposée et utilisée par André et al., 2012 consiste à mettre en œuvre un essai numérique de traction quasi statique.

En raison de la géométrie simple des domaines, nous pouvons déterminer à l'aide des relations 2.5 (loi de Hooke simplifié) et 2.6 les valeurs macroscopiques du module de Young et du coefficient de Poisson du modèle DEM.

$$E = \frac{\frac{F}{S}}{\frac{\Delta L}{L}} = \frac{\sigma}{\epsilon} \tag{2.5}$$

$$\nu = -\frac{\epsilon_t}{\epsilon_l} \tag{2.6}$$

avec :

— E le module de Young en MPa ;
— σ la contrainte imposée en MPa ;
— ϵ la déformation ;
— F l'effort en N ;
— S la section en mm^2 ;
— ΔL l'allongement en mm ;
— L la longueur initiale du domaine en mm ;
— ν le coefficient de Poisson ;
— ϵ_t la déformation radiale ;
— ϵ_l la déformation longitudinale.

En étudiant l'impact de chaque paramètre microscopique sur les paramètres macroscopique, il est possible d'élaborer une stratégie pour calibrer les paramètres numériques. Les résultats obtenus par André ont été retrouvés dans notre

étude, et sont visibles dans les figures 2.7 et 2.8.

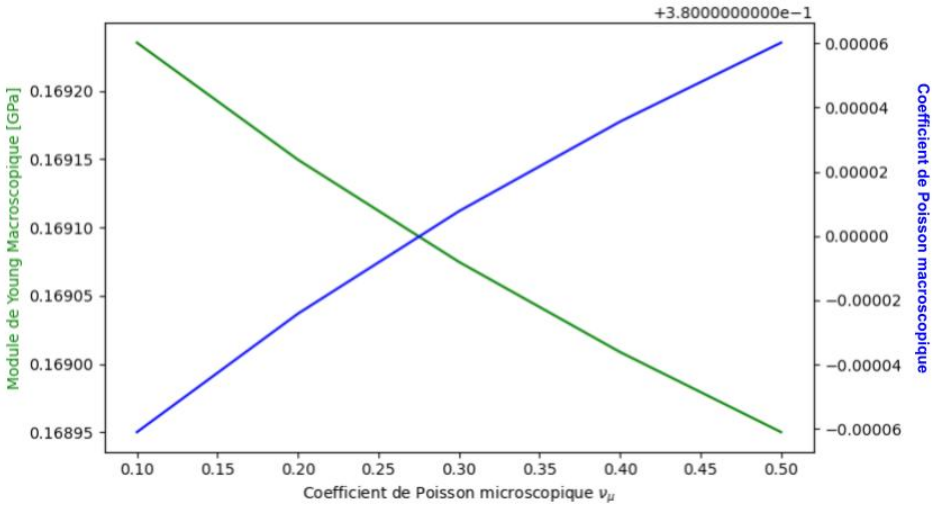


FIGURE 2.7 – Influence du coefficient de Poisson microscopique ν_μ sur les paramètres macroscopiques

Le graphe 2.7 montre l'impact de la variation du coefficient de Poisson microscopique ν_μ sur le module de Young macroscopique E_M et sur le coefficient de Poisson macroscopique ν_M. Pour une variation de ν_μ de 0.1 à 0.5, le coefficient de Poisson macroscopique ν_M n'augmente que de 0.03%, et le module de Young macroscopique E_M augmente uniquement de 0.17%.

ν_μ	0.1	0.5	Différence
ν_M	0.37994	0.38006	0.03%
E_M	0.16895 GPa	0.16923 GPa	0.17%

TABLEAU 2.3 – Influence du coefficient de Poisson microscopique ν_μ sur les paramètres macroscopiques

Cela se justifie simplement via la loi de comportement de la liaison cohésive de type poutre. Cette dernière nous informe que le coefficient de Poisson microscopique n'est important que dans la sollicitation de torsion, à travers le module de cisaillement :

$$G_\nu = \frac{E_\mu}{2(1+\nu_\mu)} \tag{2.7}$$

Cependant, les poutres des liaisons cohésives travaillant très peu en torsion

vis-à-vis de la traction/compression dans un modèle éléments discrets, le coefficient de Poisson microscopique n'a que peu d'influence sur le comportement macroscopique du modèle. Nous imposons alors, de façon arbitraire, la valeur $\nu_\mu = 0.3$ au coefficient de Poisson microscopique, soit la valeur du coefficient de Poisson de l'acier.

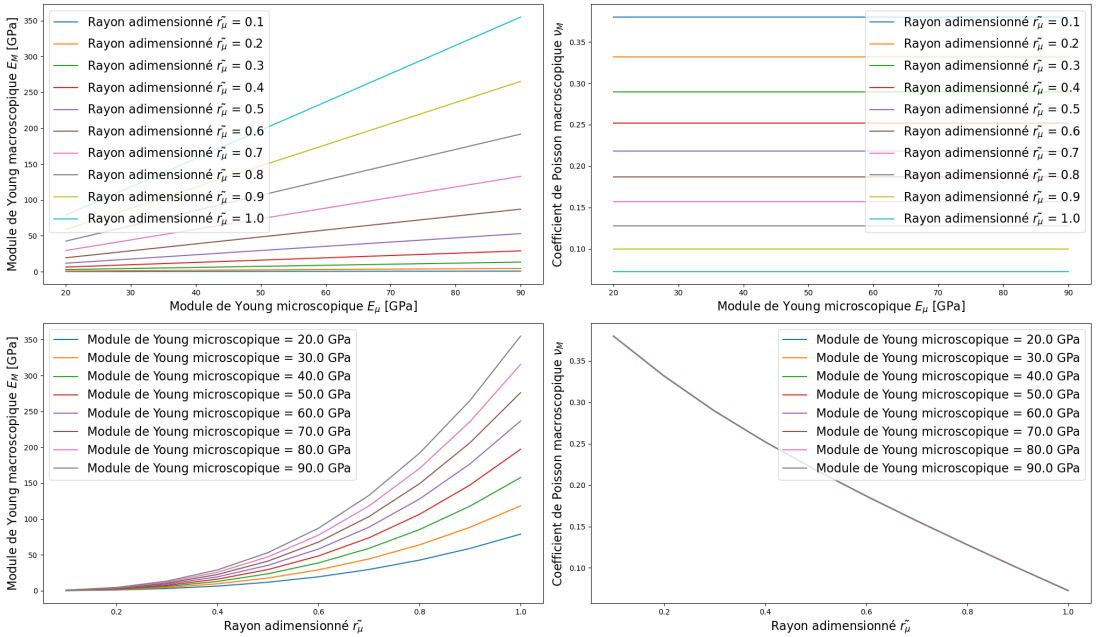


FIGURE 2.8 – Influence des paramètres microscopiques sur les paramètres macroscopiques

Ensuite, les graphes de la figure 2.8 montrent l'influence de chacun des deux paramètres microscopiques restants :

— Dans la première ligne, nous nous intéressons d'abord à l'influence du module de Young microscopique E_μ sur le module de Young macroscopique E_M (graphique de gauche) et sur le coefficient de Poisson macroscopique ν_M (graphique de droite), et ce pour plusieurs valeurs de rayon adimensionné $\tilde{r_\mu}$.

— De façon analogue, nous étudions l'impact du rayon adimensionné pour plusieurs valeurs de module de Young microscopique.

Les résultats montrent que le module de Young microscopique E_μ n'influe pas sur la valeur du coefficient de Poisson macroscopique ν_M. Il est donc possible de

calibrer la valeur de E_μ sans que cela n'ait d'impact sur ν_M.

La méthode proposée par André pour la calibration des paramètres est la suivante :

1. Fixation arbitraire du coefficient de Poisson microscopique ν_m à 0.3 ;
2. Calibration du rayon adimensionné microscopique $\tilde{r_\mu}$ par le coefficient de Poisson macroscopique ν_M ;
3. Calibration du module de Young microscopique Em par le module de Young macrocopique E_M.

Dans le but de modéliser correctement le comportement dynamique du matériau, il reste à déterminer la masse volumique, sachant que la masse est concentrée dans les éléments discrets. En raison de la sphéricité des éléments discrets, des zones vides sont présentes dans les domaines. La méthode consiste alors à augmenter la masse volumique pour compenser ces vides. Cela permet d'avoir la même masse entre le domaine réel continu et le domaine numérique discret. La masse volumique est donnée par la relation suivante :

$$\rho_\mu = \frac{\rho_M V_M}{\sum_{i=1}^{N} V_{\mu_i}} = \frac{\rho_M}{f} \tag{2.8}$$

avec :

— ρ_μ, la masse volumique des éléments discrets ;
— V_{μ_i}, le volume de l'élément discret i ;
— ρ_M, la masse volumique macroscopique du matériau ;
— V_M, le volume de la géométrie globale ;
— f, la fraction volumique (≈ 0.64).

2.2.3 Adaptation des conditions limites

Les calculs par éléments discrets sont effectués en dynamique explicite avec des pas de temps très courts. Ils sont extrêmement gourmands en ressources informatiques et il est nécessaire de limiter le nombre de particules pour que les calculs ne prennent pas trop de temps. Afin d'avoir suffisamment de particules

en contact, nous avons choisi des géométries élancées (amas de particules rouges et bleues sur la figure 2.9). Ces géométries fines induisent une anisotropie qui complique l'identification des paramètres microscopiques puisque ceux-ci correspondent à des matériaux isotropes. Par ailleurs, un pilotage de la simulation par des déplacements imposés sur les faces supérieure et inférieure correspondant à un écrasement suivi d'un glissement induit une sur-rigidification qui vient perturber les contacts trop proches de ces faces. Nous proposons donc de restituer la « souplesse radiale » de l'essieu et des roues par un ajout simulé de matière.

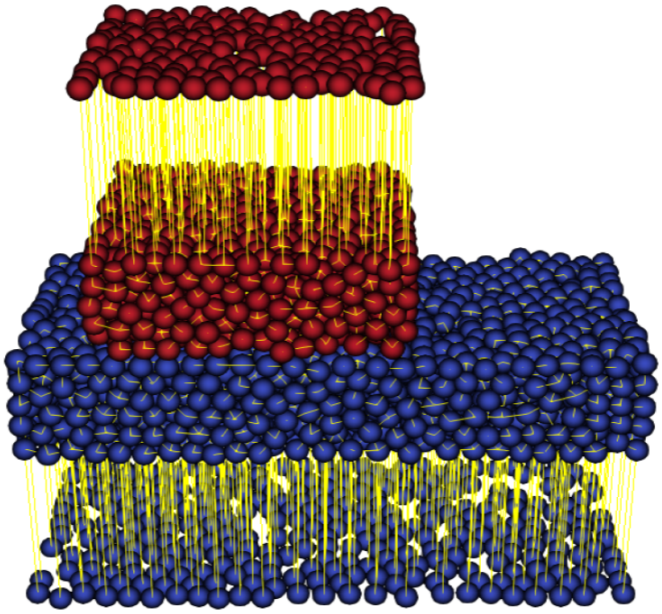


FIGURE 2.9 – Nouveaux domaines (ajout d'éléments)

Pour ce faire, les déplacements imposés sont appliqués sur des couches de particules déportées, appellées « faces externes » et reliées au reste du domaine par des poutres parallèles (poutres en jaune sur la figure 2.9) dont la rigidité est ajustée pour restituer la souplesse du système et pour être représentatif du comportement global.

Si les poutres au sein des deux plaques nécessitaient de modéliser un essai de traction et de procéder par dichotomie pour déterminer les paramètres microscopique (nécessitant alors un grand temps de calcul), ici il est possible de

calculer directement de façon analytique le rayon et le module de Young des nouvelles poutres.

Concernant leur rayon, il est décidé de reprendre le rayon des éléments discrets afin d'empêcher la rotation des nouvelles poutres pendant la simulation.

Pour leur module de Young, on procède par analogie entre un domaine cubique fait d'acier et de volume $V = L^3 = 1mm^3$, et le domaine constitué d'éléments discrets. On considère que le domaine cubique peut être modélisé comme deux ressorts équivalents K_{11} et K_{12} mis en série, et que le modèle éléments discrets peut également être divisé en deux ressorts équivalents K_{21} et K_{22} associés en série (Newton, 1687 ; Routh, 1860), voir la figure 2.10. Les ressorts de raideurs K_{11} et K_{21} ont pour longueur H, c'est-à-dire l'épaisseur de la plaque constituée d'éléments discrets, et les deux autres ressorts ont pour longueur $L - H$.

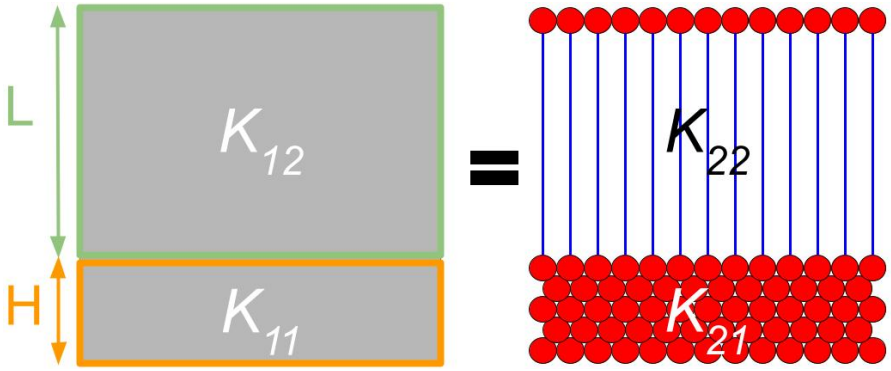


Figure 2.10 – Analogie entre domaine réel et domaine éléments discrets

Ainsi, dans le but de modéliser correctement le domaine cubique par des ressorts en série, nous devons avoir l'égalité suivante :

$$\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{12}} = \frac{1}{K_{21}} + \frac{1}{K_{22}} \tag{2.9}$$

Les essais de tractions réalisées précédemment ont permis de modéliser une plaque d'épaisseur H et de section carrée de côté L. Cela nous a ainsi permis d'obtenir la relation suivante :

$$K_{11} = K_{21} \tag{2.10}$$

À partir de (2.9) et (2.10), nous pouvons affirmer que les nouvelles poutres chercheront à modéliser la raideur de la partie supérieure du domaine réel, c'est-à-dire que $K_{12} = K_{22}$. D'un côté nous avons la raideur du domaine volumique qui peut être déterminée par la relation :

$$K_{12} = \frac{E_M V}{S} = \frac{E_M L^2 (L-H)}{L^2} = E_M (L-H) \tag{2.11}$$

avec :

— E_M, le module de Young du matériau considéré ;
— V, le volume du domaine ;
— S, la section.

De l'autre côté, en supposant que toutes les poutres ont le même module de Young, nous avons le ressort de raideur K_{22} qui correspond à l'association en parallèle de N ressorts de raideur k, et qui vaut :

$$K_{22} = \sum_{i=1}^{N} k = N \frac{E_m S}{l} = N \frac{E_m \pi R^2}{L-H} \tag{2.12}$$

avec :

— E_m, le module de Young d'une poutre ;
— l, la longueur de la poutre ;
— S, la section de la poutre ;
— R, le rayon de la poutre.

En utilisant l'égalité 2.10 et les expressions des deux termes 2.11 et 2.12 , nous pouvons isoler E_m pour le déterminer :

$$E_m = \frac{E_M (L-H)^2}{N \pi R^2} \tag{2.13}$$

Un dernier paramètre doit être fourni : le coefficient de frottement microscopique qui modélise l'interaction entre les particules en contact. Cette valeur est calibrée pour que la force tangentielle obtenue expérimentalement puisse être retrouvée dans le modèle éléments finis. Nous imposons pour le moment une valeur arbitraire de 0.1 avant de la calibrer numériquement par la suite.

2.2.4 Modélisation de l'usure

Actuellement, avec GranOO, il n'est possible de ne modéliser que des domaines purement élastiques ou présentant une plasticité parfaite, ce qui n'est pas parfaitement représentatif de la réalité (génération d'un débit source en fonction de l'avancée de la roue sur l'essieu). Il est tout de même possible d'introduire un critère de rupture au niveau des liaisons, soit en élongation, soit en contrainte. Néanmoins, l'ajout de la rupture est très coûteuse en termes de temps, et le critère est difficile à calibrer pour du débit source dû au contact.

L'usure est alors introduite d'une autre façon. En supposant que l'usure sur un déplacement unique de 1 mm est négligeable, il est possible de garder des poutres élastiques. En revanche, à mesure que la roue avance le long de l'essieu, les domaines compacts correspondants sont générés de telle sorte que la rugosité maximale diminue. Ainsi, les domaines modélisant le début du contact auront des défauts plus prononcés (rugosités plus élevées) que ceux correspondant à la fin du contact. L'évolution des surfaces de contact pendant l'opération ne pouvant être obtenue, l'évolution de la rugosité maximale sera paramétrée afin d'étudier son influence dans le modèle éléments finis.

2.2.5 Post-traitement

Une fois le modèle DEM calibré, des simulations peuvent être effectuées. Le déplacement est imposé sur les faces externes. L'axe de révolution de l'essieu est encastré, et le déplacement de la roue est composé de deux parties : la première partie de la simulation consiste à mettre la roue en contact avec l'axe et à imposer un écrasement cohérent avec le dimensionnement de l'assemblage, alors que la seconde partie modélise le mouvement de la roue le long de l'axe.

Parmi les sorties possibles, la simulation fournit les forces résultantes sur les faces externes. En prenant le rapport de ces parties tangentielles et normales, on peut évaluer un coefficient de frottement mésoscopique au cours de la simulation, comme le montre la Figure 2.11 où le coefficient de frottement microscopique est également tracé. Les résultats ont été obtenus avec une rusosité maximale de 1.10^{-4}mm pour la roue et 3.10^{-5}mm pour l'essieu. La vitesse de glissement n'a

pas d'impact sur le coefficient de frottement car la loi de frottement choisie est indépendante du temps (pas de phénomènes d'amortissement ni d'adhérence). L'incrément de temps global est simplement calculé sur la base du pas de temps optimal (déterminé automatiquement par le logiciel pour que la condition de Courant soit satisfaite), du nombre d'itérations (choisi suffisamment grand pour permettre une convergence numérique suffisante) et de la distance de glissement, qui est d'un millimètre (taille de l'élément fini au niveau du contact).

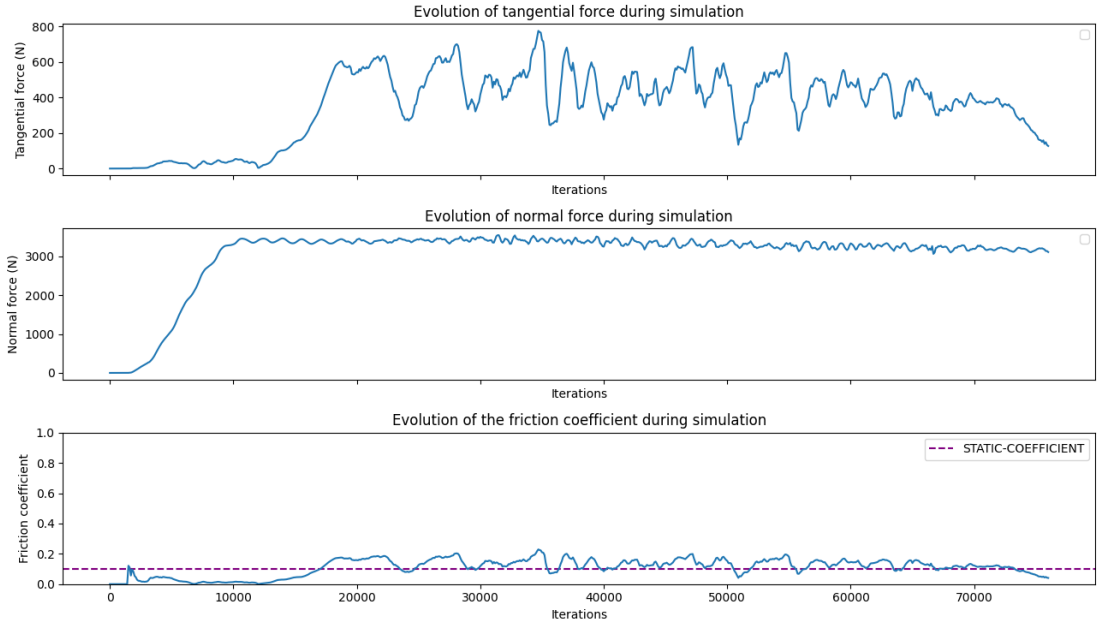


FIGURE 2.11 – Évolution des efforts normal et tangentiel, et du coefficient de frottement global

Au cours de l'étape d'écrasement, on observe une augmentation presque linéaire des forces normales et tangentielles, correspondant à l'élargissement de la zone de contact entre la roue et l'essieu. Dans la deuxième partie, la force normale globale reste relativement constante en raison du serrage constant entre les deux plaques. Cependant, la force tangentielle présente plusieurs pics, correspondant aux interactions entre les éléments sur l'essieu et sur la roue. Les variations les plus faibles correspondent à la rencontre de deux éléments, tandis que les plus importantes résultent de l'accumulation de plusieurs pics et correspondent à la rencontre de deux rugosités composées de plusieurs éléments discrets. Dans

ces cas là, le coefficient de frottement observé peut significativement dépasser le coefficient microscopique.

2.3 Influence de la rugosité

Une fois le modèle prêt, un grand nombre de domaines sont générés pour modéliser le frottement des surfaces rugueuses. Afin de visualiser la variabilité du coefficient de frottement due aux surfaces initiales, l'évolution du coefficient pour 3 modèles différentes est tracée sur la figure 2.12.

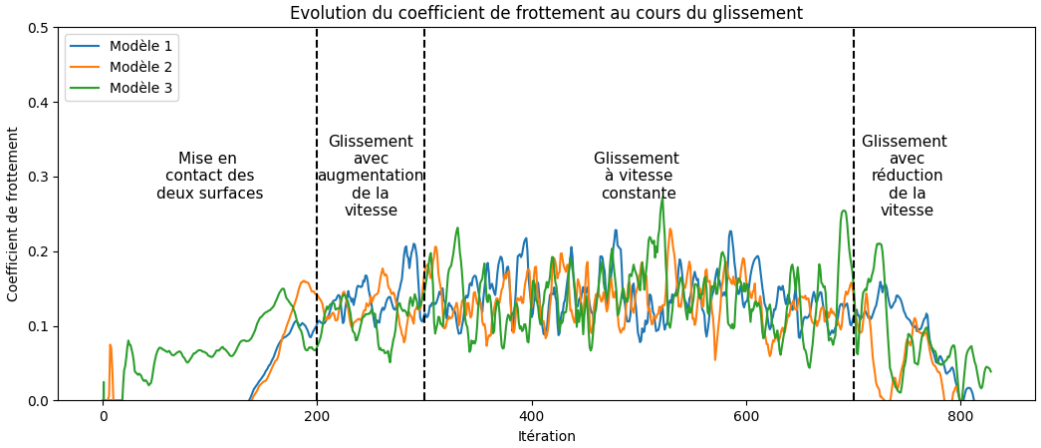


FIGURE 2.12 – Évolution du coefficient de frottement au cours du glissement pour 3 modèles différents

Les 3 modèles présentés ici contiennent des surfaces ayant la même valeur de rugosité maximale (1.10^{-4}mm pour la roue et 3.10^{-5}mm pour l'essieu), le même comportement élastique macroscopique, et la même valeur de coefficient de frottement microscopique (0.1). On observe une valeur moyenne relativement proche pour les 3 modèles, mais des évolutions totalement différentes du coefficient de frottement. De plus, en fonction de la topologie des surfaces, le début du contact entre celles-ci ne démarre pas au même instant dans la simulation. Afin de s'assurer que les coefficients de frottement utilisés pour l'apprentissage de l'IA et pour l'enrichissement du modèle macro soient comparables entre les différents modèles, ceux-ci sont uniquement extraits dans l'intervalle de temps

où la mise en contact est terminée, et où le glissement de la plaque supérieure se fait à vitesse constante (à partir de l'itération 300 jusqu'à l'itération 700 sur la figure).

Au vu de la grande diversité de coefficients déjà obtenus pour uniquement trois modèles, du fait que la simulation s'intéresse à une zone de 1mm uniquement (contre plus de 190mm pour la portée de calage entière de l'essieu) et le temps de calcul important du modèle élément discrets, la généralisation des résultats à l'aide d'un modèle d'intelligence artificielle paraît être nécessaire. Un programme Python a alors été développé afin d'automatiser l'ensemble des étapes décrites précédemment (algorithme Diamond-Square, création des surfaces et des domaines discrets, calibration, création des éléments distants, simulation de frottement et traitement des résultats) et ainsi faciliter la création de la base de données.

2.4 Conclusions

Ce chapitre a permis de développer un modèle multi-échelle de contact visant à mieux comprendre les paramètres clés de l'opération de calage des roues sur les essieux. L'approche adoptée, combinant des simulations éléments discrets (DEM) pour modéliser les rugosités des surfaces en contact et l'intégration de ces résultats dans un modèle éléments finis (FEM) au travers différents coefficients de frottement locaux, offre une compréhension fine des forces normales et tangentielle agissant lors du processus. Ces calculs DEM, bien que coûteux en temps et en ressources de calcul, permettent de mieux capturer l'évolution de la rugosité et son impact sur le coefficient de frottement. L'usure des surfaces, introduite de manière itérative, a été prise en compte dans la démarche, bien que des optimisations soient encore nécessaires pour améliorer l'efficacité de la simulation. Afin de pallier ces défis computationnels, un modèle d'intelligence artificielle a été développé dans le but de généraliser les résultats et d'accélérer la prédiction du coefficient de frottement à partir des caractéristiques des surfaces en contact. Ce modèle sera enrichi dans les chapitres suivants pour répondre aux besoins industriels d'une modélisation plus rapide et plus fiable du processus de calage.

Chapitre 3

Généralisation des résultats en frottement et enrichissement du modèle éléments finis

Sommaire du présent chapitre

3.1 Prédiction du coefficient de frottement **55**
- 3.1.1 Premier modèle : prédiction directe du frottement . 55
- 3.1.2 Deuxième modèle : prédiction des efforts à partir des surfaces 62
- 3.1.3 Troisième modèle : prédiction à partir des vecteurs normaux de contact 65

3.2 Intégration dans le modèle éléments finis **72**
- 3.2.1 Influence du coefficient de frottement microscopique 73
- 3.2.2 Influence des surfaces en contact 75
- 3.2.3 Influence de l'usure 77

3.3 Conclusions **83**

L'intégralité de la simulation présentée en figure 2.11 nécessite en moyenne 15 heures, et permet d'avoir une information sur le coefficient de frottement sur une surface de $1\,mm^2$ aux différents instants. Étant donné le grand nombre de simulations à réaliser pour compléter l'intégralité de la surface de contact dans la modélisation élément finis, l'utilisation d'une intelligence artificielle paraît nécessaire, plus précisément du *deep learning* pour l'apprentissage automatique. Plusieurs approches et plusieurs modèles associés sont testés jusqu'à obtenir des résultats satisfaisants. Pour cela, nous utilisons la bibliothèque Keras (K. D. Team, 2023) incluse dans TensorFlow (Chollet, 2018 ; T. D. Team, 2023).

3.1 Prédiction du coefficient de frottement

3.1.1 Premier modèle : prédiction directe du frottement

Génération de la base de données

Nous utilisons ici une intelligence artificielle à multi-entrées, pour réaliser une régression à partir d'une convolution 2D. Cette IA doit être capable de prédire à partir de la topologie des deux surfaces rugueuses et du coefficient de frottement microscopique, le coefficient de frottement macroscopique résultant de la friction des deux surfaces. Pour cela, nous devons d'abord générer une base de données suffisamment grande et pertinente pour la phase d'apprentissage de l'IA.

La méthode globale consiste à réaliser un certain nombre de simulations en ayant au préalable généré à chaque fois deux nouveaux domaines. De ces simulations, nous extrayons pour plusieurs itérations les surfaces réelles en contact, et les efforts normal F_N et tangentiel F_T sur toute la surface de contact pour déterminer le coefficient de frottement avec la relation :

$$\mu = \frac{F_t}{F_n} \tag{3.1}$$

Toutes ces données sont ensuite mises sous une forme exploitable par l'IA pour son apprentissage.

Un problème se pose cependant. Si GranOO peut facilement récupérer les efforts au niveau des éléments qui composent les surfaces en contact (il suffit pour cela d'isoler les éléments en question et d'extraire les valeurs de ces derniers), il ne peut en revanche pas reconstruire les surfaces en contact. Nous connaissons effectivement les surfaces initiales, puisque nous les avons construites via l'utilisation de l'algorithme *Diamond-Square*. Mais entre l'effort normal qui est appliqué sur les surfaces, puis le glissement de l'une sur l'autre, les éléments discrets sont amenés à se déplacer, modifiant ainsi les surfaces.

En revanche, GranOO est parfaitement capable de retourner à tout moment de la simulation la position de tout élément discret de la simulation. Nous sommes ainsi en mesure de récupérer la position (x_i, y_i, z_i et le rayon r_i des éléments qui composent les surfaces en contact. Ainsi, nous pouvons reconstruire par interpolation une surface à partir de ce champ de points.

L'interpolation (Press et al., 2007) est une méthode qui consiste à estimer les valeurs d'une variable continue à des emplacements non échantillonnés en utilisant des données discrètes collectées à partir de points d'échantillonnage. On peut utiliser des techniques telles que la méthode des plus proches voisins (Cressie, 1990), les splines (De Boor, 1978) ou encore les méthodes basées sur des fonctions de base radiales (Buhmann, 2003). L'interpolation 2D et 3D permet de créer des représentations continues et lisses de données spatiales, ce qui est essentiel pour la visualisation, l'analyse et la simulation de phénomènes complexes dans le monde réel.

Nous utilisons la fonction `scipy.interpolate.griddata` de Python (SciPy community, 2024), qui est une méthode d'interpolation permettant d'approximer des valeurs pour des points non régulièrement espacés dans un espace multidimensionnel. Elle fonctionne en prenant un ensemble de points de données existants, chacun associé à une valeur, et en créant une interpolation basée sur ces données pour estimer les valeurs manquantes à des emplacements arbitraires. `griddata` offre plusieurs méthodes d'interpolation, y compris la méthode de l'interpolation linéaire, cubique et plus, ce qui permet de choisir la plus appropriée en fonction des caractéristiques des données. En utilisant cette fonction de SciPy, il devient possible de remplir les lacunes dans les données de manière

précise et efficace. Enfin, il est possible de choisir la résolution de l'interpolation, en définissant le nombre de points à évaluer sur la surface.

Ainsi, en fournissant le champ de points obtenus avec GranOO, il est possible de reconstruire les surfaces en contact définies par les éléments discrets. Le résultat de l'interpolation est alors une matrice qu'il est possible de visualiser via la fonction `matplotlib.pyplot` (Hunter, 2007 ; T. M. D. Team, 2023) de python en 2D (en niveau de gris), ou en 3D (cf figure 3.1). Les surfaces sont de forme carrée, et le pas spatial est le même pour la discrétisation selon les deux directions x et y. Nous obtenons ainsi une matrice carrée de taille $m \times m$.

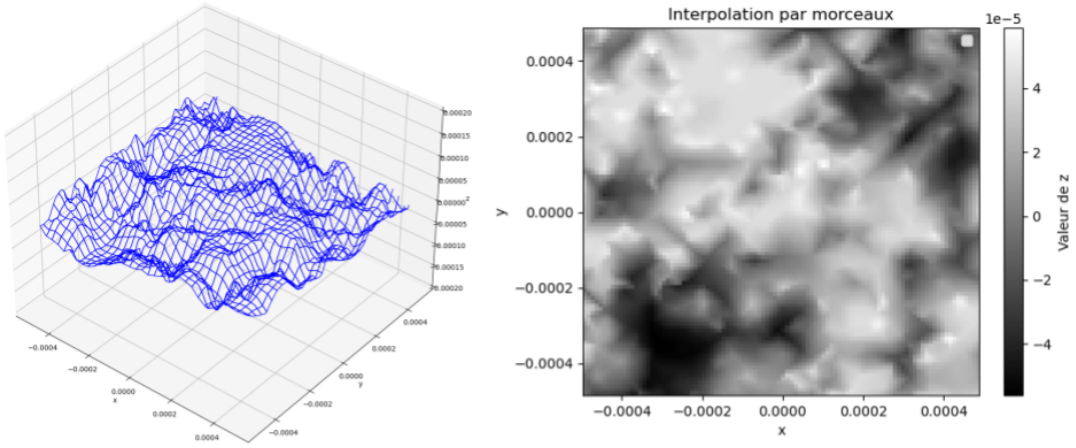


Figure 3.1 – Reconstruction d'une surface via interpolation (visualisation en 3D à gauche et en 2D à droite)

Pour une itération, nous avons donc deux surfaces : une représentant la surface de la roue et l'autre représentante la surface de l'essieu. En bouclant sur l'intégralité des simulations et sur N itérations par simulation, nous pouvons déjà construire nos deux premiers fichiers d'entrée (ou *inputs*) :

— un fichier Surface1.pickle contenant les surfaces extraites de la roue ;
— un fichier Surface2.pickle contenant les surfaces extraites de l'essieu.

Un objet .pickle (Python Software Foundation, 2024) en Python fait référence à un objet sérialisé à l'aide du module intégré pickle. La sérialisation est le processus de conversion d'un objet Python en une séquence d'octets, ce qui permet de le stocker de manière persistante sur le disque ou de le transmettre

sur un réseau. Le module pickle permet de sérialiser des objets Python de manière simple et efficace. Nous pouvons ainsi stocker nos surfaces dans 2 objets pickle pour les transmettre par la suite à l'IA pour son apprentissage.

Le troisième et dernier *input* doit contenir les coefficients de frottement microscopiques, soit celui entre deux éléments discrets, renseignés dans GranOO pour toutes les simulations et qui prend simplement la forme d'un fichier .csv (*Comma Separated Values*).

Enfin, il reste à mettre en forme l'*output*. Celui-ci prend également la forme d'un fichier .csv qui contient le coefficient de frottement macroscopique calculé par GranOO pour les itérations extraites.

Ainsi, en fournissant tous ces fichiers, l'IA peut apprendre à déterminer le coefficient de frottement macroscopique résultant du frottement de deux surfaces données.

Préparation du modèle IA

La figure 3.2 synthétise l'architecture de l'IA. On retrouve les trois entrées (la surface de l'essieu, celle de la roue et le coefficient de frottement microscopique) et en sortie la valeur de coefficient de frottement macroscopique. Cette dernière étant une valeur réelle et évoluant sur un intervalle continu, l'objectif de l'IA est donc de faire une régression.

Sur la couche d'entrée, les 3 *inputs* différents nécessitent de créer 3 branches :

— la branche 1 prend en entrée les surfaces de la roue. On y trouve des couches de convolution 2D pour extraire les informations importantes spatiales et réduire la dimension du problème ;
— la branche 2 prend en entrée les surfaces de l'essieu. De façon identique on y trouve des couches de convolution 2D ;
— la branche 3 prend en entrée les coefficients de frottement microscopiques sous la forme d'un réel v_3.

L'objectif est ensuite de réunir toutes les informations après les convolutions sous la forme d'un vecteur. On ajoute donc à la fin des deux premières branches un couche *flatten* pour convertir les données de sortie des couches de convolution

en deux vecteurs unidimensionnels V_1 et V_2 de taille N_v et dont les composantes seront respectivement notées v_{1i} et v_{2i}.

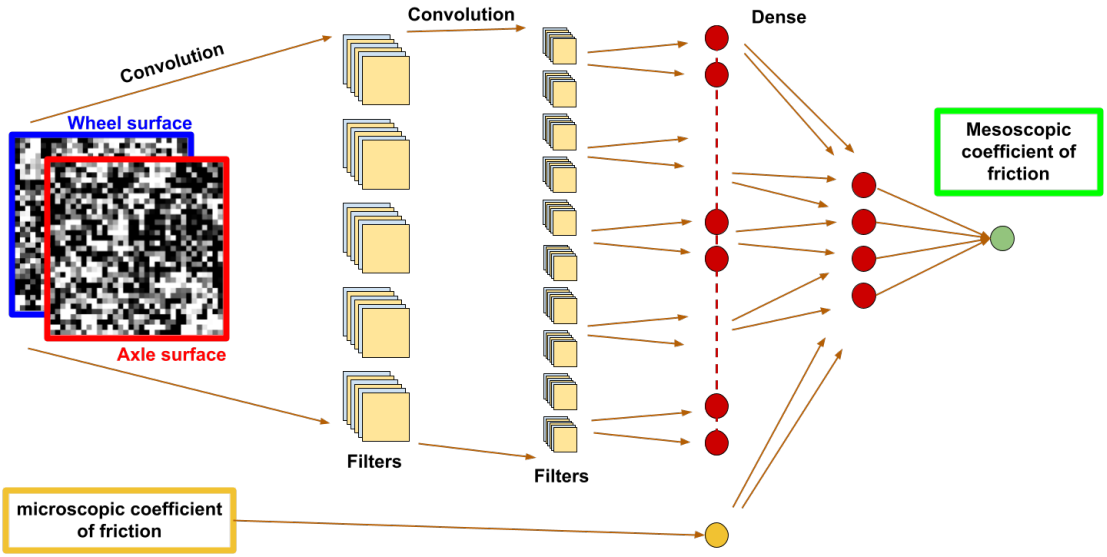


FIGURE 3.2 – Architecture du modèle IA

En concaténant les données avec une couche *merge*, on obtient un vecteur V de taille $2N_v + 1$, ayant pour composantes :

$$v_i = \begin{cases} v_{1,i} & \text{si } i \in [\![1; N_v]\!] \\ v_{2,i-N_v} & \text{si } i \in [\![N_v + 1; 2N_v]\!] \\ v_3 & \text{si } i = 2N_v + 1 \end{cases} \tag{3.2}$$

Enfin, ce vecteur traverse plusieurs couches *dense* composées de neurones. Chaque neurone d'une couche est connecté à tous les autres neurones de la couche précédente et produit une sortie et chaque couche dense contient moins de neurone que la couche précédente. Le but est ainsi de réduire la taille du vecteur, jusqu'à n'obtenir qu'un vecteur de taille 1, c'est à dire un réel, le coefficient de frottement macroscopique déterminé par l'IA.

Validation du modèle

Une fonction de perte est sélectionnée pour évaluer les performances du réseau pendant son fonctionnement. À chaque itération de l'ensemble de données dans le modèle (ou *epoch*), celui-ci s'auto-évalue en mesurant la différence (ou *loss*) entre les résultats prédits et les résultats réels de notre ensemble de données. Cela permet de mieux comprendre le comportement du modèle tout au long du processus d'apprentissage, à la fois sur les ensembles de données d'apprentissage et de validation. L'évolution de la précision au cours de l'apprentissage peut alors être visualisée sous la forme de deux courbes : une courbe d'apprentissage et une courbe de validation. L'objectif est que les courbes diminuent à la même vitesse (signe que le modèle s'améliore aussi bien sur la base de données d'entraînement que sur celle de validation) vers une valeur proche de 0 (c'est-à-dire que l'erreur soit la plus faible possible).

L'apprentissage est ici effectué avec 70% de la base de données, et la validation avec les 30% restants. Les courbes sont tracées dans la figure 3.3. On note premièrement une décroissance globale des deux courbes, mais à des vitesses différentes. De plus, le *loss* final reste encore assez élevé pour les 2 courbes. Nous pouvons ensuite évaluer le modèle en le testant sur une nouvelle base de données que le modèle n'a jamais vu, ni pour l'entraînement, ni pour la validation. La comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles de coefficient de frottement est affichée dans la figure 3.4. On constate ainsi une impossibilité pour le modèle de généraliser correctement la prédiction du coefficient, puisque celui-ci ne parvient même pas à comprendre la tendance du coefficient, c'est-à-dire si ce dernier est plus élevé ou plus faible en fonction des surfaces.

Le coefficient de frottement renseigné en cible pour l'apprentissage de l'IA étant le rapport de deux variables (l'effort tangentiel et l'effort normal), nous proposons une autre méthode consistant à prédire séparément ces deux valeurs, et à en faire le rapport pour déterminer enfin le coefficient.

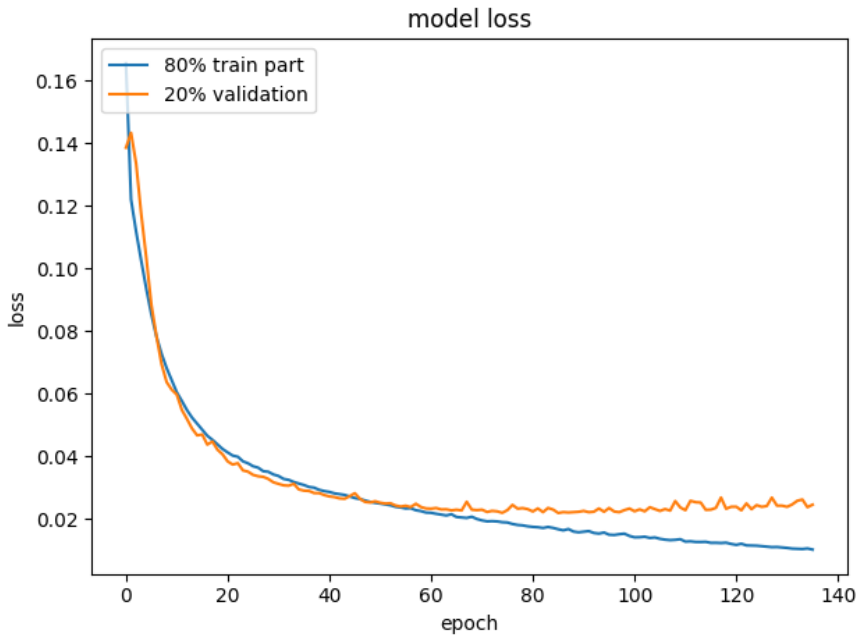


FIGURE 3.3 – Évolution du *loss* pendant l'apprentissage (Modèle 1)

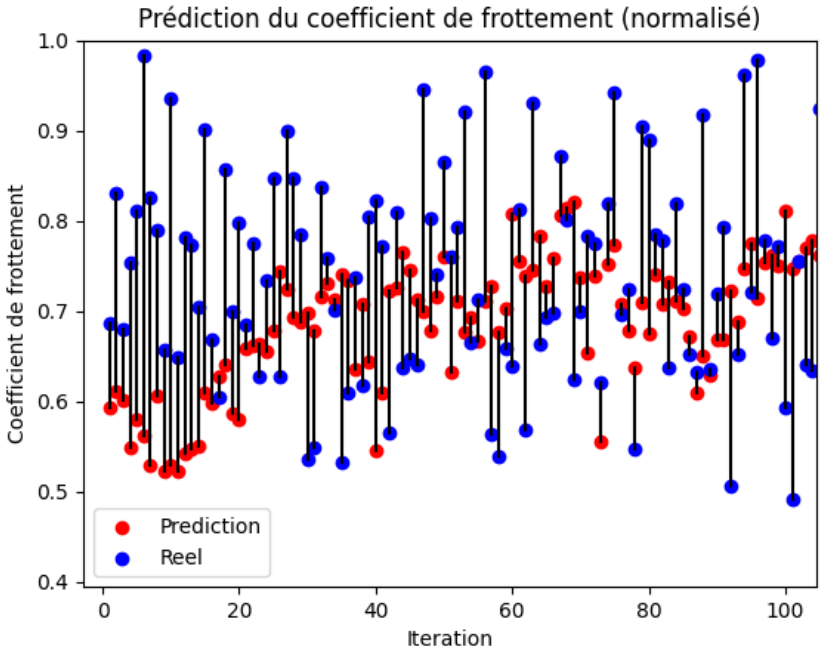


FIGURE 3.4 – Prédiction du coefficient de frottement (Modèle 1)

3.1.2 Deuxième modèle : prédiction des efforts à partir des surfaces

Préparation du modèle

Ce modèle est assez similaire au modèle précédent puisqu'il prend en entrée exactement les mêmes fichiers (surfaces et coefficient de frottement microscopique), mais au lieu de prédire directement le coefficient de frottement mésoscopique, il prédit l'effort normal et l'effort tangentiel, pour ensuite faire le rapport pour déterminer le coefficient. L'architecture du modèle est quasi-identique, seule la couche de sortie change puisqu'elle ne contient pas un, mais deux neurones pour donner l'effort normal et l'effort tangentiel.

Validation du modèle

De nouveau, nous traçons l'évolution du *loss* au cours de l'apprentissage (cf Figure 3.5). Nous pouvons déjà noter une amélioration de celle-ci avec une nette diminution, malgré une valeur finale encore un peu élevée. L'évaluation du modèle se poursuit en le testant sur une nouvelle base de données. Nous comparons les efforts normaux et tangentiels réels avec leur prédiction (Figure 3.6 et 3.7).

Nous constatons premièrement une assez bonne précision sur la prédiction de l'effort normal, avec une erreur moyenne de 10,14%. En revanche, le modèle n'arrive pas à prédire correctement l'effort tangentiel, avec une erreur moyenne d'environ 250%. Étant donné que les fichiers d'entrée pour la prédiction sont identiques pour le modèle 1 et 2, cela explique la difficulté pour le premier modèle à prédire correctement le coefficient de frottement.

Ces résultats montrent la difficulté pour le modèle à comprendre l'aspect tangentiel du problème. Si nous reprenons le problème depuis le début, la variation de l'effort tangentiel dans le modèle numérique peut-être due à 2 raisons : le passage d'une aspérité ou la rencontre de deux éléments discrets. Des questions se posent sur ce dernier point.

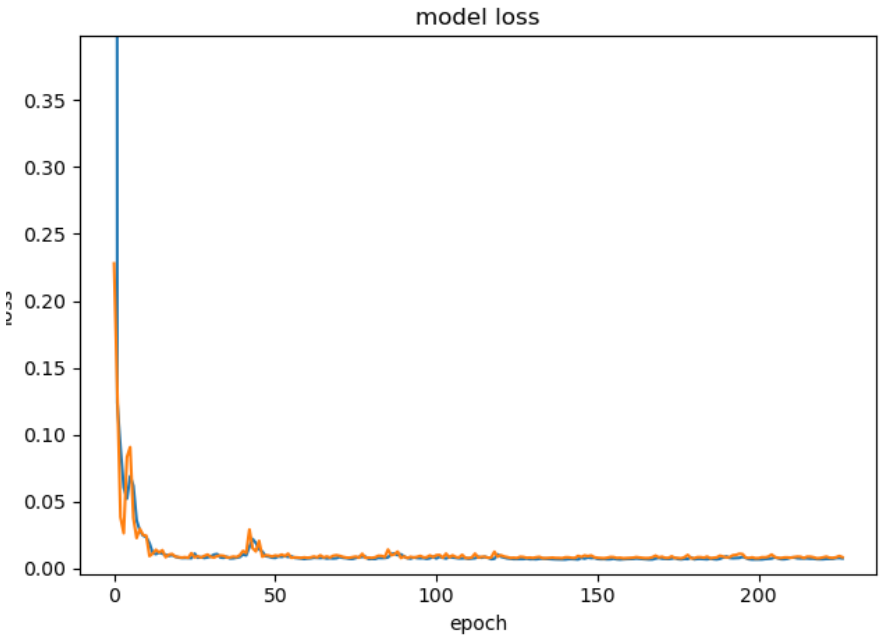


FIGURE 3.5 – Évolution du *loss* pendant l'apprentissage (Modèle 2)

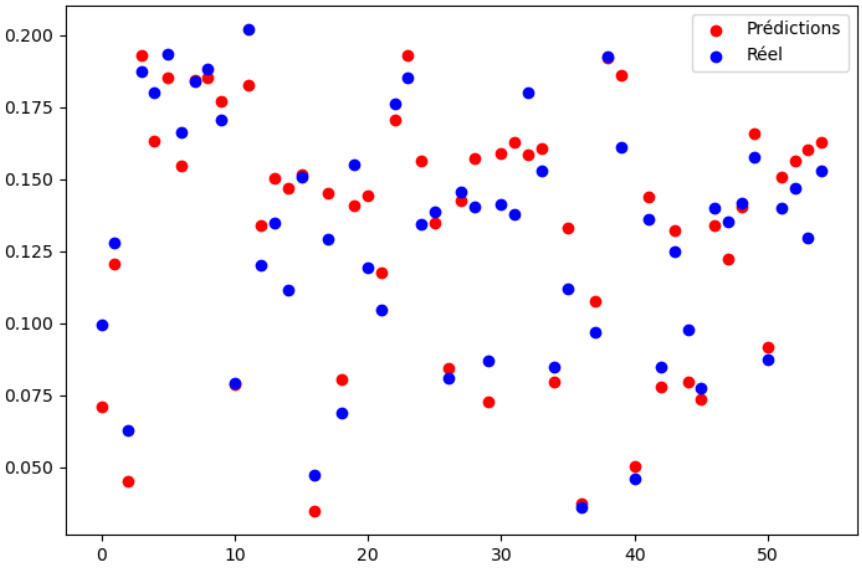


FIGURE 3.6 – Prédiction de l'effort normal (Modèle 2)

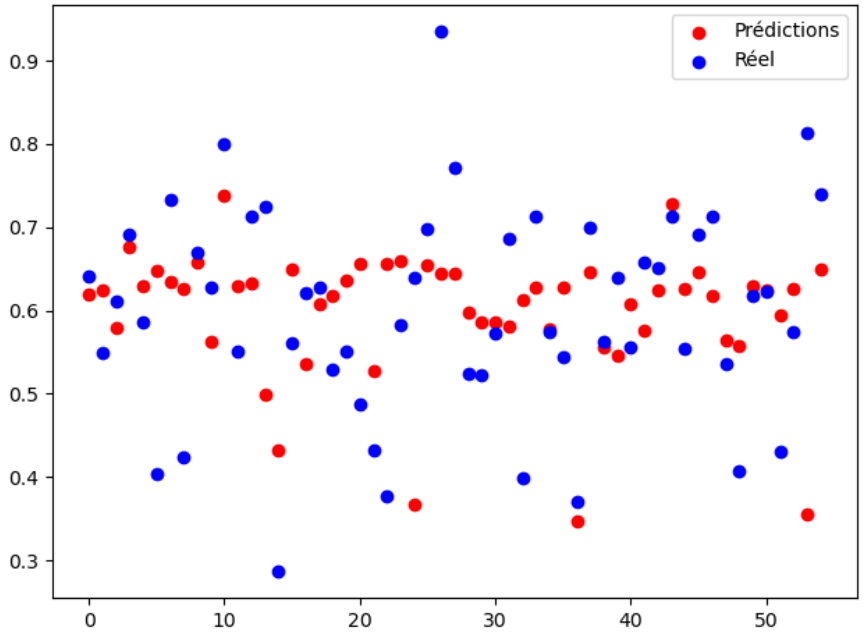


FIGURE 3.7 – Prédiction de l'effort tangentiel (Modèle 2)

L'interpolation pour la création de surfaces se fait à partir des coordonnées du centre de chaque élément. L'interpolation crée des surfaces planes entre deux éléments, et ne prend pas en compte leur forme sphérique, comme illustré dans la figure 3.8. Cependant la géométrie des éléments et leur taille (qui ne peut-être réduite à cause de la durée relativement longue des simulations) engendre des surfaces de contact très irrégulières. L'interpolation provoque alors une perte des informations nécessaires pour la bonne prédiction des résultats, et surtout sur l'aspect tangentiel.

De plus, la création d'un domaine élément discret à partir d'un maillage surfacique comporte une partie aléatoire lors du remplissage du volume avec les éléments. Une même géométrie de surface peut conduire à deux domaines discrets différents, donc des résultats d'efforts différents. Cette différence peut alors complexifier l'apprentissage de l'IA et rendre impossible la généralisation des résultats. L'interpolation est donc abandonnée au profit d'une autre méthodologie.

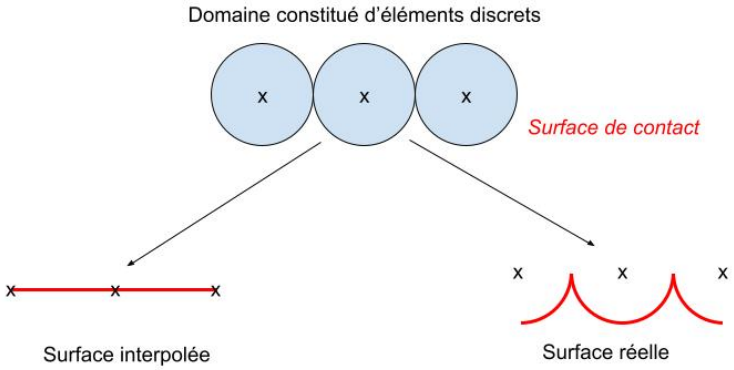


FIGURE 3.8 – Comparaison surface réelle et surface interpolée

3.1.3 Troisième modèle : prédiction à partir des vecteurs normaux de contact

Génération de la base de données

Les approches précédentes n'ayant pas permis d'avoir des résultats satisfaisants, une nouvelle méthode est proposée ici. La méthode précédente a permis de montrer que l'effort normal était facilement prédictible, mais que la prédiction de l'effort tangentiel était plus complexe, probablement à cause d'une perte d'information due à une interpolation des surfaces en contact à partir des coordonnées des centres des éléments.

L'idée est alors de ne plus donner directement les surfaces en contact, mais de donner les vecteurs normaux pour tous les contacts entre les éléments du premier domaine avec ceux du second domaine. Pour cela, nous pouvons générer des fichiers .vtu (*VTK Unstructured Grid Files*) qui contiennent l'intégralité des résultats issus de la DEM (position, vitesse, accélération, efforts, efforts de contact des éléments et contrainte, élongation, déplacement dans les poutres), lisibles par le logiciel Paraview (T. P. D. TEAM, 2023), comme visible dans la figure 3.9. À l'aide d'une routine, il est ensuite possible d'afficher les vecteurs normaux des contacts entre les éléments qui composent les surfaces en contact, et enfin de sauvegarder dans un fichier .txt les composantes de ces vecteurs. Chaque élément possède un vecteur, et les éléments qui ne sont pas en contact possèdent quant à eux un vecteur nul.

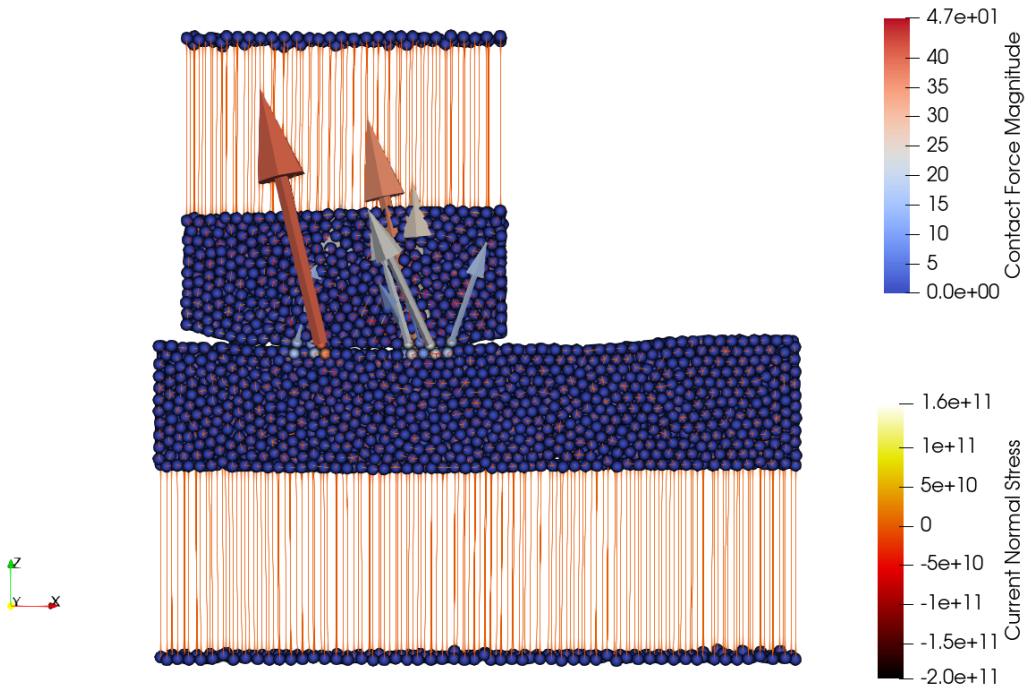


FIGURE 3.9 – Visualisation des vecteurs normaux des contacts (côté roue)

L'IA prend donc en entrée le coefficient de frottement microscopique imposé dans les simulations DEM, et une matrice de N lignes et 3 colonnes, comme ci-dessous :

$$\begin{pmatrix} v_{1,x} & v_{1,y} & v_{1,z} \\ v_{2,x} & v_{2,y} & v_{3,z} \\ \dots & \dots & \dots \\ v_{N,x} & v_{N,y} & v_{N,z} \end{pmatrix}$$

où chaque ligne correspond à un vecteur, et chaque colonne correspond à une composante (x,y,z) du vecteur en question.

Cependant, entre deux simulations, le nombre d'éléments et donc de vecteur n'est pas toujours le même. Les matrices ne possèdent donc pas initialement le même nombre de lignes, ce qui n'est pas adapté pour l'utilisation d'une IA. Nous procédons donc à une étape de remplissage en déterminant le nombre maximal M de lignes que peut avoir cette matrice à travers toutes les simulations et toutes les itérations, et en ajoutant le nombre de lignes manquantes à l'ensemble des matrices. Pour ne pas interférer avec les résultats, les lignes additionnelles

contiennent des vecteurs nuls $(0, 0, 0)$. Dans notre cas, nous obtenons un nombre maximal M de lignes de 93.

Préparation du modèle

Comme montré dans la figure 3.10, le modèle est simplifié par rapport aux précédents, puisqu'après avoir aplati les données pour former un vecteur contenant l'ensemble des composantes et le coefficient de frottement micro, celui-ci ne contient qu'une succession de couches dense. Le nombre de neurones diminue progressivement jusqu'à la dernière couche qui ne contient qu'un seul neurone qui produit le coefficient de frottement mésoscopique. L'architecture du modèle développé est décrite dans les tableaux 3.2 et 3.1.

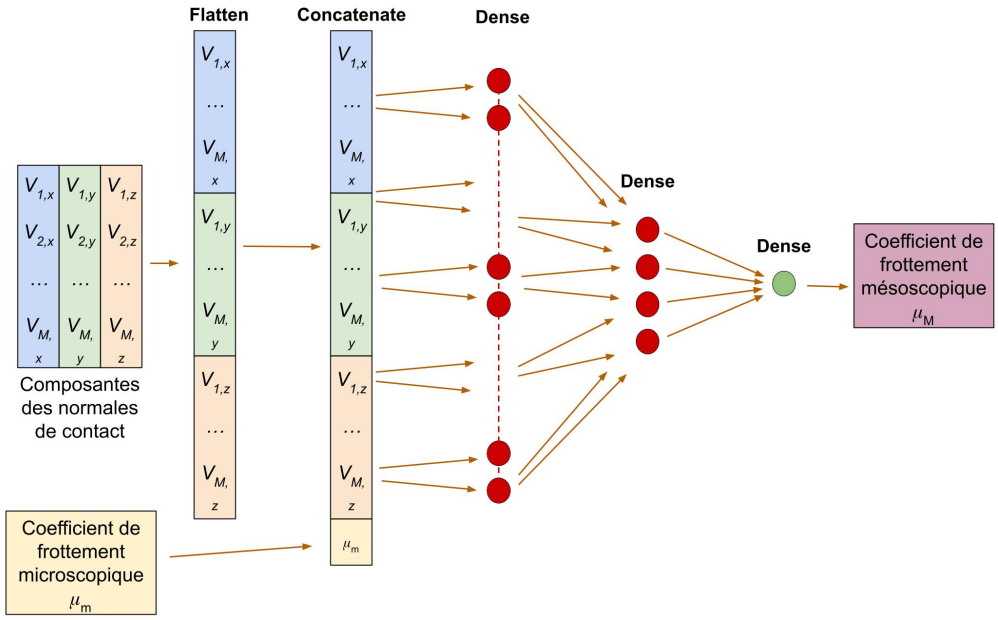


FIGURE 3.10 – Schématisation du troisième modèle de régression

Optimizer	Loss function	Validation split	batch size	epoch
Adam	Mean Square Error	30%	1000	100

TABLEAU 3.1 – Paramètres du modèle IA

Couche	Dimensions en sortie de couche	Nombre de paramètres
Input 1	(X,98,3)	0
Input 2	(X,1)	0
Flatten 1	(X,294)	0
Concatenate 1	(X,295)	0
Dense 1	(X,250)	74000
Dense 2	(X,100)	25100
Dense 3	(X,50)	5050
Dense 4	(X,20)	1020
Dense 5	(X,10)	210
Dense 6	(X,5)	55
Dense 7	(X,1)	6

Tableau 3.2 – Description de l'architecte du modèle IA

Validation du modèle

De nouveau, nous pouvons valider la démarche au travers l'évolution du *training* et de la forme de la *loss* qui sont affichés dans la figure 3.11 Nous pouvons déjà constater une nette amélioration de ces dernières, puisqu'elles diminuent toutes les deux vers une valeur bien plus faible (de l'ordre de 10^{-5}) et avec une vitesse similaire.

Pour s'assurer de la bonne précision du modèle, nous pouvons le tester sur des nouvelles données, qui ne sont pas présentes dans la base de données d'entraînement et de validation. Le test est réalisé sur 100 configurations issues de nouvelles simulations contenant des surfaces avec diverses rugosités maximales, et sur divers coefficients de frottement microscopique. La comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles est affichée dans la figure 3.12 (valeur normalisées entre 0 et 1) et dans la figure 3.13 (valeurs réelles).

À l'oeil nu, il est déjà possible de voir une nette amélioration des prédictions, avec un modèle qui comprend d'une part la tendance sur le coefficient de frottement mésoscopique, et qui arrive également à l'évaluer.

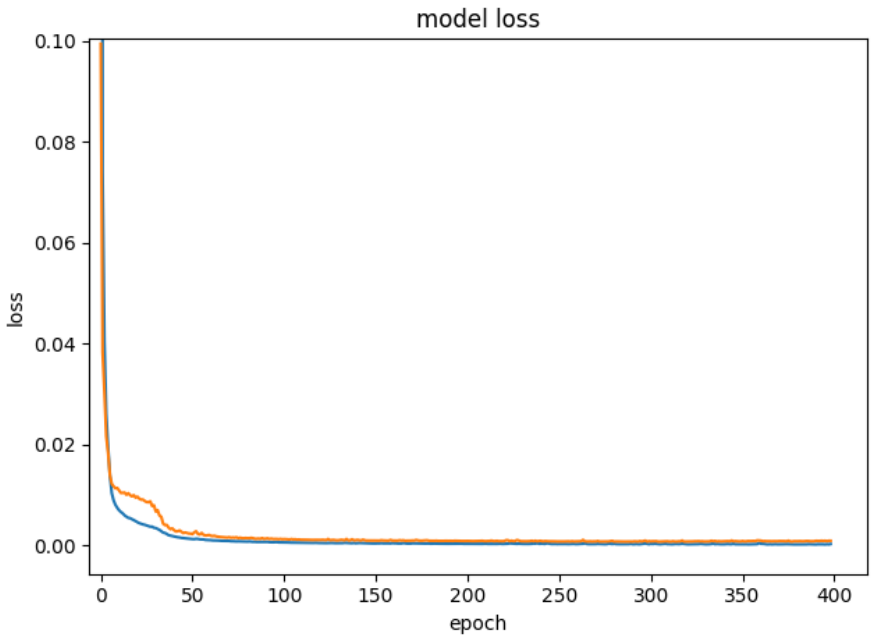


FIGURE 3.11 – Évolution du *loss* pendant l'apprentissage

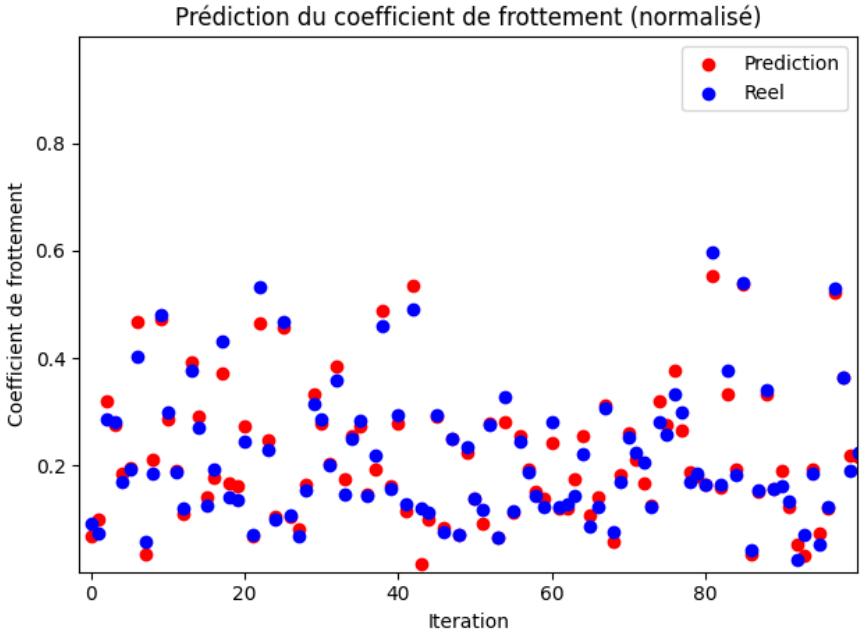


FIGURE 3.12 – Comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles de coefficient de frottement (normalisé)

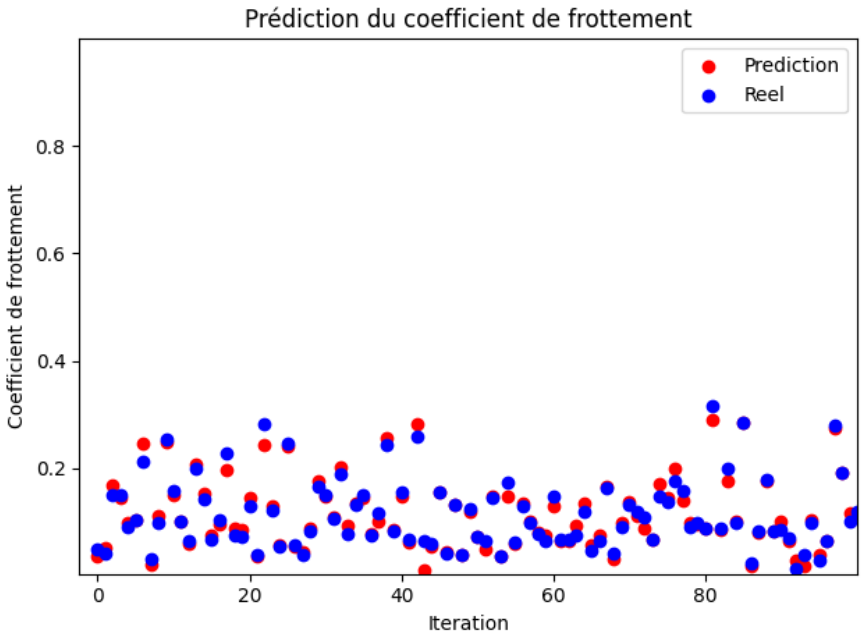


FIGURE 3.13 – Comparaison entre les valeurs prédites et les valeurs réelles de coefficient de frottement

Si on note y_i la valeur réelle, $\hat{y}_i$ la valeur prédite, $\bar{y}$ la moyenne des valeurs réelles et n le nombre de données, il est possible de s'en assurer et de mesurer la précision de la prédiction à travers 4 métriques :

— *Mean Absolute Error* (MAE, WILLMOTT et MATSUURA, 2005) : moyenne des erreurs absolues entre les valeurs prédites et les valeurs réelles. Il permet de mesurer la magnitude moyenne des erreurs, mais il ne tient pas compte des directions des erreurs.

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N}|y_i - \hat{y}_i| \tag{3.3}$$

— *Mean Squared Error* (MSE, CHAI et DRAXLER, 2014) : moyenne des carrés des erreurs entre les valeurs prédites et les valeurs réelles. Il a l'avantage de pénaliser de façon plus importante que le MAE les écarts importants.

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y_i})^2 \tag{3.4}$$

— Coefficient de détermination (R^2, Nagelkerke, 1991) : mesure la proportion de variance des valeurs réelles qui est expliquée par les valeurs prédites. Il indique la qualité de l'ajustement du modèle en attribuant une valeur entre 0 (mauvais ajustement) et 1 (bon ajustement).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y_i})^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y_i})^2} \tag{3.5}$$

— *Mean Absolute Percentage Error* (MAPE, De Myttenaere et al., 2003) : est égal à la moyenne des erreurs absolues en pourcentage des valeurs réelles.

$$MAPE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{N}|\frac{y_i - \hat{y_i}}{y_i}| \times 100 \tag{3.6}$$

Les valeurs obtenues sont regroupées dans le tableau 3.3.

MAE	MSE	R^2	MAPE
0.008	0.0006	0.9622	14.84%

Tableau 3.3 – Métriques sur la qualité des prédictions (troisième modèle)

Utilisation du modèle

Ce dernier modèle offrant une précision suffisante du coefficient de frottement mésoscopique, celui-ci est adopté pour la suite des travaux. En revanche, son utilisation nécessite tout de même quelques explications.

En effet, au lieu de prendre en entrée des matrices représentant des surfaces, chose qui se visualise assez bien, le modèle prend en entrée des matrices correspondants à des composantes de vecteurs normaux de contact. Cependant, il n'est pas possible de déterminer à ce point les vecteurs correspondant à une surface précise (d'autant plus qu'un maillage surfacique peut avoir différents domaines

discrets selon la disposition des éléments qui se fait aléatoirement en épousant le maillage).

L'idée qui est proposée ici, est de générer des matrices aléatoires de composantes de vecteurs en se basant sur les matrices réelles. Sans connaître la surface réelle correspondante, nous pourrons tout de même attester qu'il s'agit de surfaces ayant les mêmes caractéristiques de rugosité.

3.2 Intégration dans le modèle éléments finis

Dans le modèle de Hendrycks, l'interaction entre l'intérieur de la roue et la portée de calage de l'essieu est définie en un seul contact sur Abaqus avec un coefficient de frottement unique de 0.11. De notre côté, nous avons réalisé une nouvelle modélisation microscopique du contact essieu/roue, sur une longueur de 1 mm, soit la taille des éléments utilisés dans le modèle FEM au niveau du contact. Ainsi, nous pouvons décomposer le contact global en N sous-contacts avec N le nombre d'éléments finis qui compose la portée de calage de l'essieu, comme schématisé sur la figure 3.14.

Chaque contact correspond à l'interaction entre un des éléments de l'essieu avec la surface interne de la roue et il est possible d'affecter à chaque contact un coefficient de frottement différent. Nous pouvons ensuite calculer avec le modèle éléments finis l'évolution de l'effort de calage nécessaire pour déplacer la roue de long de l'essieu. Ne possédant pas d'informations sur l'évolution de la rugosité pendant l'opération de calage, la méthodologie suivante est proposée :

1. Détermination du coefficient de frottement microscopique à travers une comparaison entre le modèle initial (dans lequel le coefficient de frottement mésoscopique est fixé à 0.11) et 4 modèles enrichis par la DEM avec 4 coefficients micros différents (0.025, 0.05, 0.075, 0.1) ;
2. Détermination d'une évolution de rugosité permettant d'obtenir une courbe de calage numérique proche de celle obtenue expérimentalement.

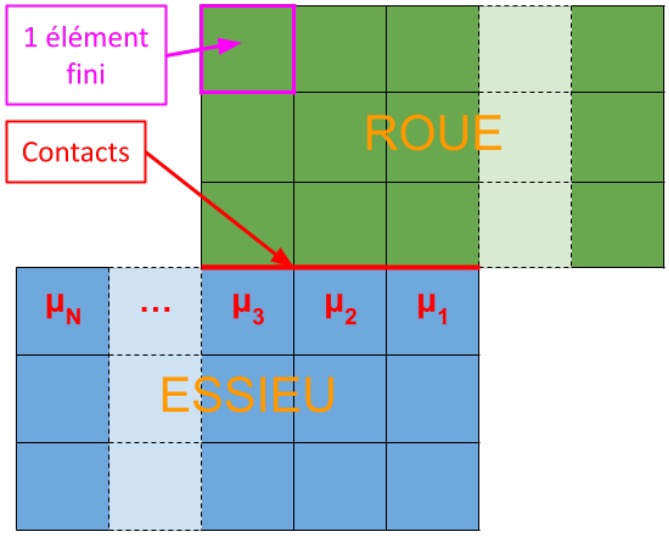


FIGURE 3.14 – Schématisation de l'intégration des coefficients de frottements dans le modèle éléments finis

3.2.1 Influence du coefficient de frottement microscopique

Tout d'abord, nous générons suffisamment de surfaces pour couvrir l'ensemble de la portée de calage et demandons à l'IA de prédire les coefficients de frottement mésoscopiques quatre fois, chaque fois avec un coefficient de frottement microscopique différent ($\mu_{micro} \in \{0.025, 0.05, 0.075, 0.1\}$). Les coefficients prédits sont ensuite introduits dans le modèle d'éléments finis. Cela permet d'évaluer l'influence de ce paramètre sur le modèle de calage.

La Figure 3.15 donne l'évolution de la force tangentielle à la surface de contact de l'essieu dans cinq modèles différents : le modèle initial avec un coefficient de frottement global $\mu_{meso} = 0.11$ (indiqué en rouge sur la figure 3.15), et les quatre modèles obtenus en prédisant les coefficients mésoscopiques avec différentes valeurs de coefficient de frottement microscopiques.

Si on compare l'évolution de la force tangentielle pour les 4 modèles enrichis, on constate que l'aspect global des courbes reste le même dans tous les modèles. Plus précisément, une augmentation globalement linéaire de l'effort, correspondant à une augmentation de la surface de contact entre la roue et l'essieu puis

un ralentissement situé vers la moitié de la courbe, due au passage de la gorge située au milieu de la roue. Seule l'amplitude varie, cette dernière augmentant avec le coefficient de frottement microscopique dont le coefficient de frottement mésoscopique dépend de manière croissante.

Si on compare l'évolution de l'effort des modèles enrichis avec celle obtenue avec le modèle initial, on constate qu'à quelques variations près, dues aux multiples variations de coefficient mésoscopique, le modèle obtenu avec le coefficient de frottement microscopique $\mu_{micro} = 0.075$ est très proche de l'initial.

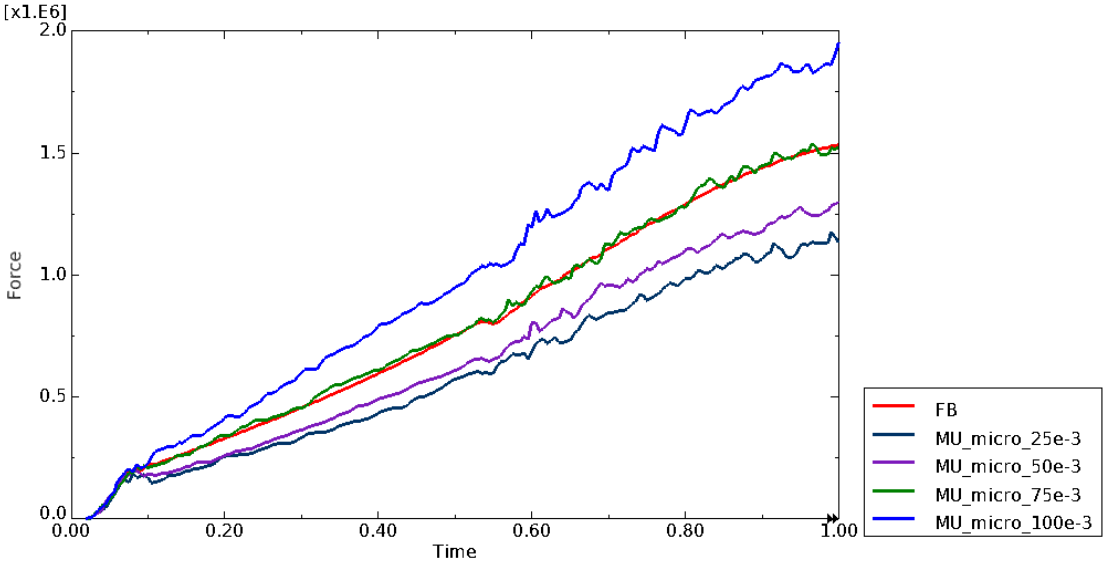


FIGURE 3.15 – Evolution de l'effort tangentiel

On peut alors comparer les champs de contraintes obtenus dans l'ensemble roue/essieu avec ces deux modèles (cf Figures 3.16 et 3.17). Outre le fait que la distribution des contraintes diffère légèrement entre les deux modèles, on note une différence au niveau de la contrainte maximale, localisée dans les deux cas à l'entrée de la surface de contact de l'essieu. Dans le premier modèle (à gauche sur les figures 3.16 et 3.17), on obtient une contrainte maximale de 676,4 MPa, contre 507,1 MPa dans le modèle enrichi, soit une différence de 25%, ce qui est loin d'être négligeable.

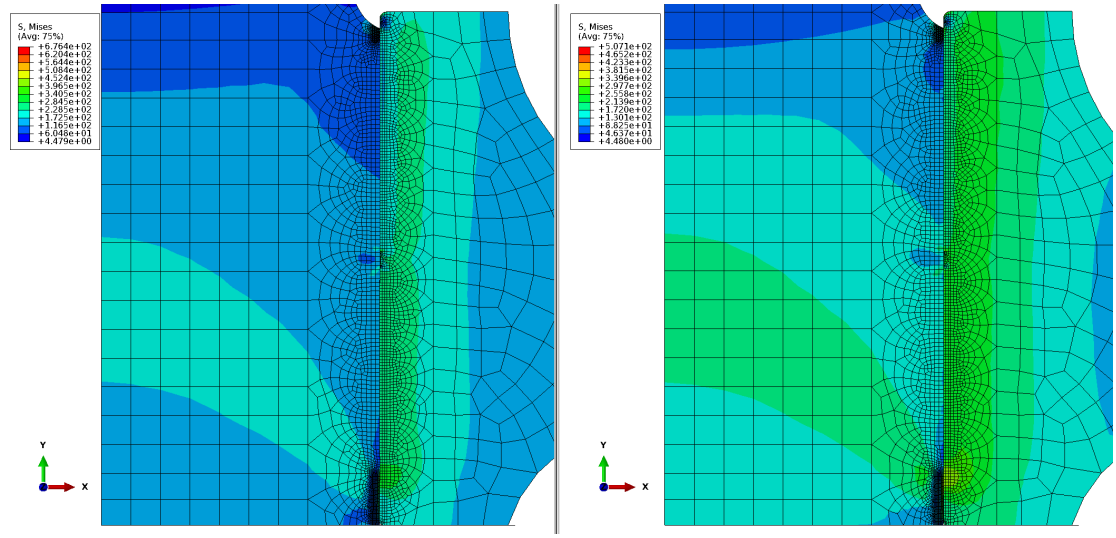


FIGURE 3.16 – Champ de contrainte dans la roue et l'essieu a) Coefficient de frottement uniforme b) Coefficient de frottement enrichi

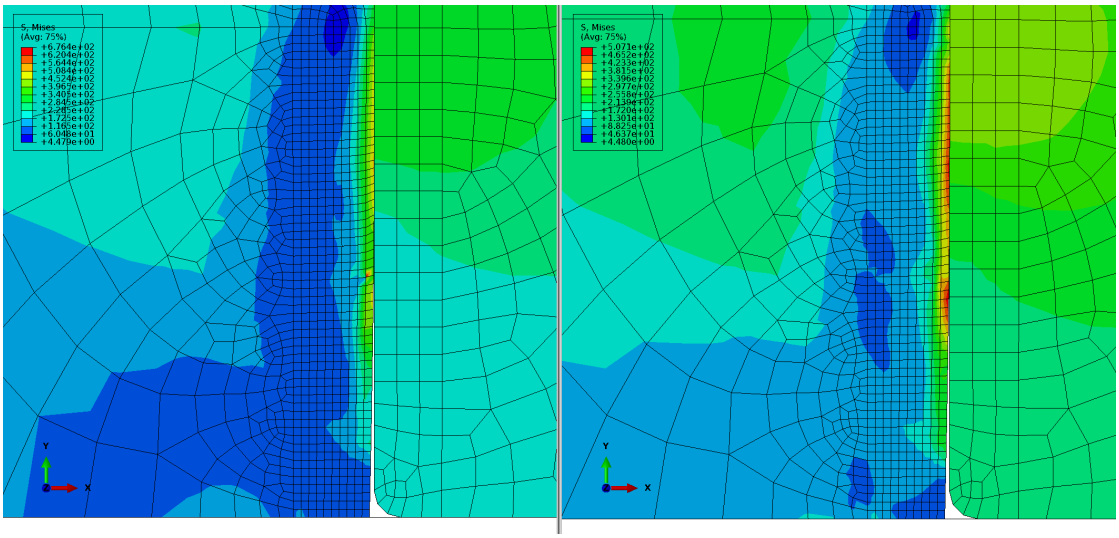


FIGURE 3.17 – Zoom sur le chanfrein

3.2.2 Influence des surfaces en contact

Dans cette section, nous fixons le coefficient de frottement microscopique à 0.075, et nous comparons les résultats entre cinq modèles dans lesquels nous

générons à chaque fois de nouvelles surfaces, dans le but d'étudier l'influence des surfaces dans le modèle éléments finis.

Comme précédemment, nous comparons l'évolution de la force tangentielle entre les 5 modèles enrichis (cf figure 3.18) et les champs de contraintes (cf figure 3.19)

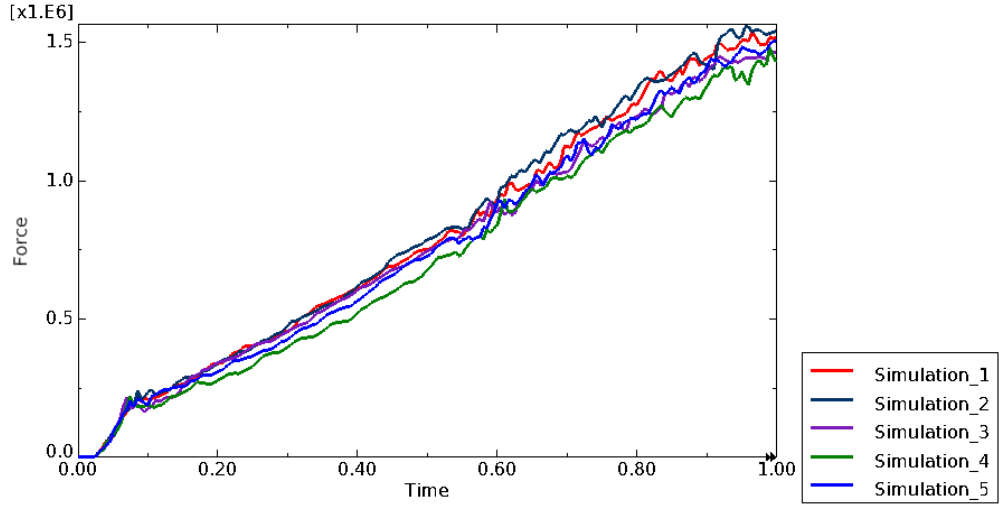


FIGURE 3.18 – Évolution de l'effort tangentiel

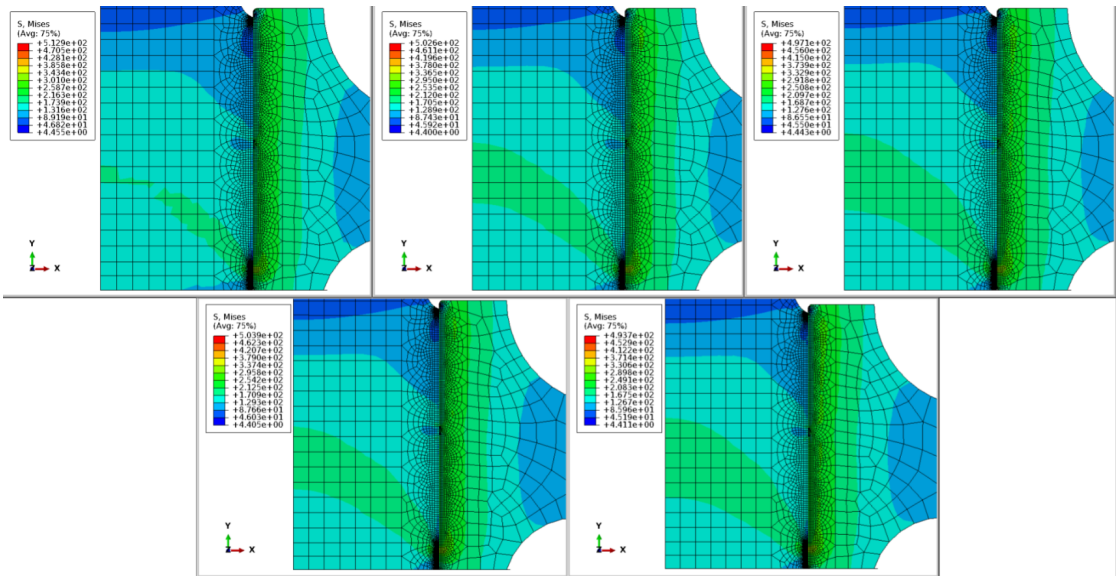


FIGURE 3.19 – Champ de contrainte dans la roue et l'essieu

On constate que pour un même coefficient de frottement microscopique, on obtient des évolutions de force assez différentes selon les surfaces. De plus, la valeur maximale diffère entre les 5 modèles, allant de $1,430.10^6$ à $1,540.10^6$ N. Concernant la réparition de la contrainte, une fois de plus, nous observons quelques différences dues à des valeurs plus ou moins élevées des coefficients de frottement mésoscopiques. La contrainte maximale, cependant, est toujours située à l'entrée du chanfrein, et diffère assez peu en variant entre 493.7 et 512.9 MPa.

3.2.3 Influence de l'usure

L'usure est ici prise en compte en générant des coefficients de frottement à partir de surfaces de moins en moins rugueuses. En effet, diminuer la rugosité diminue en moyenne les valeurs des prédictions du coefficient de frottement. La méthode consiste alors à récupérer la position axiale de chaque élément qui constitue la portée de calage, à générer des surfaces dont la rugosité maximale dépend de la position de l'élément et de générer le coefficient de frottement à l'aide de l'IA.

Comme dit précédemment, ne possédant pas d'informations sur l'évolution réelle des surfaces en contact pendant l'opération, il n'est pas possible de la renseigner directement. L'évolution de la rugosité est alors ici paramétrée de telle sorte qu'elle soit fonction de la position, c'est-à-dire que nous avons ici :

$$R_{max} = f(y) \tag{3.7}$$

avec :

— R_{max} : la rugosité maximale de la surface ;

— y : la position axiale de l'élément fini considéré.

En testant plusieurs fonctions, nous testons plusieurs scénarios sur l'évolution de la rugosité maximale. Par essai/erreur, nous cherchons une fonction qui permette d'obtenir des résultats similaires à ceux obtenus expérimentalement. Plusieurs paramètres ont été testés (valeur initiale/finale de la rugosité maximale, évolution linéaire/exponentielle, diminution constante ou diminution jusqu'à

atteindre un plateau etc.) jusqu'à avoir un scénario permettant de retrouver les résultats attendus. Le scénario en question est affiché sur la figure 3.20 et comporte deux phases :

1. une diminution linéaire de la rugosité maximale de 1.10^{-4} mm (rugosité initiale de la roue) jusqu'à atteindre une rugosité quasi-nulle (1.10^{-10} mm) sur la 1ère moitié de la portée de calage ;
2. une rugosité maximale constante de 1.10^{-10} mm.

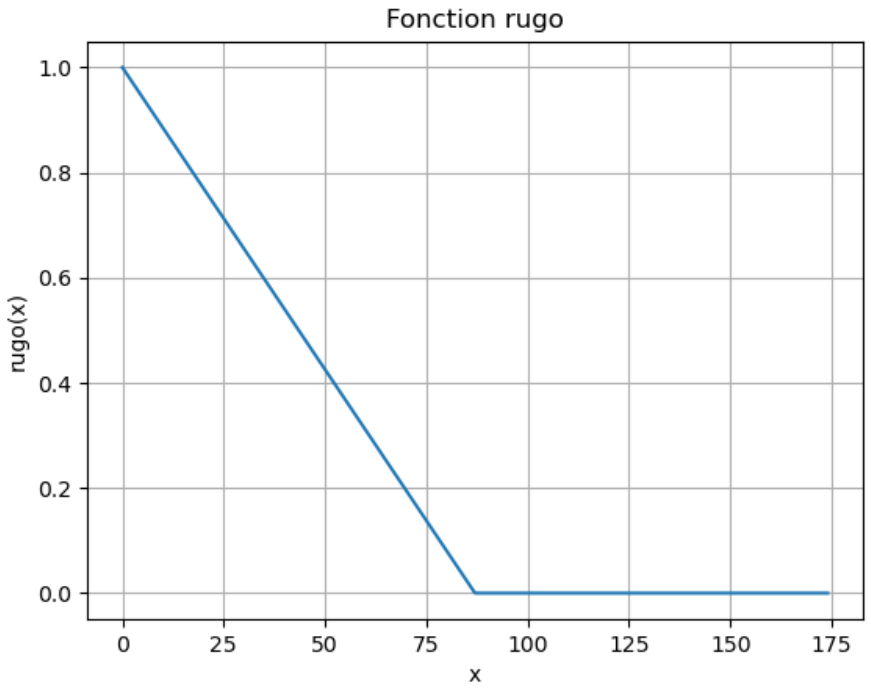


FIGURE 3.20 – Définition du scénario pour l'évolution de la rugosité de la roue

Les coefficients générés à partir de ce scénario sont affichés sur la figure 3.21. En réalisant une régression sur chacune des deux moitiés du graphe (ce qui correspond à chacune des deux parties du scénario décrit précédemment), nous observons bien une diminution globale des coefficients de frottement dans la première moitié, puis une quasi-constance de celui-ci dans la seconde moitié.

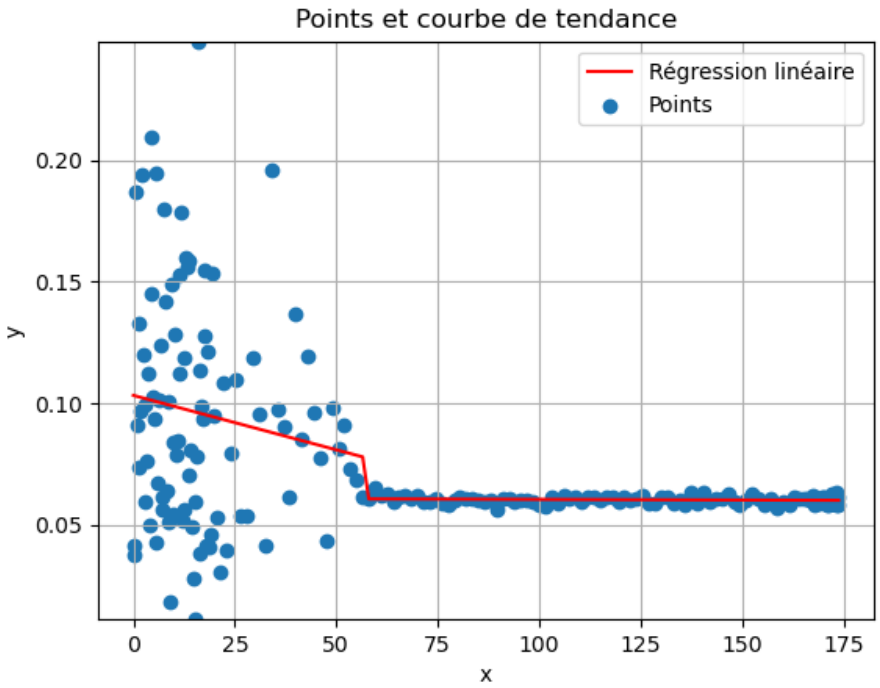


FIGURE 3.21 – Coefficients de frottements générés via l'intelligence artificielle

De plus, le chanfrein d'entrée et le congé, qui se situent aux deux extrémités de la portée de calage, sont discrétisés avec davantage d'éléments. Raison pour laquelle on trouve sur le graphe davantage de points (et donc de coefficients différents) aux deux extrémités.

Ce modèle est alors confronté au modèle final de Hendrycks. Si celui-ci avait initialement imposé un coefficient de frottement constant pendant l'opération de calage, il a par la suite noté la nécessité de faire varier celui-ci au cours de la simulation pour prendre en compte la présence d'aspérités sur les surfaces en contact. Il a ainsi traduit cela en imposant un coefficient de frottement dépendant de la pression, comme visible dans la Figure 3.22, issue de son manuscrit, puis comparé les résultats à deux courbes expérimentales.

Si cela lui a permis de diminuer l'effort de calage pour se ramener à un effort proche de l'expérimental et d'avoir une évolution similaire pendant la première partie du calage, il obtient toutefois une croissance trop importante par

la suite, qui reste tout de même dans la fenêtre de validité définie par Valdunes (cf Figure 3.23).

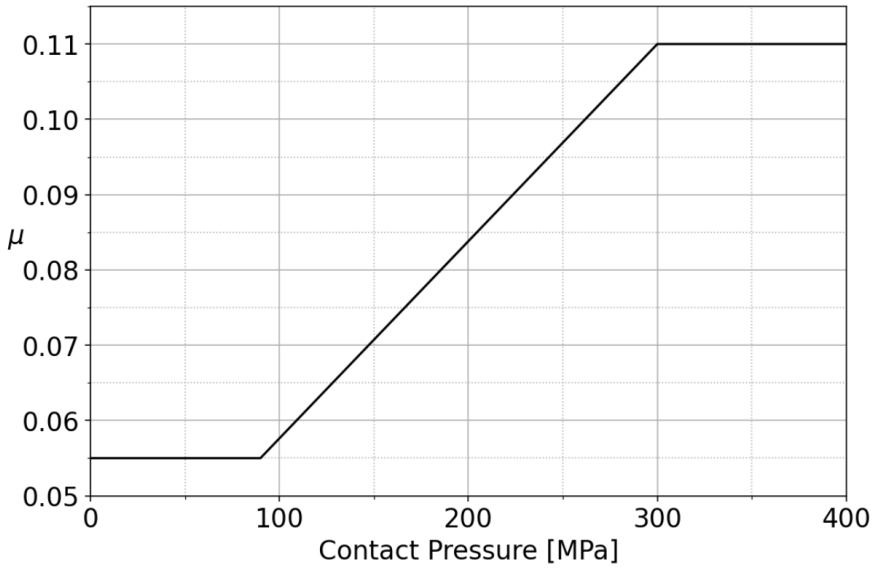


FIGURE 3.22 – Loi d'évolution du facteur de Coulomb en fonction de la pression de contact, selon Hendrycks

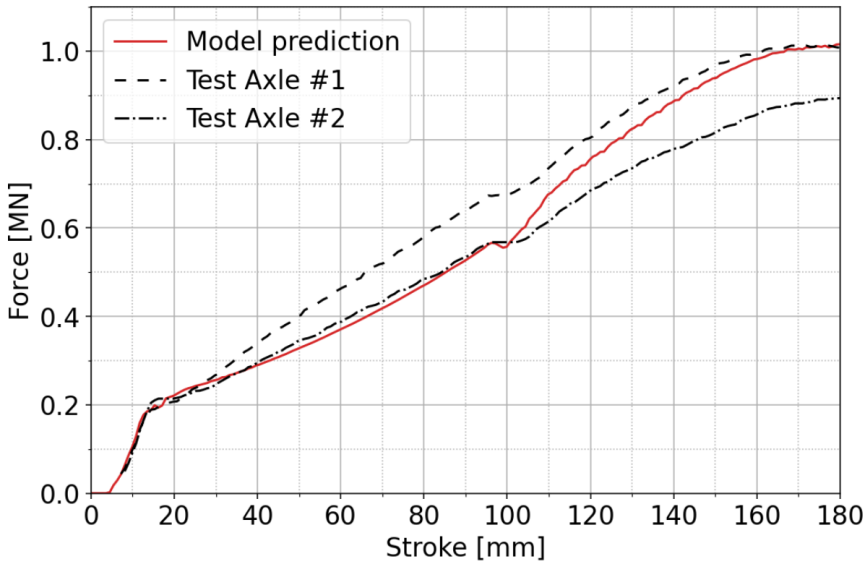


FIGURE 3.23 – Effort de calage calculé avec μ fonction de la pression de contact, selon Hendrycks

Nous pouvons alors tracer l'évolution de la courbe de calage pour notre modèle enrichi par la DEM, et la comparer à la courbe de Hendrycks et l'un des deux courbes expérimentales. En parallèle, nous pouvons également tracer l'évolution du coefficient de frottement global dans les deux modèles numériques. Les résultats sont affichés dans la figure 3.24. Si nous commençons par regarder les courbes de calage, nous pouvons constater que la courbe numérique est maintenant plus proche de la courbe expérimentale puisque nous avons une évolution linéaire avant et après le passage de la gorge, sans pour autant qu'il n'y ait d'augmentation de la croissance dans la deuxième partie de la courbe. De plus, nous retrouvons comme dans l'expérimental, un léger ralentissement de la courbe vers la fin de la portée, dû à l'usure des surfaces pendant le calage qui entraîne une diminution du coefficient de frottement. Cette diminution se retranscrit également à travers l'évolution de coefficient de frottement global qui est plus faible en fin de cours dans le modèle enrichi par la DEM.

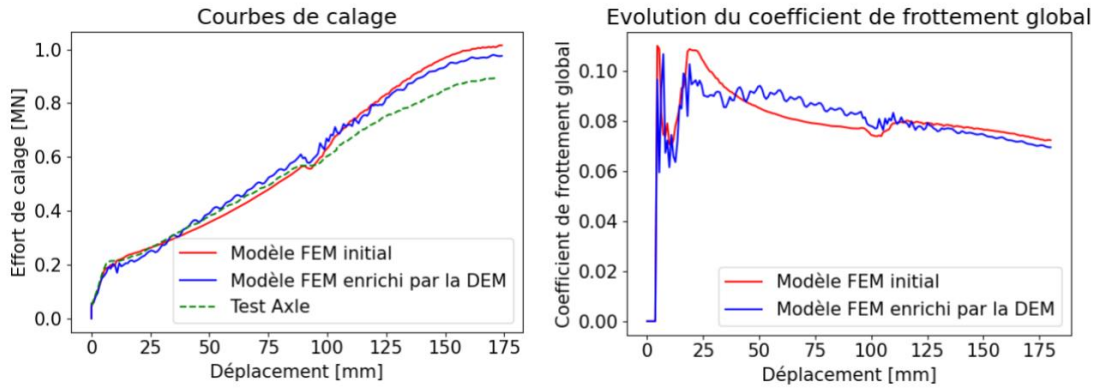


FIGURE 3.24 – Effort de calage et coefficient de frottement global calculés avec μ déterminé par la DEM

Enfin, nous pouvons comparer le champ de contrainte et la plasticité à l'intérieur des pièces entre le modèle numérique de Hendrycks et le nôtre, qui sont affichés respectivement dans les figures 3.25 et 3.26. Nous pouvons premièrement remarquer que, pour un effort de calage maximal relativement proche entre les deux simulations, nous obtenons tout de même une différence importante de la contrainte maximale située dans le chanfrein d'entrée. Dans le modèle de Hendrycks, la contrainte maximale est d'environ 659.9 MPa, contre 502.0 MPa

dans le modèle enrichi, soit un écart relatif de 23.93%. En conséquence, nous obtenons également une différence notable de la déformation plastique, avec dans le premier cas une déformation de 0.7749 contre 0.7078 dans le second cas, soit une différence d'environ 8.66%. Tout cela met alors en évidence l'impact que peut avoir la valeur du facteur de Coulomb μ dans un modèle éléments finis.

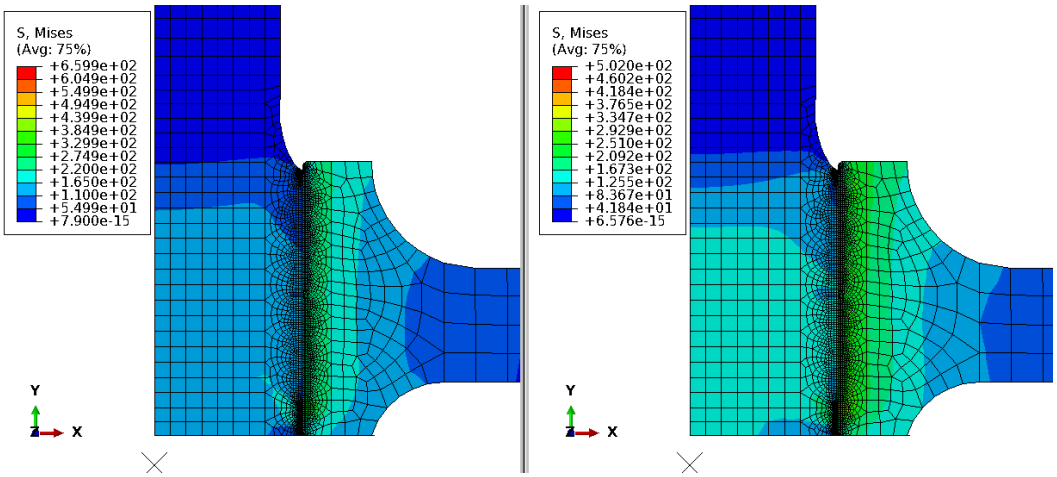


FIGURE 3.25 – Visualisation du champ de contrainte dans la système essieu/roue dans le modèle de Hendrycks (gauche) et le modèle enrichi (droite)

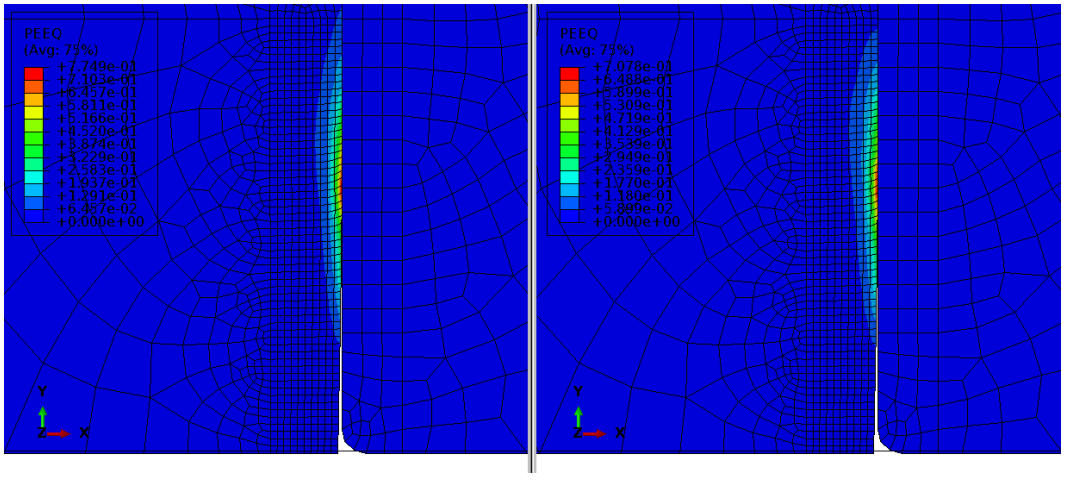


FIGURE 3.26 – Visualisation de la plasticité au sein de l'essieu dans le modèle de Hendrycks (gauche) et le modèle enrichi (droite)

3.3 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons intégré deux méthodes complémentaires, DEM et FEM, pour améliorer la modélisation du frottement lors de l'opération de calage. Les résultats issus du modèle DEM (effort tangentiel, et effort normal) sont réinjectés dans le calcul FEM à l'échelle de l'élément, par l'intermédiaire d'un coefficient de frottement local et représentatif. Pour surmonter les limitations des calculs discrets en termes de coût temporel et de ressources, l'intelligence artificielle a été utilisée pour généraliser les résultats et prédire avec précision le coefficient de frottement en fonction de la rugosité des surfaces en contact. Ce dernier prend en compte les surfaces en interaction et un coefficient de frottement local. L'application de techniques de *deep learning* s'est avérée prometteuse, confirmant la robustesse de l'approche. Les coefficients de frottement obtenus à partir des simulations DEM ont ensuite été intégrés dans le modèle FEM, mettant en lumière des perturbations locales significatives au niveau des contraintes. Ces modifications locales auront un impact non négligeable sur les phénomènes de fretting-fatigue, souvent responsables de la défaillance des essieux. Cette démarche comporte quelques points de discussion comme le maintien de l'utilisation de l'axisymétrie qui se justifie par le fait que pour une section fine et cylindrique de la portée de l'essieu, la valeur maximale des rugosités est globalement identique en tout point. Le coefficient de frottement déterminé par la DEM correspond ainsi à une valeur de coefficient caractéristique pour tout le diamètre de la section de la portée de calage. Dans le prolongement de ce travail, le modèle IA utilisé ici ne permet pas de déterminer pour une configuration précise de surfaces en contact le coefficient de frottement résultant de leur interaction, mais de déterminer des coefficients pouvant être obtenus avec des surfaces ayant une rugosité maximale définie. Une perspective serait d'être capable d'une part de déterminer à partir d'une surface expérimentale le domaine discret associé, puis pour deux domaines, de déterminer les vecteurs normaux des contacts entre les éléments, éventuellement en passant par un modèle IA. Il serait alors possible de compléter notre modèle actuel qui est capable de déterminer à partir de vecteurs le coefficient de frottement. Cette partie a cependant montré l'attention qu'il faut porter sur les données d'apprentissage, puisque la qualité des prédictions

dépend principalement de ces dernières.

Chapitre 4

Prise en compte du gradient de microstructure

Sommaire du présent chapitre

4.1 Modélisation de la microstructure **87**
- 4.1.1 Choix du modèle local 87
- 4.1.2 Définition du domaine 90
- 4.1.3 Création du gradient de microstructure 91
- 4.1.4 Génération du modèle 3D 97
- 4.1.5 Définition de la limite élastique selon la loi de Hall-Petch 99

4.2 Couplage global/local **99**
- 4.2.1 Présentation de la méthode 99
- 4.2.2 Application au système essieu-roue 106

4.3 Conclusions **114**

L'opération de forgeage permettant de fabriquer les essieux engendre un gradient de microstructure au sein de ceux-ci, accompagné d'un gradient de propriétés. Baudoin, 2015 ; Berger, 2022 ont ainsi caractérisé ce gradient de microstructure et ont souligné son rôle positif sur le comportement en fatigue des essieux. Idéalement, il serait nécessaire de modéliser l'intégralité de cette microstructure dans le modèle éléments finis. Cependant, cela serait très coûteux en termes de temps et de puissance de calcul. L'utilisation d'une méthode de couplage global/local permet de pallier ce problème en ne modélisant qu'un morceau de la microstructure réelle dans un le modèle local, et de considérer une pièce homogène dans le global. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la création du modèle local via le logiciel Neper (Quey et al., 2011), puis à l'utilisation d'une méthode de couplage global/local pour prendre en compte la microstructure dans le modèle de calage et de flexion rotative.

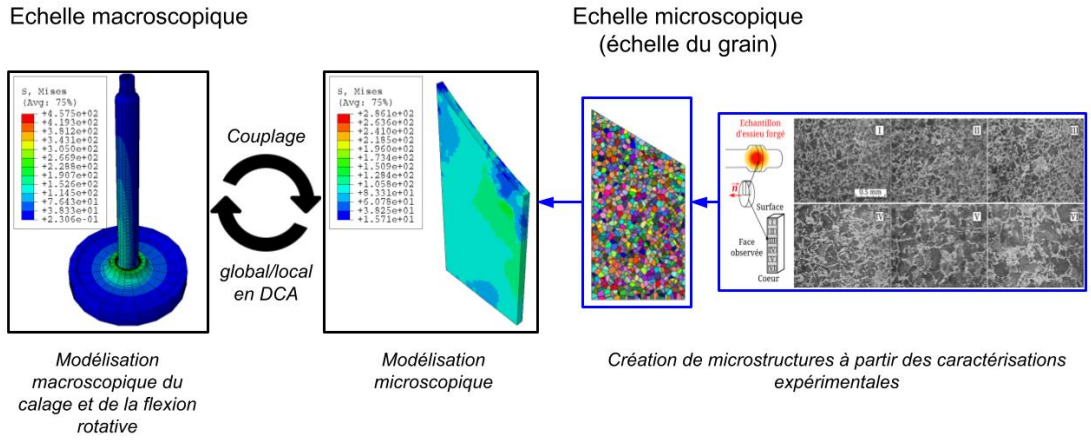


Figure 4.1 – Méthodologie pour la prise en compte de la microstructure

4.1 Modélisation de la microstructure

4.1.1 Choix du modèle local

Avant de créer directement le gradient, il est nécessaire de délimiter le domaine qui contiendra la microstructure réelle. D'après des analyses expérimentales, de la fissuration est régulièrement observée sur les essieux, à quelques millimètres des bords de la portée de l'essieu, en raison d'un phénomène de

fretting fatigue (Schikora, 2022). Notre modèle local doit donc s'intéresser à ces deux zones de l'essieu. Les modèles global et local étant couplés en surface, les surfaces délimitant le domaine local doivent être présentes également dans le modèle global. En zoomant sur les zones d'intérêt dans le modèle 2D de calage de Hendrycks, 2023 (cf figure 4.2), nous pouvons observer aux deux extrémités de l'essieu un découpage horizontal et vertical du maillage dans lequel la taille des élément est fixe ($0.3mm$). Ces domaines se situant bien en bord de portée de calage, et étant délimités par des plans, ce qui facilite la création des surfaces, ceux-ci sont choisis comme domaines pour le modèle local. Nous distinguons alors deux domaines :

1. Le domaine local A situé côté corps de l'essieu, d'une longueur de portée de 4 mm sur une profondeur de 3 mm ;
2. Le domaine local B situé à l'entrée de la portée de calage, contenant le chanfrein d'entrée.

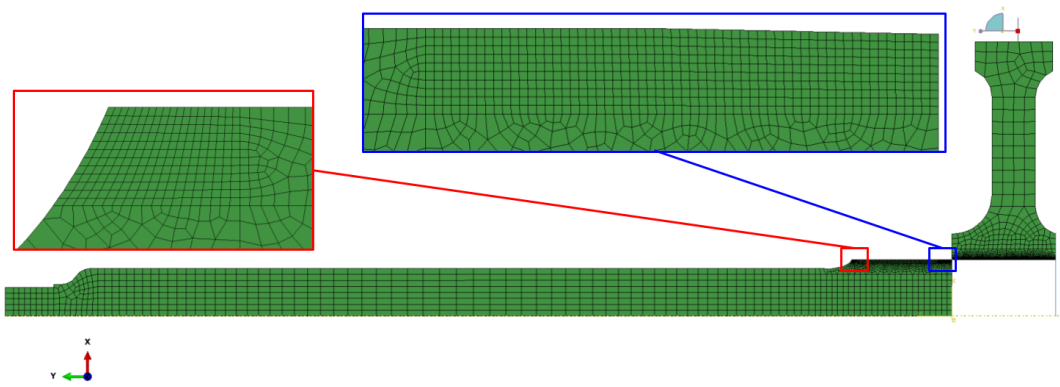


Figure 4.2 – Zoom sur le bord de la portée de calage (2D)

Étant donné que nous souhaitons modéliser la microstructure réelle de l'essieu, il n'est plus possible de simuler l'opération de calage en 2D axisymétrique (si nous le faisions, le logiciel comprendrait que les grains font toute la circonférence de l'essieu). Nous passons donc sur un modèle de calage 3D, en faisant une révolution du maillage 2D, comme réalisé par Hendrycks initialement avant la simulation de la flexion rotative.

Comme dans le modèle de Hendrycks, la révolution sur 360° est réalisée

de sorte d'avoir 20 éléments sur la circonférence, ce qui donne des secteurs angulaires de 18°. Cependant, générer une microstructure sur un tel secteur angulaire serait trop coûteux temporellement en raison du nombre de grains, ces derniers ayant une taille de 0.1 mm immédiatement sous la surface. À l'inverse, augmenter le nombre d'éléments dans la circonférence, pour diminuer la taille des secteurs angulaires augmenterait drastiquement le temps de calcul.

Ainsi, nous proposons ici un modèle obtenu en faisant une révolution sur 360° avec 21 éléments dans la circonférence, comme visible sur la figure 4.3 :

— 1 élément sur un secteur angulaire de 0.25° dans lequel se trouve le modèle local ;
— 20 éléments de dimensions angulaires identiques.

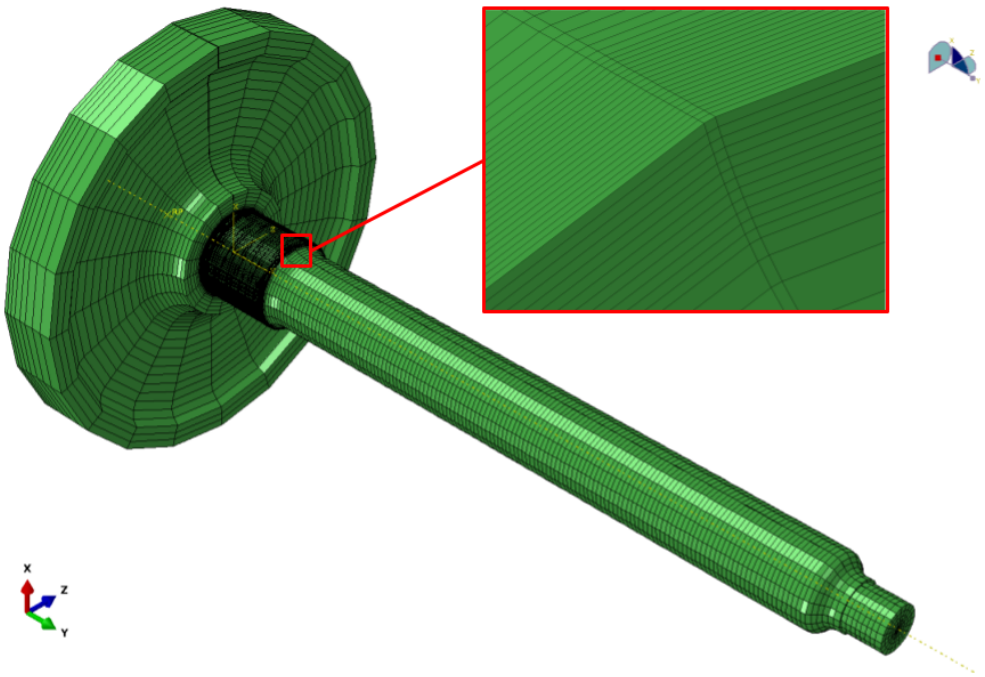


Figure 4.3 – Zoom sur le bord de la portée de calage (3D)

Un tel modèle permet de ne pas avoir d'impact trop significatif sur le temps de calcul du modèle global, et d'avoir un domaine local suffisamment petit pour que la génération de la microstructure et le couplage global/local ne soient pas trop longs.

4.1.2 Définition du domaine

Sur Neper, il est possible d'utiliser des domaines prédéfinis tels que des cubes, des cylindres, des sphères etc. Cependant, au vu de la forme particulière de notre domaine, et surtout de la concavité de celui-ci au niveau du rayon de raccordement (forme impossible à obtenir directement via Neper), nous devons le définir à la main. Cela passe par la création d'un premier domaine délimité uniquement par des plans. Celui-ci est défini à partir de plans d'équation $ax + by + cz = d$. En ayant au préalable récupéré la position des noeuds qui délimitent le modèle local, il est possible à l'aide d'un programme Python de déterminer automatiquement les équations des différents plans passant par les noeuds. Les constantes a, b, c et d des différents plans sont ensuite écrites dans un fichier Points.txt qui est utilisé par Neper pour la création du domaine.

Le domaine A contenant un morceau du congé de raccordement entre la portée de calage et le corps de l'essieu, il est nécessaire de le modifier. Pour cela, nous utilisons la commande *-transform* de Neper qui permet par exemple de soustraire d'un domaine une des formes primitives déjà intégrées sur Neper. Ici, nous soustrayons un cylindre afin de modéliser le congé. Connaissant le rayon du congé $R_{cylinder}$ et la position de quatre points par lesquels doit passer le cylindre, il est possible de déterminer la position du centre $(x_{center}, y_{center}, z_{center})$ de l'une des bases du cylindre et les composantes $(x_{axis}, y_{axis}, z_{axis})$ de l'équation de son axe de révolution.

Nous pouvons ensuite utiliser la commande suivante dans un terminal Linux pour générer des domaines tels que ceux de la figure 4.4 :

```
neper
-T
-n "100"
-domain "planes(planes.txt)"
-transform "cut(cylinder(x_center,y_center,z_center,
x_axis,y_axis,z_axis,R_cylinder)"
```

avec :

— 'neper' : appel du programme neper ;

— '-T' : appel du module de génération de tessellation ;
— '-n' : définition du nombre de cellules. Nous testons ici avec 100 grains ;
— '-domain' : définition du domaine qui contient la tessellation. Dans le cas présent, le domaine est défini par des plans ;
— '-transform' [1] : application d'une transformation sur la tesselation. Dans notre cas, nous réalisons une coupure selon un cylindre de rayon $R_{cylinder}$ et dont l'axe passe par le point $(x_{center}, y_{center}, z_{center})$ et est orienté selon le vecteur $(x_{axis}, y_{axis}, z_{axis})$.

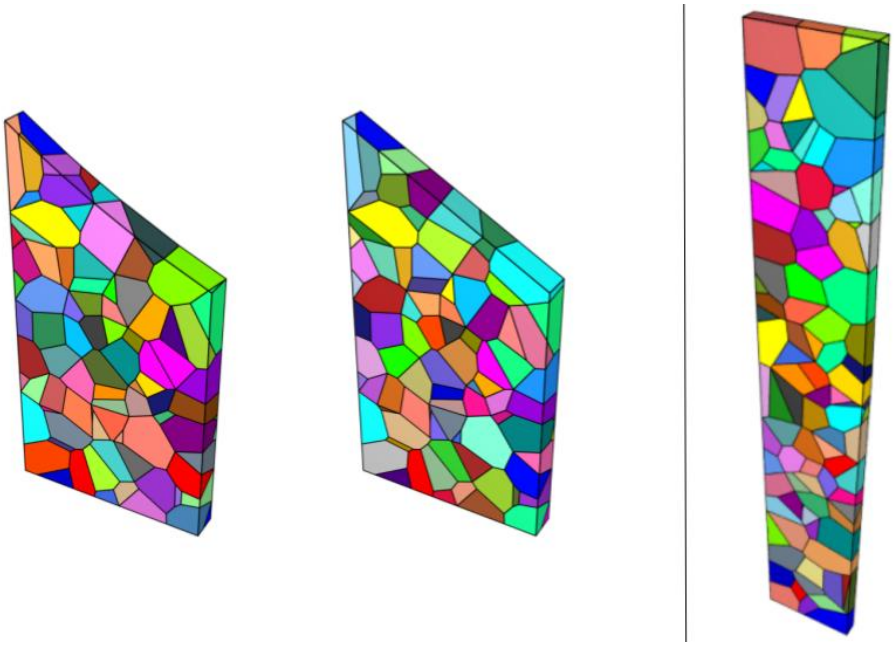


FIGURE 4.4 – Exemple de domaine A (avec et sans congé de raccordement) et B en 3D avec 100 grains

Les géométries étant correctement définies, nous pouvons maintenant définir le gradient de taille de grains à l'intérieur.

4.1.3 Création du gradient de microstructure

Nous utilisons ici la méthode proposée par BAUDOIN, 2015 pour la génération d'un gradient de microstructure contrôlée, mais adaptée pour un modèle 3D

1. Uniquement pour le domaine 1 qui contient un congé de raccordement

(contre un modèle 2D pour Baudoin).

Celui-ci propose de décomposer le domaine en sous-domaines de tailles identiques, comme illustré dans la figure 4.5 issue de son manuscrit, et de définir un nombre de grains (ou germes) dans chaque sous-domaine. Plus le nombre de grains dans une couche est élevé, plus les grains sont petits. Ainsi, en définissant un nombre croissant de grains à travers les sous-domaines, nous générons un gradient de microstructure contrôlée par l'évolution du nombre de germes à travers les couches (évolution linéaire, exponentielle etc.).

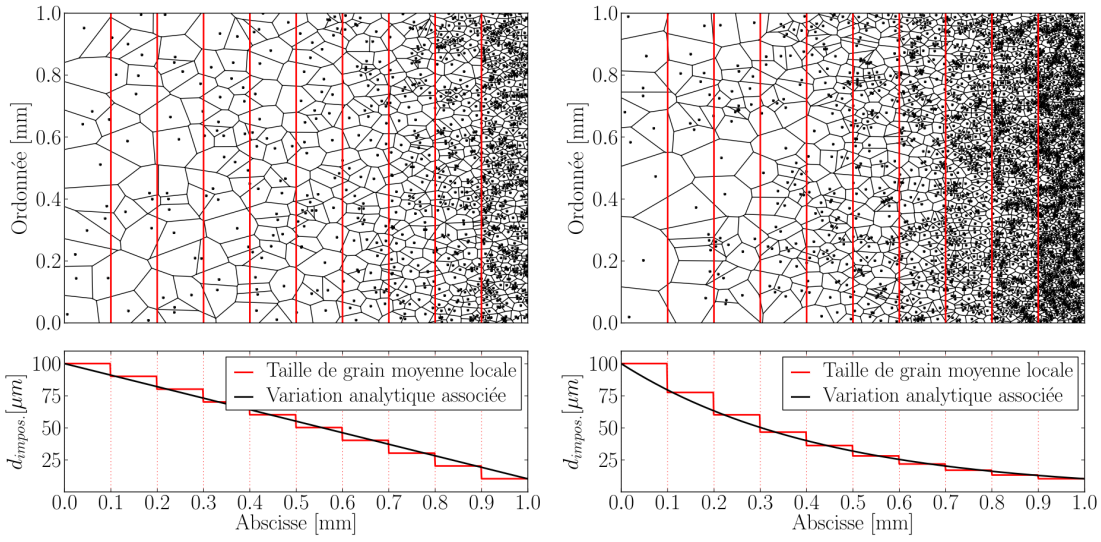


FIGURE 4.5 – Génération de gradients de microstructure numériques selon Baudoin

La décomposition en sous-domaines est possible sur Neper, mais les grains de chaque couche sont délimités de façon trop stricte par la décomposition du domaine, ce qui donne un aspect trop structuré et qui n'est pas représentatif de la réalité. Nous procédons donc autrement, en définissant nous-même le centre des grains et en les fournissant à Neper. Celui-ci est alors capable de générer une microstructure à partir de ces coordonnées.

La création du champ se fait en deux parties :

1. la partie se trouvant immédiatement sous la portée de calage, dans laquelle le gradient est selon une unique direction (Région 1) ;

2. la partie qui se situe au niveau du rayon de raccordement et dans laquelle le gradient se fait selon deux directions (Région 2).

Création du champ de points dans la région 1

Étant donné que nous modélisons un secteur angulaire d'un essieu cylindrique, nous travaillons sur les deux régions avec des coordonnées cylindriques. Les coordonnées des points délimitant la région 1 du domaine A sont visibles dans l'annexe A.

Ainsi, nous obtenons des coordonnées r qui se situent dans l'intervalle $[R_{min},R_{max}]$=[94.662mm ;97.662mm]. Le gradient se faisant radialement, nous décomposons cet intervalle en N sous-intervalles de taille :

$$dr = \frac{R_{max} - R_{min}}{N} \tag{4.1}$$

Les sous-domaines sont ainsi définis de la façon suivante :
— $r \in [R_{min} + i \times dr \ ; \ R_{min} + (i+1) \times dr]$ avec $i \in [\![0 \ ; \ N-1]\!]$;
— $y \in [170 \ ; \ 174]$ pour le domaine A, et $y \in [0 \ ; \ 10]$ pour le domaine B ;
— $\theta \in [-0.25 \ ; \ 0]$.

Nous attribuons à chaque sous-domaine un nombre de grains. Baudoin a déterminé que les grains au coeur de l'essieu ($r = 0$) avait une taille de $t_{\max} = 0.5$ mm contre $t_{\min} = 0.1$ mm en surface ($r = R_{\max}$). Étant donné que la modélisation du gradient se fait sur une épaisseur relativement faible, on suppose que l'évolution de la taille de grains suit une loi affine de la forme :

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}_+^* &\to \mathbb{R}_+^* \\ t &\mapsto (t_{\min} - t_{\max})\frac{r}{R_{\max}} + t_{\max} \end{aligned}$$

On peut alors déterminer la taille caractéristique des grains à une profondeur quelconque entre $[R_{\min};R_{\max}]$ et attribuer alors à chaque sous-domaine un nombre de grain n_i :

$$n_i = \frac{V_{sous-domaine}}{t_i^3} = \frac{V_{sous-domaine}}{(f(R_{min} + i.dr))^3} \tag{4.2}$$

Nous obtenons ainsi les variations de tailles de grains de la figure 4.6.

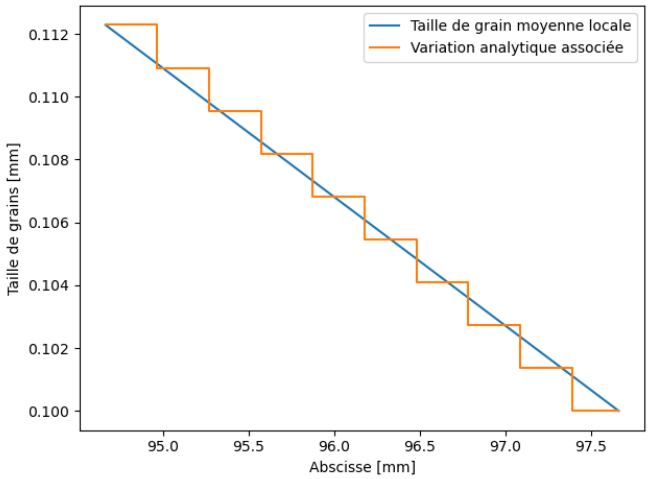


FIGURE 4.6 – Évolution de la taille de grains dans le domaine

Création du champ de points dans la région 2

Dans la région 2 du domaine A, le gradient est présent dans les directions radiale et axiale, en raison de la présence du congé de raccordement. Pour générer le nuage de points, nous réutilisons la méthode décrite précédemment à ceci près que nous ajoutons une subdivision axiale à la subdivision radiale du domaine.

Les coordonnées des points délimitant la région 2 du domaine A sont visibles dans le tableau A.2.

L'intervalle dans lequel varie r restant le même, nous gardons la valeur de dr déterminée dans la relation (4.1). La valeur axiale y évolue quant à elle dans l'intervalle $[H_{\min},H_{\max}]$=[174mm ;175.685mm]. En effectuant M divisions, la longueur axiale des domaines vaut alors :

$$dy = \frac{H_{\max} - H_{\min}}{M} \tag{4.3}$$

Les sous-domaines sont ainsi définis de la façon suivante :

— $r \in [R_{\min} + i \times dr \ ; \ R_{\min} + (i+1) \times dr]$ avec $i \in [\![0 \ ; \ N-1]\!]$;

— $y \in [H_{\min} + j \times dy \ ; \ H_{\min} + (j+1) \times dy]$ avec $j \in [\![0 \ ; \ M-1]\!]$;

— $\theta \in [-0.25\ ;\ 0]$.

La fonction déterminant la taille caractéristique des grains est maintenant de la forme :

$$g : [R_{\min}, R_{\max}] \times [H_{\min}, H_{\max}] \to \mathbb{R}_+^*$$
$$x, y \mapsto \frac{-1}{c}.(a.x + b.y + d)$$

avec a, b, c et d quatre réels.

Connaissant les tailles de grains pour divers point, nous pouvons alors déterminer les valeurs des composantes de la fonction g. Pour cela, nous nous plaçons dans un espace 3D, où les coordonnées (x, y, z) correspondent respectivement à la position radiale et la position axiale d'un point au sein de l'essieu, et à la taille caractéristique des grains en ce point. En créant les points $A(R_{min}, H_{min}, f(R_{min}))$, $B(R_{min}, H_{max}, t_{min})$ et $C(R_{max}, H_{min}, t_{min})$ et les vecteurs $\overrightarrow{AB}$ et $\overrightarrow{AC}$, les réels a, b, c et d correspondent aux coefficients de l'équation du plan P défini par ces deux vecteurs et passant par les 3 points. L'équation de ce plan est de la forme $ax + by + cz + d = 0$, et les coefficients sont obtenus d'une part en faisant le produit vectoriel des deux vecteurs, puis en cherchant l'unique plan passant par le point A (cf Figure 4.7)

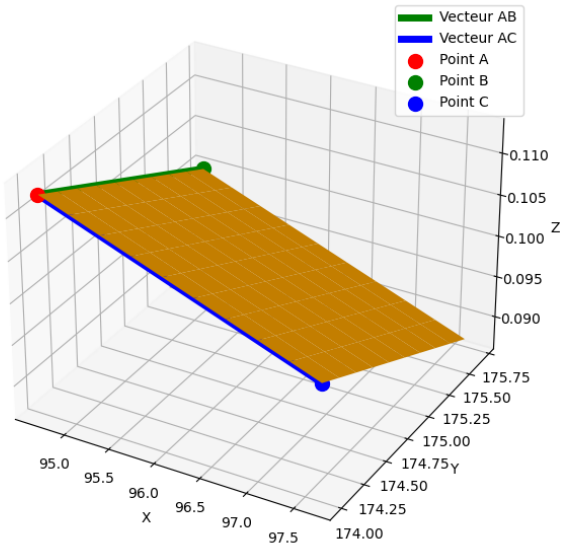


Figure 4.7 – Visualisation 3D du plan P

Les expressions des différents coefficients sont alors les suivantes :

— $a = (H_{max} - H_{min})(t_{min} - f(R_{min}))$;
— $b = (R_{max} - R_{min})(t_{min} - f(R_{min}))$;
— $c = -(H_{max} - H_{min})(R_{max} - R_{min})$;
— $d = -(a.R_{min} + b.H_{min} + c.f(R_{min}))$.

Nous attribuons ainsi à chaque sous-domaine un nombre de grains $n_{i,j}$:

$$n_{i,j} = \frac{V_{sous-domaine}}{t_{i,j}^3} = \frac{V_{sous-domaine}}{g(R_{min} + i.dr, H_{min} + j.dy)} \tag{4.4}$$

Nous pouvons ainsi visualiser la taille de grain affecté à chaque sous-domaine dans la figure 4.8. Sur celle-ci, un filtre rouge est appliqué pour différencier l'intérieur et l'extérieur du domaine. Ce filtre n'est ici utilisée que pour la visualisation. Nous générons en réalité des points dans l'ensemble du domaine décrit par cette image, mais Neper ne génère des grains que pour les points situés dans le domaine défini précédemment à l'aide des plans.

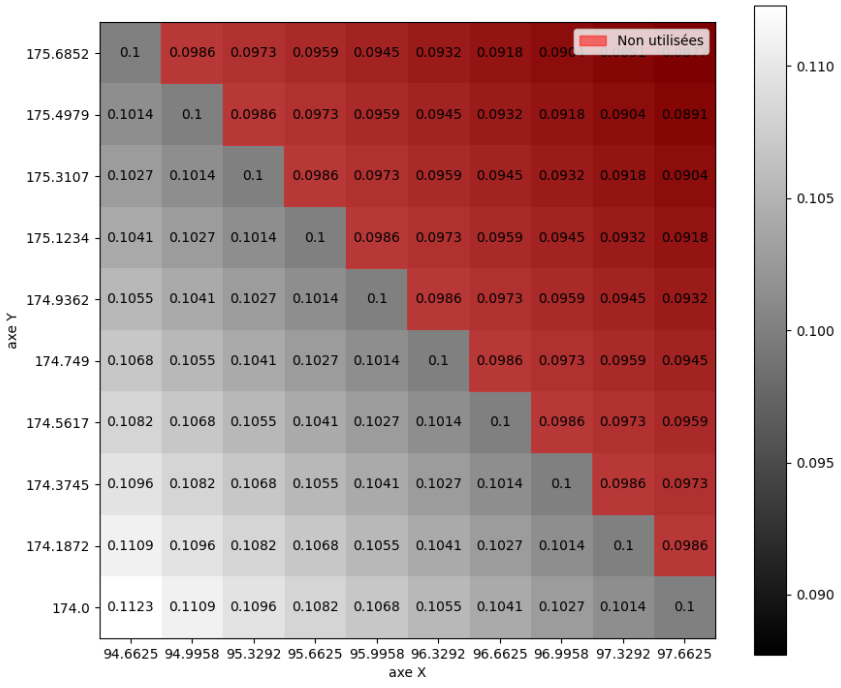


FIGURE 4.8 – Evolution de la taille de grains dans le chanfrein du domaine A

4.1.4 Génération du modèle 3D

L'obtention d'une tessellation se basant sur les observations de Baudoin, 2015 se fait via la commande suivante dans un terminal Linux :

```
neper
-T
-n N_points
-domain "planes(planes.txt)"
-morphooptiini "coo:file(points.txt)"
-o "Tess"
-transform "cut(cylinder(x_center,y_center,z_center,
x_axis,y_axis,z_axis,R_cylinder)"
-reg "1"
```

avec :

- 'neper' : appel du programme neper ;
- '-T' : appel du module de génération de tessellation ;
- '-n' : définition du nombre de cellules. Ici, nous définissons un nombre N_{points} correspondant au nombre de points générés dans la section 4.1.3 ;
- '-domain' : définition du domaine qui contient la tessellation ;
- '-morphooptiini' : définition de la position des centres des grains ;
- '-o' : définition du nom du fichier de sortie ;
- '-transform' [2] : application d'une transformation sur la tesselation (translation, rotation, coupure, etc.).

Il est ensuite possible de générer un maillage sous la forme d'un fichier .inp utilisable par Abaqus. Pour cela, il suffit d'utiliser la commande suivante :

```
        neper
        -M "Tess.tess"
        -o "Mesh"
        -format "inp"
        -faset "faces"
```

avec :

2. Uniquement pour le domaine A qui contient le chanfrein

— 'neper' : appel du programme neper ;
— '-M' : appel du module de maillage ;
— '-o' : définition du nom du fichier de sortie ;
— '-format' : choix du type du fichier de sortie. Ici, nous générons un fichier .inp lisible par Abaqus ;
— '-faset' : création de sets d'éléments correspondants aux surfaces extérieures du domaine, qui seront utiles pour la co-simulation.

Un exemple de domaines A et B en 3D est visible dans la figure 4.9, et les maillages correspondants sont montrés dans la figure 4.10.

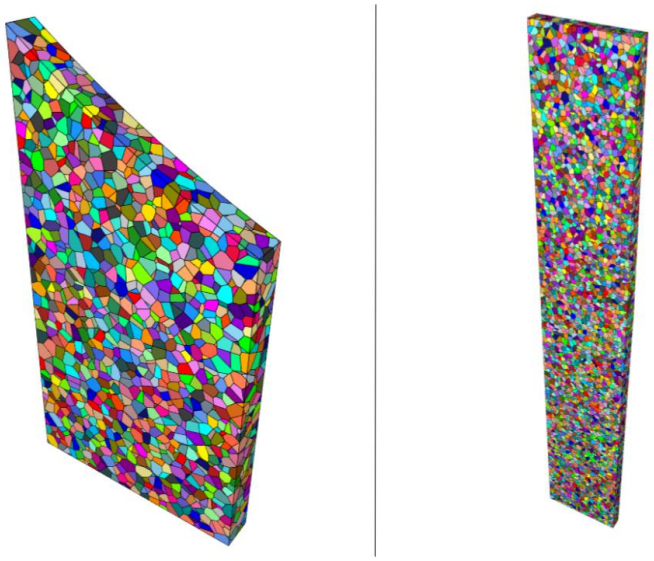


FIGURE 4.9 – Tessellation 3D des domaines A (gauche) et B (droite)

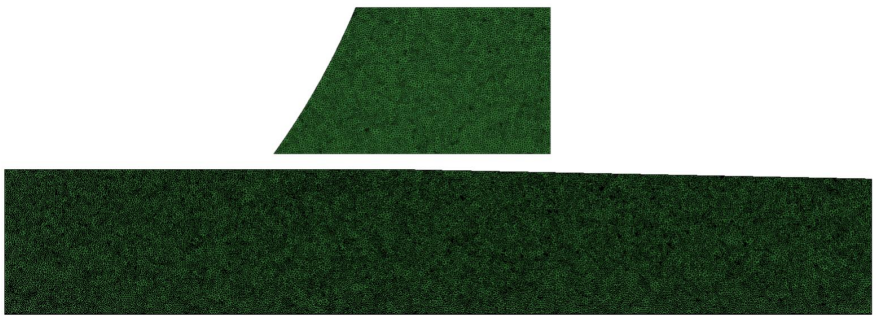


FIGURE 4.10 – Maillage 3D des domaines A et B obtenus avec Neper

4.1.5 Définition de la limite élastique selon la loi de Hall-Petch

Les paramètres élasto-plastiques de l'essieu ont déjà été définis par Hendrycks dans son travail. Il s'agit d'un acier EA1N ayant pour caractéristiques :

— Module de Young $E = 203000$ MPa ;
— Coefficient de Poisson $\nu = 0.3$;
— Limite élastique $R_e = 200$ MPa.

Les paramètres élastiques restent identiques, mais la limite élastique varie pour chaque grain et est définie via la loi de Hall-Petch (Hall, 1951 ; J., 1953) :

$$\sigma_c = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \tag{4.5}$$

avec :

— σ_c : contrainte critique en MPa ;
— d : taille du grain en mm ;
— k : coefficient de durcissement en MPa$\sqrt{\text{mm}}$ (constante propre au matériau) ;
— σ_0 : constante du matériau pour la contrainte initiale du mouvement de dislocation, en MPa.

Baudoin ayant déjà travaillé sur le matériau qui compose l'essieu et sur la modélisation d'un gradient de microstructure dans une éprouvette entaillée, nous utilisons les valeurs qu'il a déterminées dans ses travaux, à savoir $\sigma_0 = 100$ MPa et $k = 0.8$ MPa$\sqrt{\text{mm}}$.

4.2 Couplage global/local

4.2.1 Présentation de la méthode

Introduction

Le couplage global/local est une technique de modélisation qui permet de combiner efficacité et précision dans les simulations numériques de structures complexes (Allix et Gosselet, 2020 ; Blanchard et al., 2019a ; Gendre et al., 2009). Elle consiste à utiliser de concert plusieurs modèles :

— un modèle global en charge de retranscrire le comportement général de la structure. Il possède généralement un maillage grossier pour minimiser le coût de calcul ;
— un ou plusieurs modèles locaux qui se focalisent sur les zones d'intérêt avec une précision supérieure (maillage plus fin, meilleure modélisation de la géométrie et/ou du matériau etc.).

Le couplage global/local peut être vu comme une amélioration de la technique du *submodeling* (Cormier et al., 1999) très utilisée dans l'industrie. Elle consiste à réaliser un premier calcul global, et se servir des résultats du global comme condition limite (en général déplacement) des modèles locaux. Cette méthode a l'avantage d'être simple et peu coûteuse. Cependant elle ne prend pas en compte l'impact que le modèle local peut avoir sur le modèle global, ce qui peut entraîner des erreurs importantes à toutes les échelles.

Pour corriger ce problème, le couplage global/local consiste à réintroduire des résultats du modèle local dans le modèle global, et à itérer jusqu'à converger vers la solution où toutes les interactions ont été prises en compte, celle que l'on obtiendrait en substituant les modèles locaux dans les zones d'intérêt du modèle global. Nous utilisons ici cette méthode avec le logiciel Abaqus (Smith, 2009), avec qui la méthode a déjà été mise en œuvre via des scripts python (Blanchard et al., 2019b ; Gendre et al., 2009) et qui possède depuis sa version 2022 des outils plus efficaces pour réaliser ce type de couplage (Bettinotti et al., 2024).

Cette section s'attache à présenter le fonctionnement de la méthode de couplage global/local, et s'appuie sur un exemple simple, qui est celui de la traction sur un plaque rectangulaire 2D percée en son centre. Pour l'utilisation de cette méthode, nous distinguons différents modèles (cf figure 4.11) :

— le domaine global Ω^G ;
— le domaine local de substitution (ou fin) Ω^F qui modélise de façon la plus réaliste possible la zone d'intérêt ;
— le domaine local auxiliaire Ω^A qui reprend la position de la zone d'intérêt dans le modèle global ;
— le modèle global complémentaire qui est celui non couvert par le patch $\Omega^C = \Omega^G \setminus \Omega^A$.

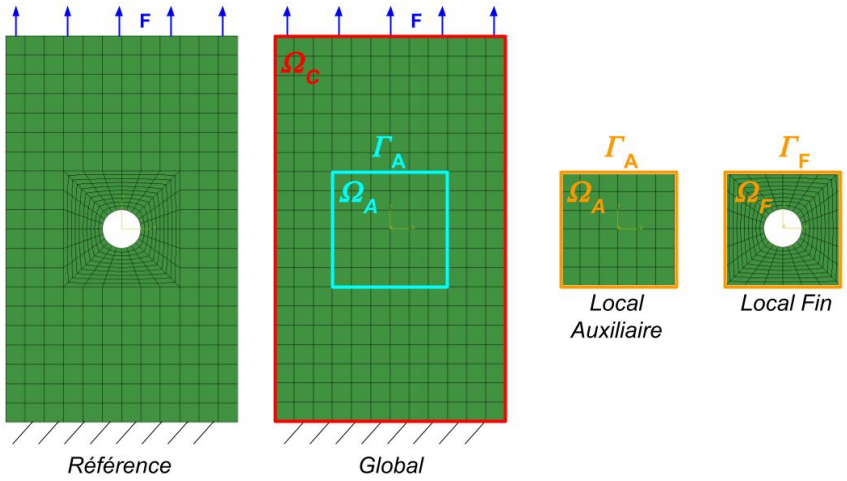


FIGURE 4.11 – Exemple d'application du couplage global/local : Traction sur une plaque trouée

Méthodologie

Concrètement, la méthode consiste à remplacer, dans le modèle global, le domaine auxiliaire par le domaine de substitution et d'atteindre la continuité et l'équilibre qui se traduisent par les relations suivantes, en supposant des maillages conformes :

$$\begin{aligned} U_{\Gamma_G} - U_{\Gamma_F} &= 0 \\ \lambda_C + \lambda_F &= 0 \end{aligned} \tag{4.6}$$

avec :

- Γ : les noeuds de l'interface dans le modèle global ;
- Γ_F : les noeuds de l'interface dans le modèle local de substitution ;
- U_{Γ_G} : le déplacement des noeuds de Γ ;
- U_{Γ_F} : le déplacement des noeuds de Γ_F [m] ;
- λ_C : les réactions nodales sur l'interface Γ côté complémentaire [N] ;
- λ_F : les réactions nodales sur l'interface Γ_F [N].

Pour réaliser la substitution, nous introduisons dans le modèle global un chargement p qui est appliqué sur Γ_A. Celui-ci correspond à la valeur manquante pour atteindre l'équilibre entre la zone complémentaire du modèle global (c'est-à-dire le domaine $\Omega_G \backslash \Omega_A$) et la représentation fine de la zone d'intérêt. L'objectif est donc de déterminer ce chargement. Pour cela, pour chaque incrément de

temps, la méthodologie est la suivante :

1. Initialiser un chargement p de façon arbitraire (en général par 0 ou par la valeur convergée au pas précédent) ;
2. Réaliser le calcul global en imposant les conditions aux limites du problème étudié et le chargement p sur Γ_G, puis évaluer le déplacement au niveau des noeuds qui composent l'interface ;
3. Réaliser le calcul local sur les deux domaines locaux (auxiliaire et substitution) en imposant sur Γ_A (côté patch) et Γ_F le déplacement déterminé à l'étape précédente. Puis évaluer les effort de réaction λ_A et λ_F dans les domaine locaux auxiliaire et de substitution ;
4. Déterminer le résidu, qui correspond à la différence entre l'effort de réaction λ_F et l'effort de la zone complémentaire λ_C ;
5. Mettre à jour le chargement en y ajoutant le résidu déterminé précédemment ;
6. Recommencer à partir de l'étape 2, et ce jusqu'à atteindre l'équilibre.

L'équilibre est contrôlé par un critère de convergence ϵ sur le résidu. Enfin, cette méthode est appliquée successivement pour chaque incrément du calcul, de telle sorte que nous obtenions l'équilibre recherché à chaque instant de la simulation. L'algorithme 1 synthétise la méthode, en utilisant une relaxation ω nécessaire pour assurer la convergence (Nouy et Pled, 2018) sous des standard d'élastoplasticité.

Algorithm 1 Couplage global/local avec relaxation ω

for t in step **do**
  Initialisation arbitraire de p_0 et résidu $|r_0| > \epsilon$
  while $|r_j| > \epsilon$ **do**
    Résoudre global avec chargement p_j. Calculer U_{Γ_A}
    Résoudre local aux/sub en imposant déplacement U_{Γ_A}. Calculer λ_A (côté patch) et λ_F.
    Déterminer résidu : $r_j = -(\lambda_F + p_j - \lambda_A)$
    Mettre à jour le chargement : $p_{j+1} = p_j + \omega r_j$
  end while
end for

Le facteur de relaxation ω est appliqué sur le résidu lors de la mise à jour du chargement, un bon choix permet d'accélérer la convergence. D'autres accélérations sont possibles (quasi-Newton, Broyden, etc.) comme celles utilisées par Blanchard, 2018 ; Gosselet et al., 2018, mais en pratique la relaxation dynamique (c'est à dire recalculée à chaque itération) d'Aitken se révèle très efficace à un coup quasi nul :

$$\begin{aligned} \omega_{j+1} &= \begin{cases} 1 \text{ si } j = 0 \\ \omega_j . \dfrac{r_j (r_j - r_{j-1})}{|r_j - r_{j-1}|^2} \; si \; j \in \mathbb{N}^* \end{cases} \\ p_{j+1} &= p_j + \omega_{j+1} r_j \end{aligned} \tag{4.7}$$

Mise en œuvre dans Abaqus

Le couplage global local a été mis en œuvre autour de nombreux codes industriels dont notamment Abaqus. L'implantation se fait traditionnellement à l'aide de scripts Python qui génèrent des mises en données pour exécuter des instances d'Abaqus et dépouiller les résultats (Blanchard et al., 2019b ; Gendre et al., 2009 ; Guinard et al., 2018). Dans les versions récentes d'Abaqus, une alternative est possible, basée sur la co-simulation (Bettinotti et al., 2024). Cette dernière permet de piloter « à chaud » des instances d'Abaqus sans avoir à les redémarrer, cela économise un grand coût de calcul, puisque le préprocessing est effectué une seule fois. En particulier dans les cas linéaire ou quasi-Newton, la factorisation des matrices peut être conservée.

Du fait de certaines incompatibilités d'options, les deux techniques de mises en œuvre ont été utilisées au cours de cette thèse en fonction des besoins des calculs. La prochaine sous-section présente une illustration simple du couplage global/local par co-simulation. Il s'agit de la première utilisation en dehors de l'équipe de Simulia qui l'a mise en œuvre.

Validation académique de la co-simulation

L'utilisation de cette méthode passe par l'introduction des mots-clef *CO-SIMULATION, *COSIMULATION-REGION et *COSIMULATION-CONTROL

dans les 2 fichiers .inp d'Abaqus (global et local). Ceux-ci permettent dans l'ordre de spécifier que le *step* actuel réalise une co-simulation, de préciser les variables échangées (déplacement, effort, température, etc.) et à travers quelles régions se fait le transfert (noeuds, éléments, surfaces), et enfin de définir le type de schéma utilisé pour la co-simulation (relaxation, critère de convergence, détection des régions d'échanges, etc). Ce dernier mot-clef peut-être remplacé par l'utilisation d'un fichier config.xml appelé lors du lancement du calcul. Ceci permet d'utiliser des schémas qui ne sont pas intégrés initialement dans Abaqus et offre plus de liberté.

La commande utilisée pour lancer le calcul est la suivante :

```
$ abaqus cosimulation job=global,local cosimjob=myCosim,
  config=cosim_config.xml
```

La méthode est validée ici sur un cas académique, modélisant la traction d'une plaque trouée en 2D. La plaque est de dimension 100mm x 60mm, avec un perçage de diamètre 10mm en son centre, et est constituée d'un matériau purement élastique, de module de Young $E = 70000$ MPa et de coefficient de Poisson $\nu = 0.3$. Un encastrement est imposé sur la face inférieure, et un déplacement de 1mm est imposé sur la face supérieure.

Les comparaisons entre les résultats obtenus avec le modèle direct, qui modélise la géométrie réelle, et ceux obtenus avec le couplage global/local en *1-way*, puis en *2-way* avec $\epsilon = 10^{-10}$ sont visibles respectivement dans les figures 4.12 et 4.13.

Dans le cas du couplage en *1-way*, une différence assez nette est visible sur le champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé, puisque le modèle global du couplage ne prend pas en compte le trou situé au centre, et considère uniquement une traction d'une plaque pleine. De plus, la contrainte maximale du modèle local qui est située au niveau du trou est, dans le premier cas, d'environ 1947 MPa, contre 1582 MPa dans le second, soit un écart relatif d'environ 18%, une valeur non négligeable.

À l'inverse, en comparant le modèle direct et le modèle couplé en *2-way*, nous observons un champ de contrainte extrêmement similaire entre les deux configurations, et une contrainte maximale de même valeur et située dans la

même zone, ce qui tend à confirmer la validité de cette méthode.

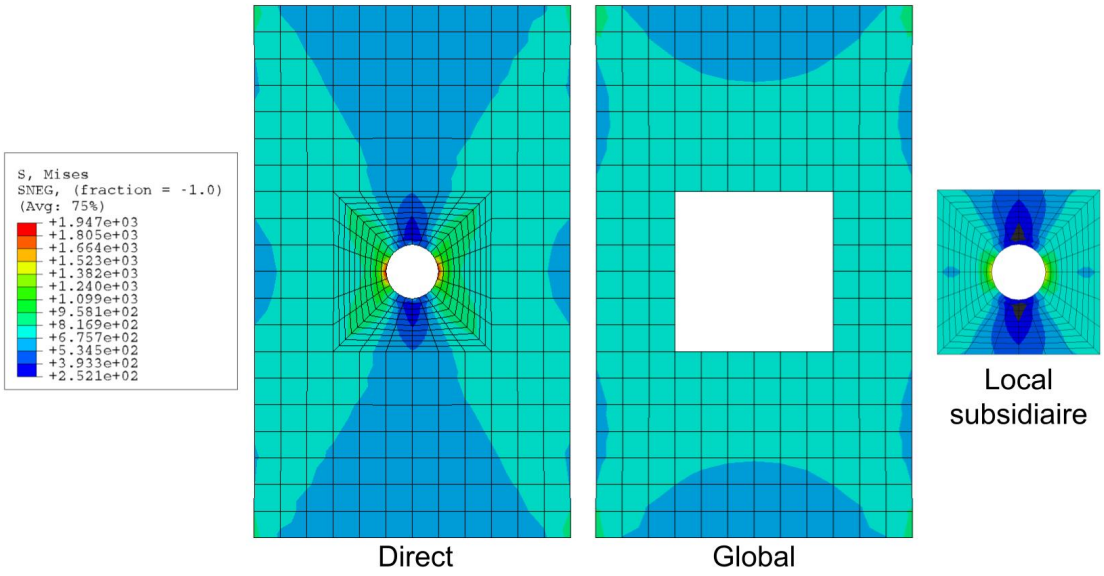


FIGURE 4.12 – Comparaison des résultats sur la contrainte issus du modèle direct et du couplage global/local en *1-way* (submodel)

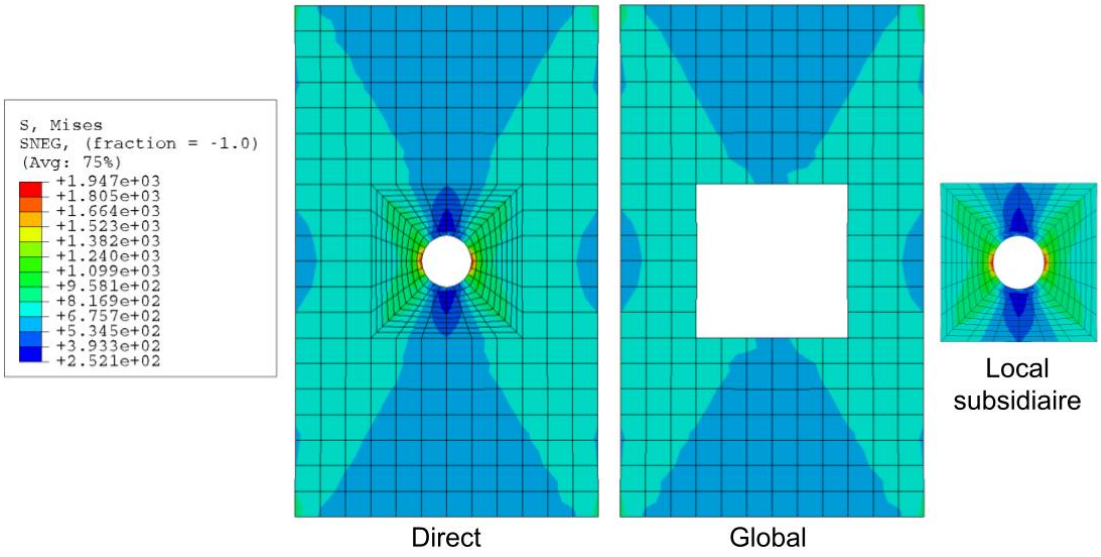


FIGURE 4.13 – Comparaison des résultats sur la contrainte issus du modèle direct et du couplage global/local en *2-way*

Les temps de calcul pour les différentes configurations sont regroupés dans le tableau 4.1. Nous pouvons alors observer que dans le cas présent, la méthode directe présente les meilleurs performances en terme de temps de calcul. De plus, la durée la plus importante est obtenue avec la technique de *submodeling*, qui nécessite de lancer un premier calcul global, puis un second calcul local, contre la technique de couplage *2-way* qui permet de lancer les deux en parallèle (même si le local doit attendre le résultat global pour calculer, le préprocessing a pu être masqué). Cela se justifie par la simplicité du modèle. À mesure que celui-ci se complexifierait, l'écart de temps se réduirait, jusqu'à ce que le temps de calcul soit inférieur pour les méthode de couplage, avec un temps minimal pour le *submodeling* qui ne nécessite que la succession d'un calcul global et d'un local par incrément de temps, contre parfois bien plus d'itérations pour le *2-way* pour s'assurer d'une précision suffisante.

Méthode	Temps [s]	Configuration
Directe	8.8	4 cpus
1-way (submodel)	36.6	4 cpus
2-way	14	2 x 2 cpus

Tableau 4.1 – Temps nécessaire pour la résolution pour les méthodes direct, *1-way* et *2-way*

Le couplage *2-way* présentant de bons résultats, nous pouvons l'appliquer à notre sujet d'étude.

4.2.2 Application au système essieu-roue

Présentation de la chaîne numérique

Dans le cadre du calage et de la flexion rotative, le modèle global reprend le modèle développé par Hendrycks (à la différence près que le calage se fait maintenant en 3D), et le modèle local contient l'une des deux extrémités de la portée de calage de l'essieu. Le contact entre la roue et l'essieu est uniquement défini dans le modèle global, et la surface d'échange du modèle local contient toutes les surfaces extérieures dans le but de prendre en compte le déplacement

global de l'essieu et déplacement de la portée due au contact entre la roue et l'essieu. L'originalité de cette application est ainsi la présence du contact sur le bord du patch dans le modèle global.

Étant donné qu'Abaqus ne permet pas d'avoir au sein d'un même fichier .inp plusieurs *steps* faisant appel à de la co-simulation, il est nécessaire de diviser le modèle en autant de fichiers .inp qu'il y a de *steps*, multiplié par 2 (un fichier pour le global et un autre pour le local). La chaîne numérique est ensuite obtenue à travers l'utilisation du *keyword* *RESTART qui permet de redémarrer une simulation là où elle s'est arrêtée. Il suffit alors de définir dans le premier fichier .inp (qui correspond au calage de la roue sur l'essieu) les géométries, les matériaux, les différents paramètres et le premier *step*. Les autres fichiers contiennent uniquement le *keyword* *RESTART et le nouveau *step*. L'ensemble des *steps* est défini dans le tableau 4.2 et reprend une partie du modèle numérique de Hendrycks.

Numéro du *step*	Nom du *step*	Définition
1	CALAGE	Insertion et glissement de la roue le long de l'essieu
2	RETRAIT-PRESSE	Retrait de la presse utilisée pour caler la roue
3	REMOVE-BOUNDARY	Suppression des conditions aux limites ayant permis la modélisation de l'opération de calage
4	LOADING-Z-DIR	Initialisation du chargement simulant la flexion rotative
5	LOADING-STEP	Début de la rotation du chargement
6	ROTATION-STEP	Modélisation de la flexion rotative

Tableau 4.2 – Chaîne numérique pour le modèle calage + flexion rotative

Dans la réalité lors de l'utilisation du banc d'essai de flexion rotative qui permet de simuler la sollicitation de l'éprouvette, le chargement se fait progressi-

vement pendant les 10 premiers cycles, jusqu'à atteindre la valeur consigne afin d'éviter une dégradation prématurée de celle-ci, entraînant ainsi un déplacement en spirale de plus en plus grandes. Afin de réduire le temps de simulation, nous reprenons l'idée d'Hendrycks qui a été validée dans ses travaux, et qui consiste à remplacer les 5 premiers cycles par un déplacement uniaxial (LOADING-Z-DIR), puis à ajouter la rotation dans les 5 cycles suivants (LOADING-STEP).

Nous pouvons ainsi regarder les résultats premièrement à la fin de l'étape de calage, puis à la fin de la flexion rotative, et ce pour les deux extrémités de la portée de calage de l'essieu qui sont les zones les plus sollicitées, et les comparer avec les résultats obtenus avec le modèle de Hendrycks (matériau homogène et coefficient de frottement dépendant de la pression). Les maillages sont systématiquement masqués pour le domaine local pour une meilleure visibilité, en raison de la taille très fine des éléments qui masque les résultats.

Résultats du couplage local/global - Calage

Les résultats pour la fin de la portée de calage (côté congé de raccordement, domaine A) sont visibles sur les figures 4.14 et 4.15, et ceux pour le début de la portée (côté chanfrein, domaine B) sont visibles sur les figures 4.16 et 4.17

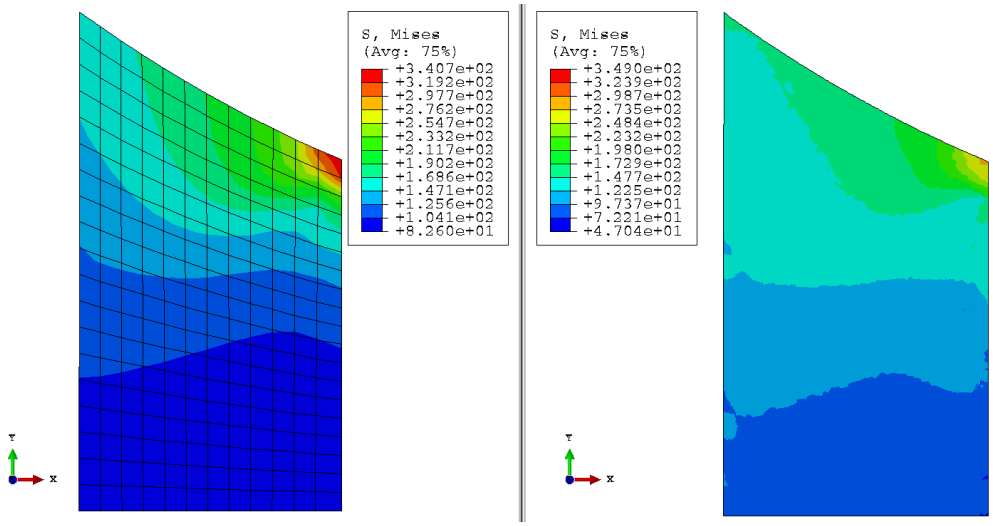


FIGURE 4.14 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue)

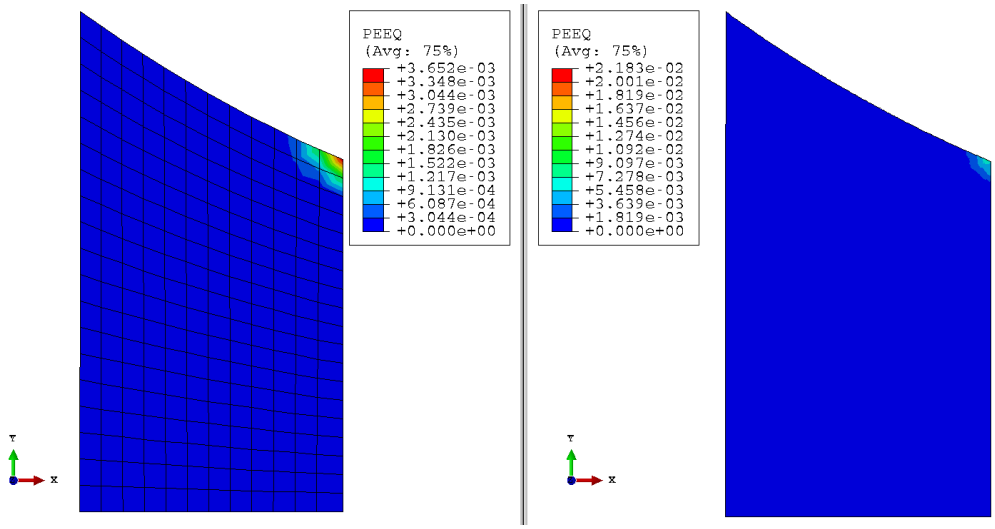


FIGURE 4.15 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue)

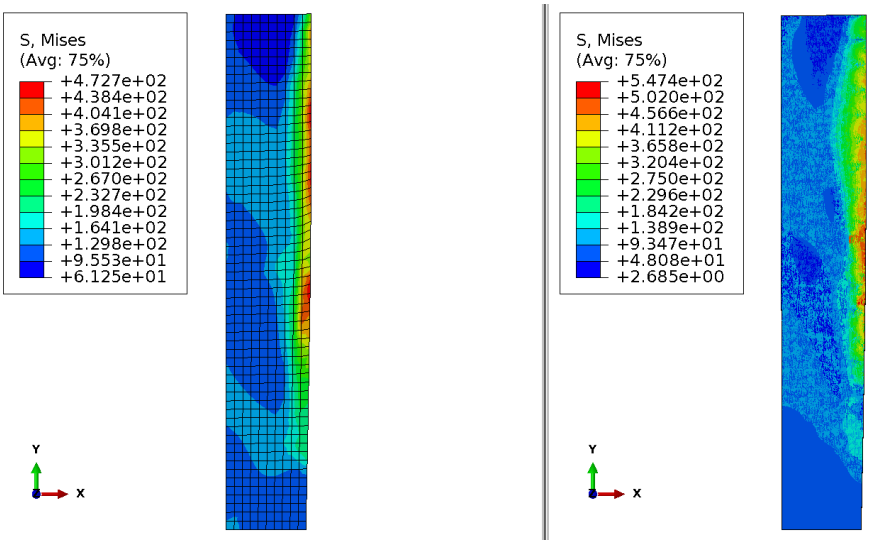


FIGURE 4.16 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après calage de la roue)

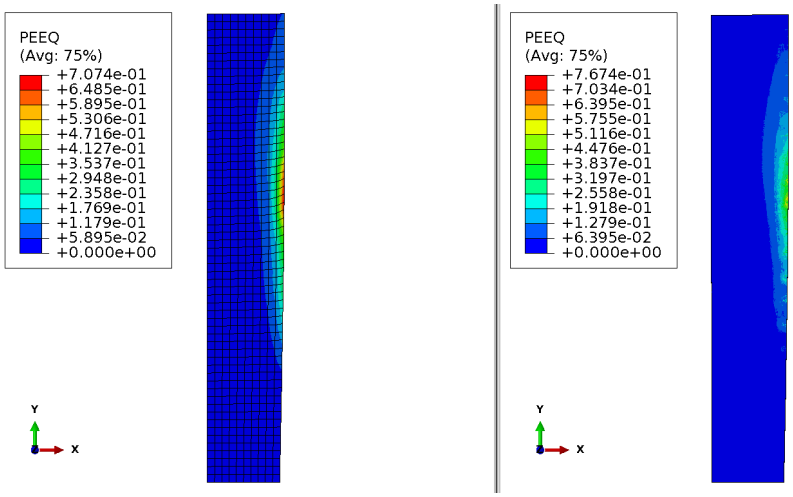


FIGURE 4.17 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après calage de la roue)

Nous observons des champs de contrainte et de déformations assez similaires dans les deux configurations, avec tout de même une contrainte et une déformation plastique maximale plus importantes dans le modèle couplé que dans le modèle initial. Dans la fin de portée de calage, les valeurs maximales se situent en début de congé de raccordement, tandis que pour le chanfrein d'entrée, elles sont situées dans la zone entrant en premier en contact avec la roue lors du début de l'opération de calage, entraînant un cisaillement des surfaces.

Deux raisons peuvent justifier cette augmentation des valeurs maximales :

— l'utilisation de la microstructure et d'une loi de Hall Petch en se basant sur les résultats de Baudoin a globalement diminué la limite élastique des grains situés dans le domaine local. Étant donné que les champs de contraintes sont relativement proches entre les deux modèles, la déformation plastique augmente en conséquence ;

— la déformation et la contrainte maximale se situent au niveau d'un bord libre, ce qui entraîne l'apparition d'une singularité. En conséquence, la diminution de la taille globale des éléments au niveau de cette singularité entraîne une augmentation de la contrainte et donc de la déformation plastique.

Résultats du couplage local/global - Flexion rotative

Les résultats de la fin de la portée de calage sont visibles sur les figures 4.18 et 4.19, et ceux du début de la portée sont visibles sur les figures 4.20 et 4.21.

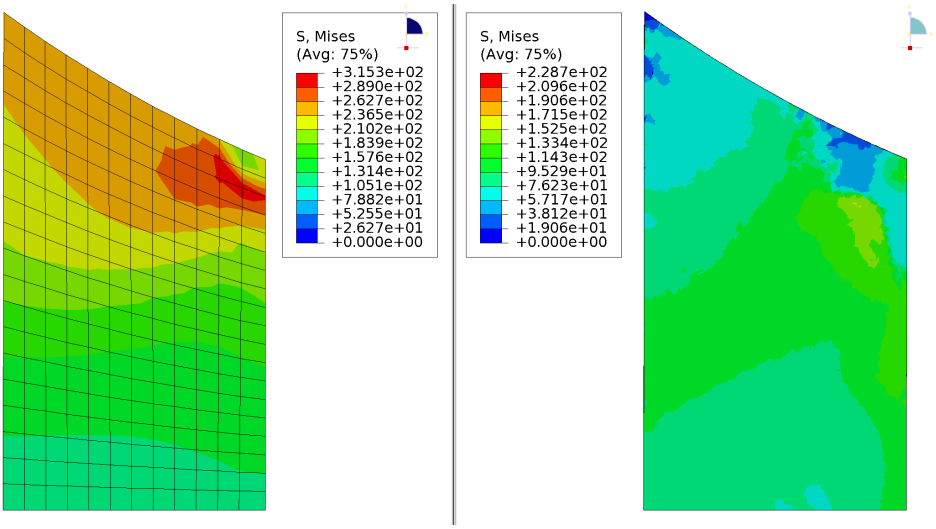


FIGURE 4.18 – Comparaison des champs de contraintes entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative)

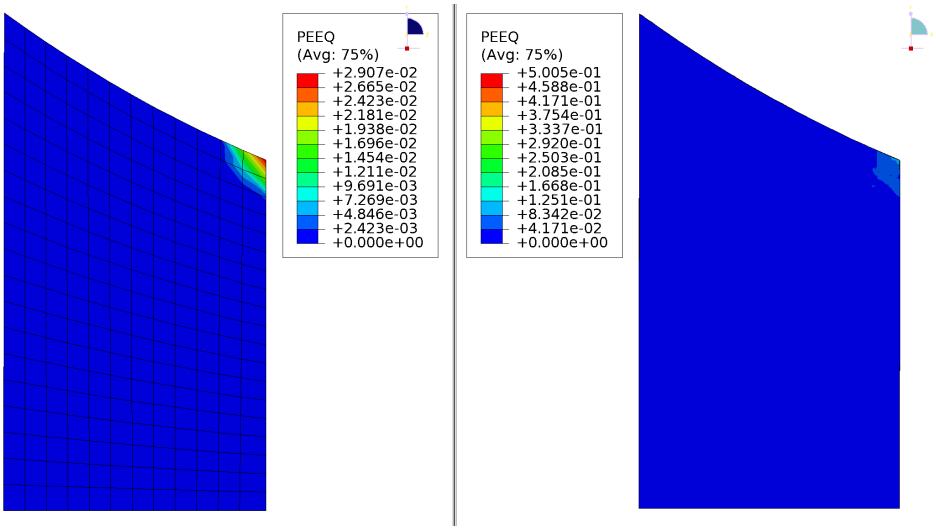


FIGURE 4.19 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative)

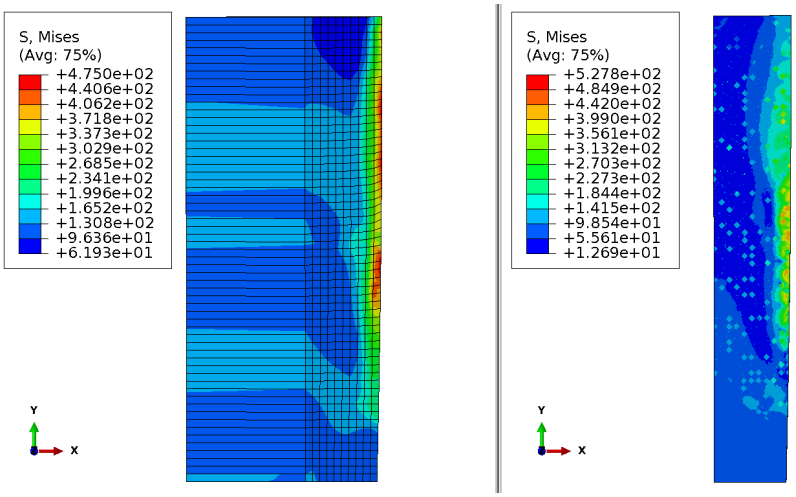


FIGURE 4.20 – Comparaison des champs de contraintes entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion rotative)

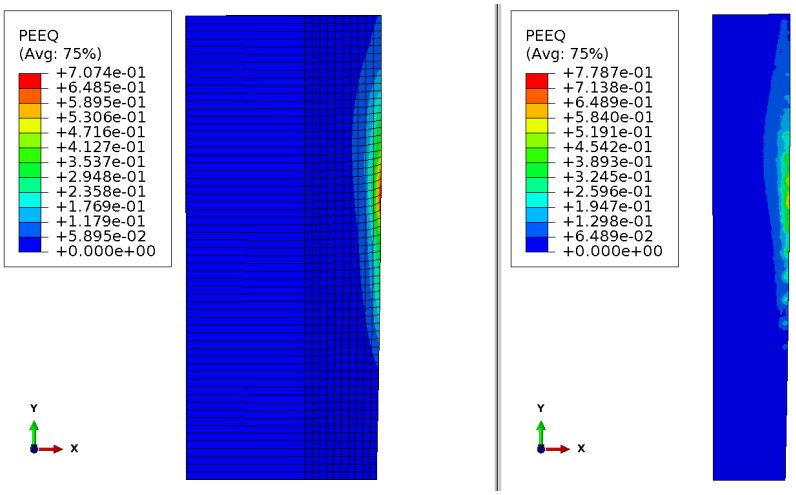


FIGURE 4.21 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion rotative)

Côté chanfrein, les champs de contrainte et de déformation plastique sont de nouveau assez similaires entre les deux configurations, avec une très faible variation entre la fin du calage et la fin du dixième cycle de flexion rotative. La présence du gradient de microstructure semble ainsi avoir très peu d'impact

dans cette zone.

En revanche, au niveau du congé de raccordement, on remarque une nette différence entre les deux champs de contraintes. Si la contrainte maximale est située dans la même zone, c'est-à-dire légèrement en dessous de la surface extérieure de la portée de calage, et avant le point extrême, la répartition de la contrainte est totalement différente entre les deux modèles. Dans le cas où le matériau est considéré comme purement homogène, la contrainte décroît globalement à mesure que l'on s'éloigne du maximum. En revanche, dans le cas avec microstructure, la contrainte semble se concentrer en surface de l'essieu.

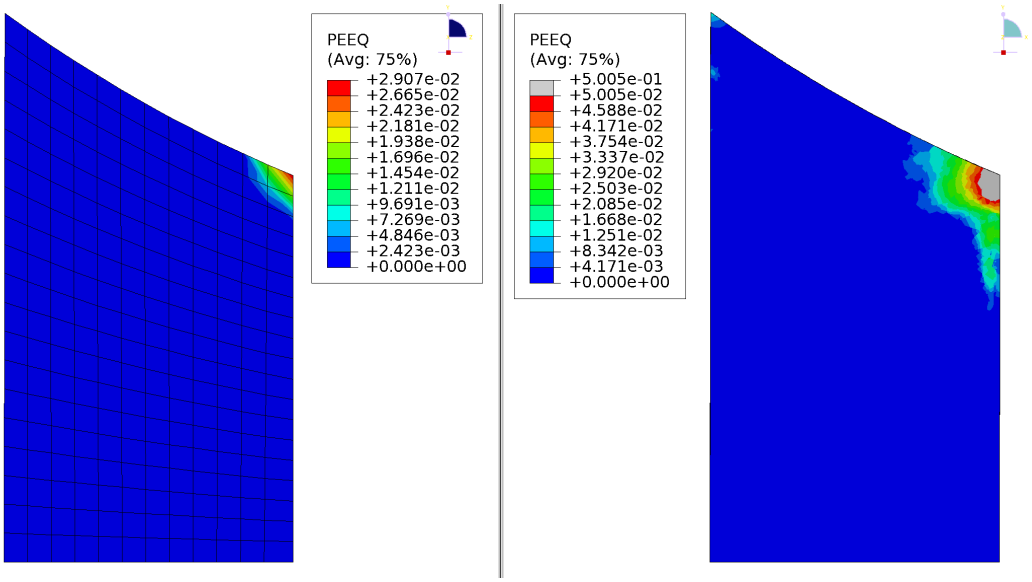


FIGURE 4.22 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion rotative) - modification de l'échelle du modèle couplé

Concernant la déformation plastique, en modifiant l'échelle des résultats du modèle couplé à celle du modèle initiale (cf figure 4.22), nous constatons une plastification qui commence au début du congé de raccordement et qui s'étale en surface le long de l'essieu, jusque quelques millimètres, phénomène absent du modèle initial. Cela va ainsi dans le sens des résultats expérimentaux puisqu'un phénomène de fissuration a effectivement été constaté à quelques millimètres des extrémités des portées de calage des essieux.

4.3 Conclusions

L'opération de forgeage qui permet de fabriquer les essieux est susceptible d'engendrer un gradient de microstructure, caractérisé par Baudoin, 2015; Yameogo, 2004, à l'intérieur de l'essieu. Ce gradient est bien connu, et est même désiré et contrôlé par l'industriel, puisque celui-ci permet à l'essieu d'avoir une durée de vie plus importante par rapport à un essieu à microstructure globalement constante. Ce gradient de microstructure est accompagné d'un gradient de propriétés qu'il est nécessaire de prendre en compte dans les modèles numériques. Ce chapitre a mis en évidence les différences tant sur la répartition de la contrainte que sur la plasticité en proposant un modèle prenant en compte l'hétérogénéité de l'essieu dans les zones critiques. Afin de relier la fraction hétérogène à celle homogène, une mise en œuvre du couplage global/local par co-simulation dans Abaqus est proposée. Il est maintenant possible d'ajouter à ce modèle l'aspect rugosité qui a été détaillé dans les chapitres 2 et 3, puis d'étudier la tenue en fatigue de l'essieu sur un plus grand nombre de cycles.

Chapitre 5

Application des outils développés pour la création d'un modèle multi-échelle

Sommaire du présent chapitre

5.1 Co-simulation séquentielle complète **117**

5.1.1 Adaptation de la méthode d'intégration des coefficients de frottement dans le cas 3D 118

5.1.2 Résultats de l'opération de calage 121

5.1.3 Résultat de l'opération de flexion rotative 125

5.2 Recherche du cycle limite **128**

5.2.1 Méthodes numériques 129

5.2.2 Développement d'une méthode de couplage global/local pour une analyse directe cyclique 131

5.2.3 Application au système essieu-roue 140

5.3 Conclusion **146**

Dans ce chapitre, nous nous appuyons sur les outils et méthodes développés dans les chapitres précédents pour construire un modèle multi-échelle intégrant à la fois la rugosité des surfaces de contact et la microstructure réelle des essieux. L'objectif est de créer un modèle numérique capable de simuler de manière précise les phénomènes mécaniques à différentes échelles, depuis la microstructure jusqu'aux sollicitations cycliques. L'accent est mis sur l'enrichissement des modèles par des techniques de co-simulation et d'intelligence artificielle, afin d'optimiser à la fois la précision des prédictions et l'efficacité des calculs. Ce chapitre présente la mise en œuvre d'une co-simulation séquentielle combinant les résultats issus de la méthode des éléments discrets (DEM) et des éléments finis (FEM). Cette approche permet d'intégrer les informations sur la rugosité des surfaces et leur impact sur le frottement, tout en prenant en compte les variations de microstructure à l'échelle locale. Le couplage global/local est ensuite utilisé pour prédire les comportements mécaniques à plus grande échelle, notamment en ce qui concerne la flexion rotative des essieux. L'analyse des cycles limites est également abordée, afin de mieux estimer la durée de vie en fatigue du système essieu-roue.

5.1 Co-simulation de l'opération de calage et de la flexion rotative avec enrichissement du coefficient de frottement

Dans cette partie, nous utilisons les outils développés dans les chapitres précédents pour développer un modèle prenant en compte la rugosité des surfaces en contact, et la microstructure réelle de l'essieu. Une modification est tout de même à apporter sur le premier point, puisque la méthodologie avait été développé pour un modèle 2D. Étant donné que nous souhaitons prendre également en compte la microstructure, ce qui nécessite l'utilisation d'un modèle 3D, des modifications sont à apporter sur la méthode d'intégration des coefficients de frottement.

5.1.1 Adaptation de la méthode d'intégration des coefficients de frottement dans le cas 3D

Dans le chapitre 2, un modèle par éléments discrets a été développé pour modéliser le contact entre deux surfaces rugueuses. Un grand nombre de simulations a été réalisé afin de générer une base de données suffisamment grande pour l'apprentissage d'une IA. Cette dernière est ensuite utilisée pour générer des coefficients de frottement qui sont introduits dans le modèle éléments finis simulant l'opération de calage. Plus précisément, afin de simuler l'évolution du contact rugueux entre les deux surfaces due au déplacement de la roue le long de l'essieu, à la présence d'aspérités, et à l'usure des surfaces, le contact initial entre la portée de calage de l'essieu et le rayon interne du moyeu du modèle 2D est divisé en N sous-contacts, avec N le nombre d'éléments finis le long de la portée de calage de l'essieu. Ainsi, un contact est créé entre chaque élément de la portée de calage et la roue, et nous pouvons attribuer à chaque contact un coefficient de frottement différent. En attribuant un coefficient de frottement en se basant sur la coordonnée axiale de l'élément, nous pouvions simuler un scénario d'évolution d'usure des surfaces.

Cependant, le couplage entre cette méthode et l'utilisation de la cosimulation pour la prise en compte du gradient de microstructure au sein de l'essieu nécessite d'adapter cette méthode à un cas 3D. Idéalement, il faudrait :

1. définir un nombre d'éléments dans la direction radiale de telle sorte que chaque élément de la portée de calage ait une taille de 1mm ;
2. définir, pour chaque élément de la portée de calage, un contact avec la roue et son propre coefficient de frottement.

Cependant chacun de ces 2 points augmenterait considérablement la complexité du calcul, et donc le temps et la puissance nécessaire pour réaliser celui-ci. Étant donné que la thèse a aussi un objectif industriel, il est alors nécessaire d'avoir un modèle robuste qui reste raisonnable en temps et puissance de calcul.

Étant donné que le système essieu-roue présente un axe de révolution, nous proposons de définir sur l'essieu N surfaces, où chaque surface contient l'ensemble des éléments finis situés à la même position axiale, et de définir un

contact entre chaque nouvelle surface, et la surface interne de la roue. Enfin, de manière analogue au cas 2D, nous attribuons un coefficient de frottement par contact.

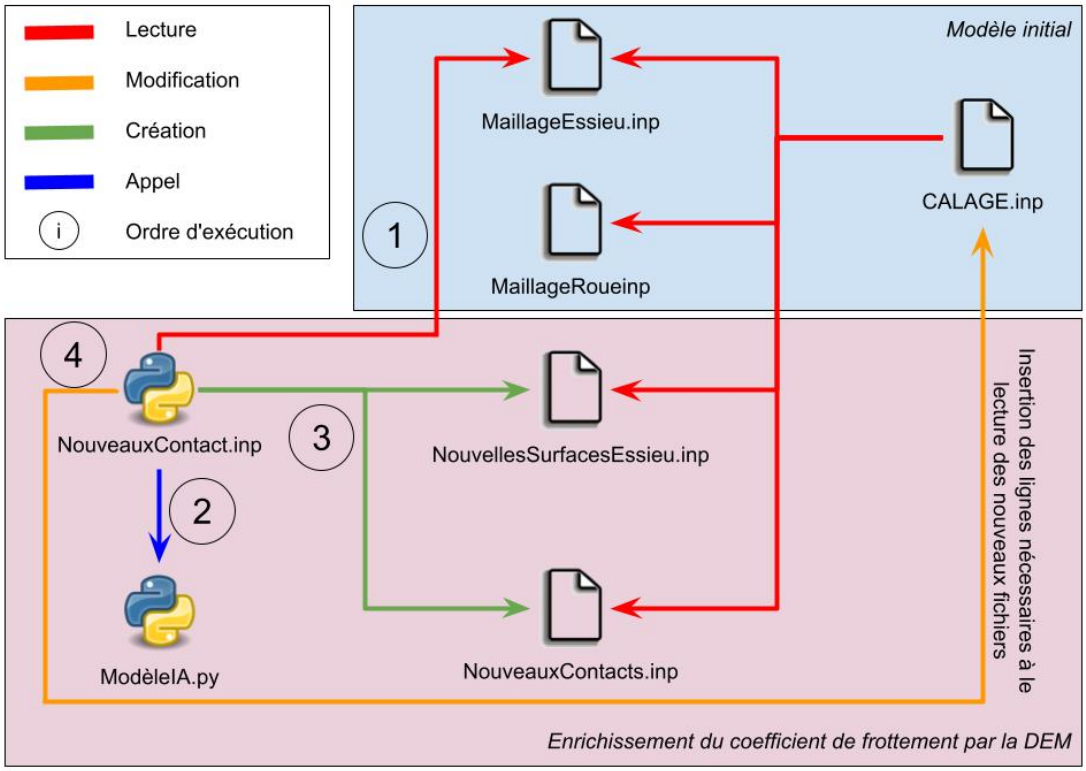


FIGURE 5.1 – Résumé de l'enrichissement du modèle de calage à travers la DEM et l'IA

Étant donné le nombre relativement élevé d'éléments qui composent la portée de calage (environ 190) et le nombre d'éléments dans la direction radiale (21), la création des surfaces a été automatisée à l'aide d'un programme Python. Celui-ci est capable

1. d'ouvrir le fichier .inp contenant le maillage 3D de l'essieu ;
2. de récupérer les numéros des éléments qui composent la portée de calage et les coordonnées des noeuds qui les délimitent ;
3. de regrouper ces éléments en fonction de leur position axiale ;
4. de créer une surface pour chaque « étage » d'éléments ;

5. de créer un contact entre chaque nouvel surface cylindrique et le moyeu, en définissant un coefficient de frottement obtenu avec le modèle IA.

Par souci de lisibilité du fichier .inp, les nouveaux contacts et surfaces sont définis dans 2 fichiers .inp secondaires, qui sont ensuite appelés dans le fichier principal avec le *keyword* ***INCLUDE**. En effet, chaque surface ne contient plus un seul élément, mais 21 éléments (soit le nombre d'éléments dans la direction radiale). La méthodologie entière est résumée sur la figure 5.1.

Après avoir appliqué cette méthode, nous pouvons visualiser les surfaces générées avec Abaqus pour s'assurer qu'elles ont été correctement définies. La figure 5.2 montre ainsi l'une des 193 surfaces de la portée créée grâce à la méthode décrite précédemment.

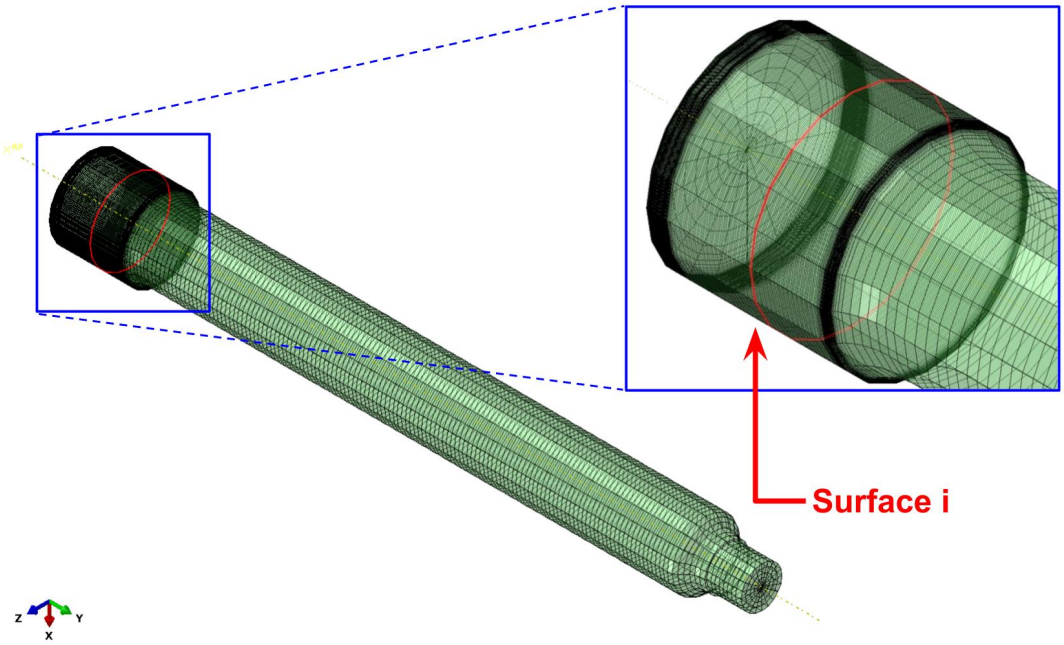


FIGURE 5.2 – Visualisation des surfaces cylindriques créés pour l'intégration des coefficients de frottement

Nous pouvons ainsi combiner les coefficients de frottement déterminés au chapitre 3 avec la co-simulation détaillée dans le chapitre 4 pour obtenir un modèle multi-échelle prenant en compte la microstructure réelle de l'essieu et l'usure des surfaces en contact. Les résultats sont affichés dans la section 5.1.2 et

sont comparés avec ceux obtenus avec le modèle initial, qui utilisait un facteur de Coulomb dépendant de la pression de contact. L'utilisation de ce dernier permettait ainsi de simuler l'usure des surfaces et permettait de se rapprocher partiellement des courbes de calage expérimentales. De nouveau, le maillage de la microstructure réelle de l'essieu est masqué pour une meilleure visibilité des résultats. Nous détaillons premièrement les résultats dans l'extrémité de la portée de calage de l'essieu côté congé de raccordement (Domaine A), puis dans l'extrémité côté chanfrein d'entrée (Domaine B).

5.1.2 Résultats de l'opération de calage

Domaine A

Le champ de contrainte et la plasticité dans le domaine A sont successivement affichés dans les figures 5.3 et 5.4.Les résultats obtenus sont proches de ceux présentés dans la section 4.2.2 puisque le champ de contrainte est très similaire à celui obtenu avec le modèle initial. La contrainte maximale est localisée dans les deux modèles au niveau de l'arête délimitant la portée de calage et le congé de raccordement. Cette contrainte maximale est simplement légèrement plus élevée dans le modèle couplée avec un écart relatif de 3.7%, une différence négligeable, et est également légèrement plus élevée que dans le modèle couplé mais avec un facteur de coulomb dépendant de la pression de contact avec un écart de 1.2%.

La déformation plastique est localisée au même emplacement que la contrainte maximale dans les deux modèles, avec cette fois-ci un écart plus important sur les valeurs maximales puisque nous obtenons une valeur maximale environ 6 fois plus importante. Cependant, les champs de déformation sont de nouveau très similaires. De plus, la valeur maximale est quasi-identique à celle obtenue dans la section 4.2.2. Nous pouvons alors supposer que la microstructure dans cette zone a une influence mineure sur les résultats du calage de la roue.

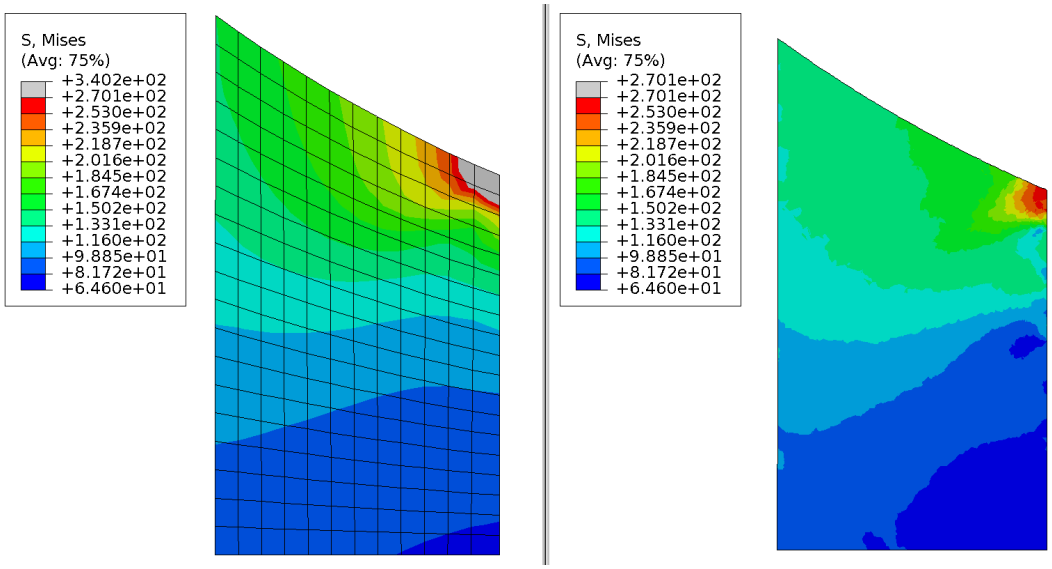


FIGURE 5.3 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue)

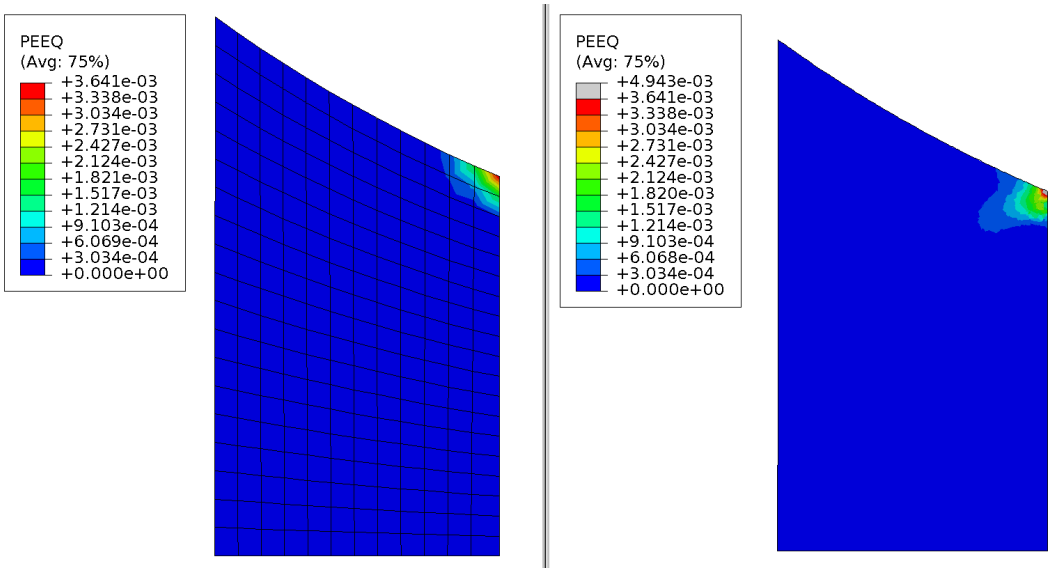


FIGURE 5.4 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après calage de la roue)

Domaine B

Le champ de contrainte et la plasticité dans le domaine B sont successivement affichés sur les figures 5.5 et 5.6.

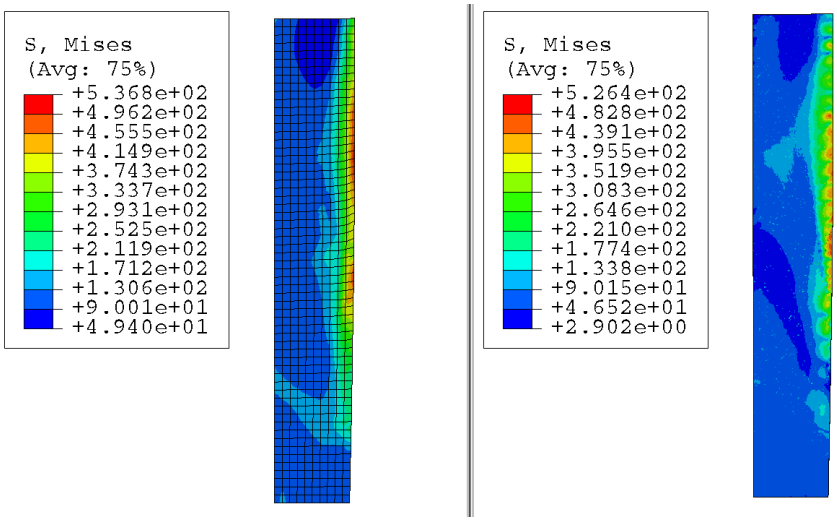


Figure 5.5 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après calage de la roue)

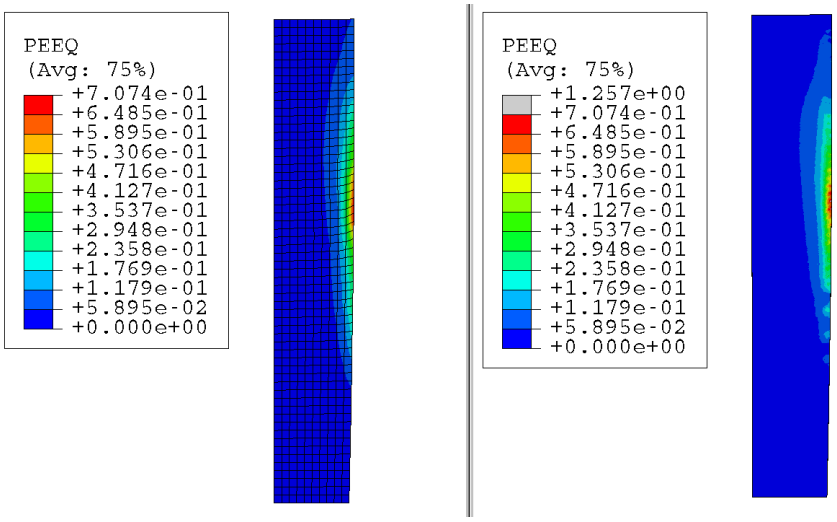


Figure 5.6 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début fin de portée (après calage de la roue)

Les résultats sont relativement similaires à ceux du modèle initial, aussi bien en contrainte qu'en déformation plastique. L'intégration de la microstructure dans cette zone ne semble donc pas être prépondérante pour le dimensionnement de l'essieu.

Courbes de calage

Enfin, nous pouvons tracer les courbes de calage obtenues avec les deux modèles couplés, et les comparer avec le modèle enrichi mais sans couplage. En dehors de quelques variations principalement à d'éventuelles *cutbacks*, les courbes sont identiques. La microstructure n'a donc pas d'incidence sur la courbe de calage.

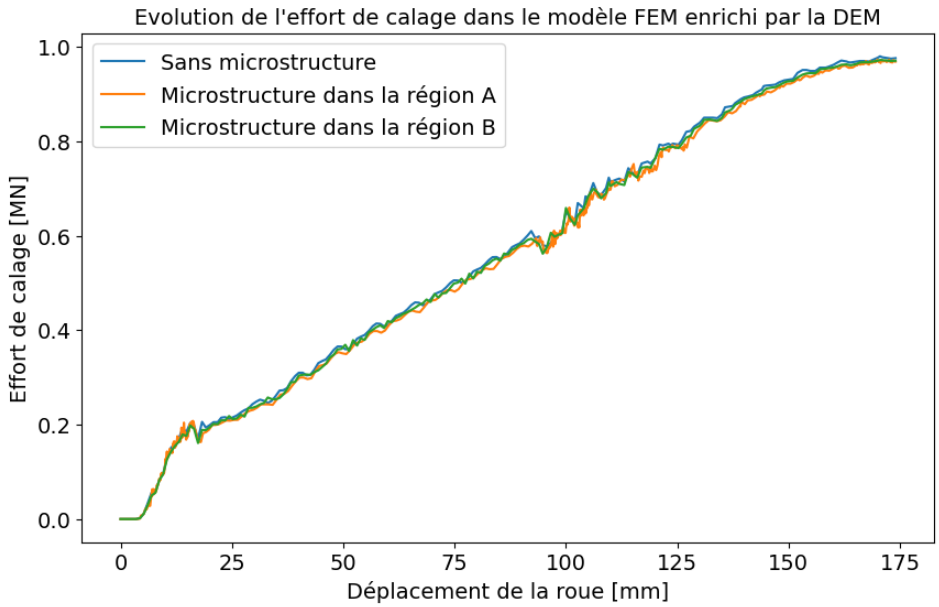


FIGURE 5.7 – Évolution de l'effort de calage en fonction du déplacement de la roue, pour le modèle initial et les modèles couplés

En raison des résultats relativement similaires entre le modèle initial et le modèle couplé, l'intégration de la microstructure ne semble pas être nécessaire dans le modèle de calage. La chaîne numérique pourrait alors être accélérée en modélisant cette opération sans couplage et avec un matériau homogène identique en tout point de l'essieu, comme réalisé dans le modèle de Hendrycks.

Le passage de la modélisation du calage à la modélisation de la flexion rotative pourrait ensuite se faire via un simple *mapping* afin d'utiliser les résultats du calage comme conditions initiales pour la flexion rotative, dans le modèle global et dans le modèle local.

5.1.3 Résultat de l'opération de flexion rotative

Domaine A

Le champ de contrainte et la plasticité dans le domaine A après 10 cycles de flexion rotative sont successivement affichés dans les figures 5.8 et 5.9. Les résultats issus du modèle couplé sont cette fois-ci différents d'une part de ceux obtenus avec le modèle initial vis-à-vis de la répartition de la contrainte, et d'autre part de ceux issus du modèle couplé mais non enrichi par la DEM vis-à-vis de la valeur maximale. La contrainte est ainsi plus faible que dans le modèle de Hendrycks, avec une concentration plus diffuse et située majoritairement au niveau de la surface de la portée de calage.

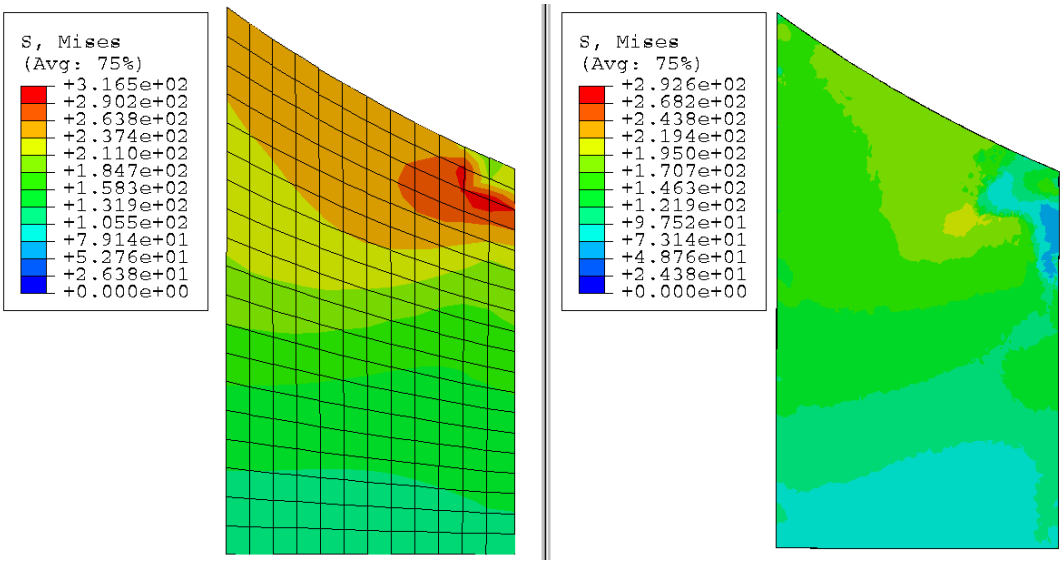


FIGURE 5.8 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion)

En parallèle, la déformation plastique est d'une part bien plus importante avec une valeur environ 20 fois plus importante, et s'étend d'autre part sur une zone bien plus large, le long de la surface extérieure de la portée.

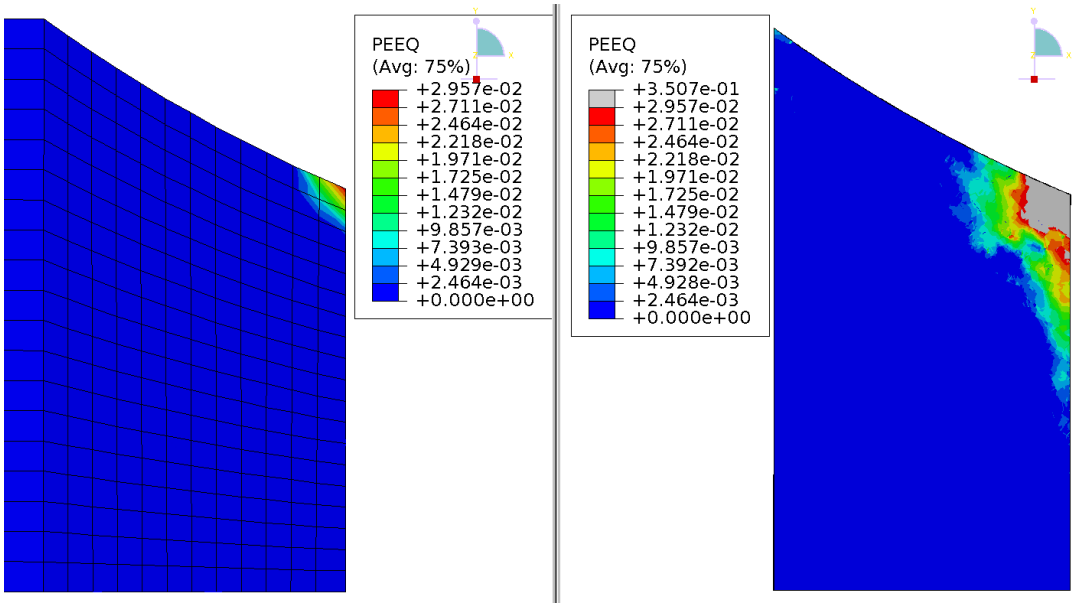


FIGURE 5.9 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) dans la fin de portée (après 10 cycles de flexion)

Domaine B

Le champ de contrainte et la plasticité dans le domaine B après 10 cycles de flexion rotative sont successivement affichés dans les figures 5.10 et 5.11. En dehors de la valeur maximale de déformation plastique, nous obtenons des résultats relativement similaires entre les deux modèles, aussi bien pour la contrainte que pour la plasticité. De nouveau, la modélisation de la microstructure dans le chanfrein de l'essieu ne semble donc pas avoir une grande influence sur les résultats.

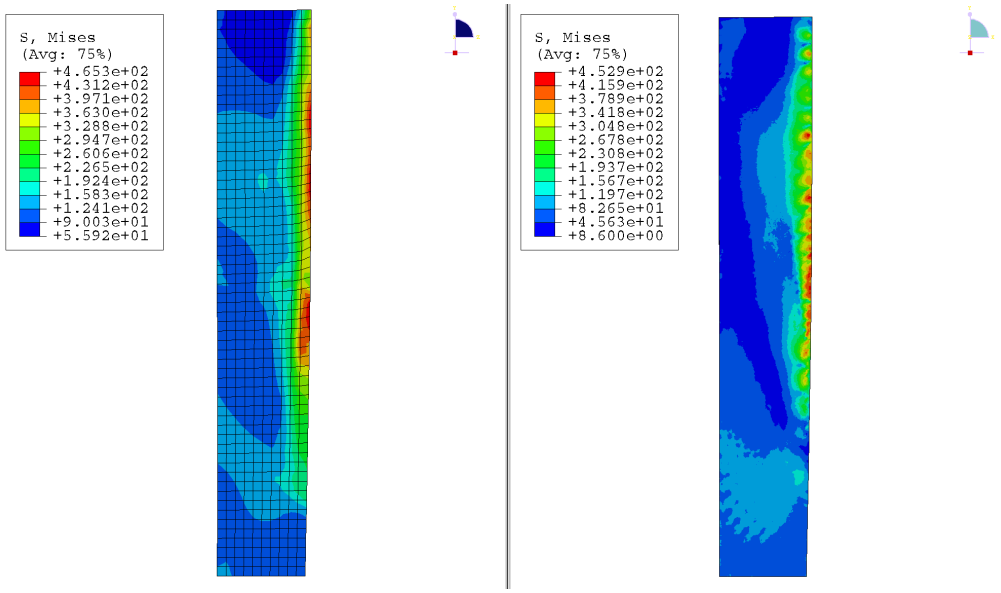


FIGURE 5.10 – Comparaison des champs de contrainte entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion)

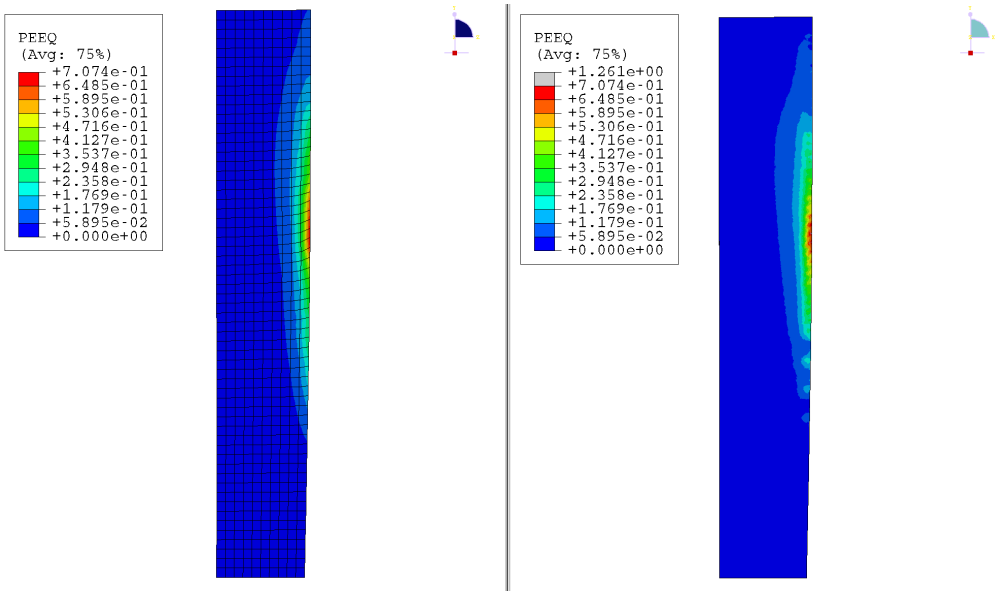


FIGURE 5.11 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle initial (gauche) et le modèle couplé et enrichi (droite) en début de portée (après 10 cycles de flexion)

À travers l'ensemble des résultats précédents, nous pouvons conclure que la modélisation de la microstructure n'est importante que dans le domaine A, soit au niveau du congé de raccordement, où la modélisation du gradient donne des résultats bien différents du modèle initial, et plus en accord des résultats expérimentaux. De plus, l'intégration de cette microstructure ne semble être nécessaire que pour l'étape de la flexion rotative, puisque les résultats sont similaires dans la modélisation du calage, aussi bien en contrainte et en plasticité que sur la courbe de calage. Il serait donc possible d'utiliser un premier modèle direct pour simuler l'opération de calage, puis de ne procéder au couplage global/local à partir de la mise en place de la sollicitation cyclique. Le champ de contrainte résiduels pourrait alors être intégré à travers un « mapping », permettant d'utiliser les résultats (contrainte, déplacement, plasticité etc..) d'un premier modèle comme conditions initiales pour un second modèle en supposant que les géométries soient similaires.

Cependant, seuls dix cycles de rotation ont été calculés en raison du coût temporel des simulations. Au vu de la durée importante pour réaliser le calcul, qui est principalement due à la cosimulation et à la modélisation du gradient de microstructure au sein de l'essieu, la recherche du cycle limite, c'est-à-dire le cycle à partir duquel la réponse mécanique du système ne varie plus d'un cycle à un autre, n'est pas possible avec un procédé séquentiel. En effet, simuler chaque cycle jusqu'à ne plus avoir de variation prendrait beaucoup de temps. La section suivante s'attache alors à utiliser une méthode permettant de trouver directement le cycle stabilisé.

5.2 Recherche du cycle limite

En raison de la nature cyclique du chargement, il est nécessaire d'étudier l'évolution de la contrainte et de la plasticité au cours des cycles. En effet, le dépassement de la limite élastique dans certaines zones de l'essieu engendre un champ de déformation plastique, créant ainsi un champ de contraintes résiduelles au sein de la pièce, pouvant totalement ou partiellement compenser la contrainte due aux chargements suivants. Selon le matériau et la géométrie,

différents états limites peuvent être observées, qui sont représentées dans la figure 5.12 sous la forme de courbes déformation/contrainte :

— adaptation : les premiers cycles engendrent des déformations plastiques au sein de la structure, jusqu'à atteindre une réponse asymptotique élastique en raison de l'écrouissage ;

— accommodation : la réponse asymptotique est une boucle d'hystérésis, c'est-à-dire une courbe fermée. La déformation plastique subit ainsi une modification pendant le cycle, mais celle-ci est identique dans tous les cycles suivants ;

— rochet : la structure n'atteint pas d'état stabilisé, et la déformation plastique augmente à chaque cycle.

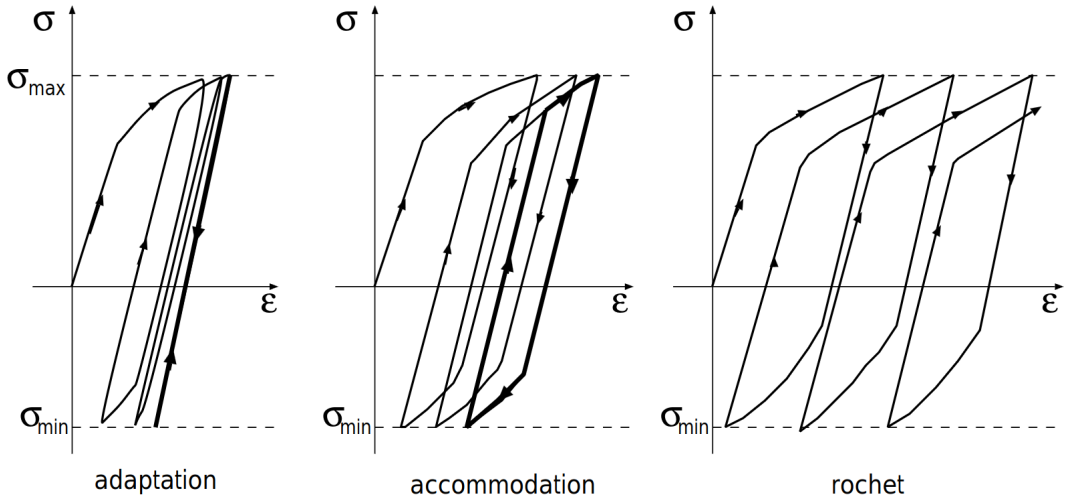


Figure 5.12 – États limites sous chargement cyclique (Maitournam, 2002

5.2.1 Méthodes numériques

Cependant, si l'état stabilisé existe, le nombre de cycles nécessaires pour l'atteindre peut-être élevé, se traduisant par un temps de simulation important dans le cas d'une méthode incrémentale consistant à simuler l'intégralité des cycles. Plusieurs méthodes numériques existent pour accélérer la recherche du cycle limite, comme :

— La méthode LArge Time INcrement (LATIN) (Ladevèze, 1989), qui consiste à décomposer le problème en une partie liée à des équations non-linéaires

et une autre liée à des équations linéaires, de résoudre chaque problème séparément, et de procéder de façon itérative jusqu'à atteindre la convergence et donc obtenir la solution du problème ;

— La méthode de Zarka et al., 1980, qui a pour objectif la recherche directe du cycle limite. Elle repose sur le calcul de la réponse élastique initiale d'une structure soumise à des charges cycliques, l'identification des zones où les contraintes dépassent la limite élastique, et la détermination d'un seuil de charge critique. En comparant la charge appliquée à ce seuil, on évalue si la structure se stabilisera sans accumuler de déformations plastiques supplémentaires ou si elle subira une déformation progressive ;

— La méthode de contrôle optimal (Peigney & Stolz, 2001, 2003), qui cherche à déterminer directement l'état stabilisé. Pour cela, une fonctionnelle J dépendant du champ de déformation et de l'écrouissage est définie. La détermination de l'état asymptotique se traduit alors comme la minimisation de cette variable J ;

— La méthode des sauts de cycle (Savalle & Culie, 1978), qui comme son nom l'indique, consiste à ignorer/sauter un certain nombre de cycles, afin d'accélérer le calcul. Elle repose sur le constat que les variables internes varient très peu d'un cycle à un autre, même si elles peuvent grandement varier pendant le cycle. En échantillonnant une variable, c'est-à-dire en récupérant les valeurs de cette variable au même instant dans chaque cycle, il est possible d'estimer l'évolution de celle-ci au cours des prochains cycles. Une longueur de sauts dépendant de la précision est alors définie à chaque itération, et l'état extrapolé sert d'état initial pour une nouvelle prédiction ;

— La méthode cyclique directe (Maitournam et al., 2002) consiste à partir d'une estimation initiale d'une solution périodique affinée à l'aide d'une décomposition en série de Fourier. Un ajustement est ensuite réalisé sur les paramètres pour que les équations du système soient satisfaites, obtenant ainsi directement le cycle limite.

Dans ses travaux, Hendrycks a utilisé une méthode de sauts de cycles, très généraliste dont l'association avec le couplage global/local a été étudié dans Allix et al., 2022. Même si elle impose quelques restrictions dans les phénomènes

pris en compte, en particulier pour son implémentation dans Abaqus, nous proposons d'utiliser une méthode directe cyclique dont l'association avec le couplage global/local nous semble très prometteur.

5.2.2 Développement d'une méthode de couplage global/local pour une analyse directe cyclique

L'objectif de cette partie consiste à adapter la méthode de couplage global/local utilisée précédemment pour l'appliquer dans une analyse directe cyclique. Cette dernière étant déjà introduite dans le logiciel *Abaqus*, son utilisation est assez aisée. Cependant, elle ne se prête pas directement à la co-simulation.

Allix et al., 2022 ont déjà travaillé sur la combinaison de la co-simulation avec une méthode de saut de cycles, et Oumaziz et al., 2017 ont intégré la méthode Latin et l'ont appliqué à des problèmes de contact avec frottement. Nous tâchons ici de procéder de manière analogue, mais avec analyse de type cyclique directe.

Son utilisation dans *Abaqus* se fait avec le mot-clef ***DIRECT CYCLIC** dans le fichier inp, qui définit un step utilisant cette méthode de résolution, à l'intérieur duquel doit être défini le chargement cyclique. *Abaqus* ne permet pas d'utiliser de la cosimulation dans un step d'analyse cyclique directe. L'idée est donc de procéder à une inversion de la boucle de résolution, en ne procédant plus à un transfert d'informations entre le global et le local à chaque incrément de temps, mais sur l'ensemble des pas de temps. Ainsi, nous serons en mesure d'introduire l'analyse cyclique directe dans chacun des deux modèles, et de relier les modèles global et local.

Nous utilisons alors une approche de type *Schwarz waveform relaxation* (Gander & Stuart, 1998) ou *iterative sequential coupling* qui consiste à résoudre séparément le modèle global et le modèle local, et de réaliser une boucle itérative entre analyses globale et locale lancées de façon séquentielle. La méthode se décompose ainsi :

1. Résolution du problème global sur tous ses pas de temps avec chargement sur l'interface de couplage, et envoi du déplacement d'interface sur tous

les pas de temps au modèle local.

2. Résolution du problème local avec une condition aux limites en déplacement à l'interface, et détermination de la réaction sur tous les pas de temps.
3. Calcul du résidu à chaque instant et correction du chargement sur le global sur tous les pas de temps.

Étant donné qu'il n'est plus possible d'utiliser le mot-clef ***COSIMULATION** au sein des fichiers .inp pour définir le lien entre le modèle global et le modèle local, le développement d'un nouveau script python, illustré dans la figure 5.13, est nécessaire pour automatiser le lancement des analyses et le transfert des résultats entre les modèles.

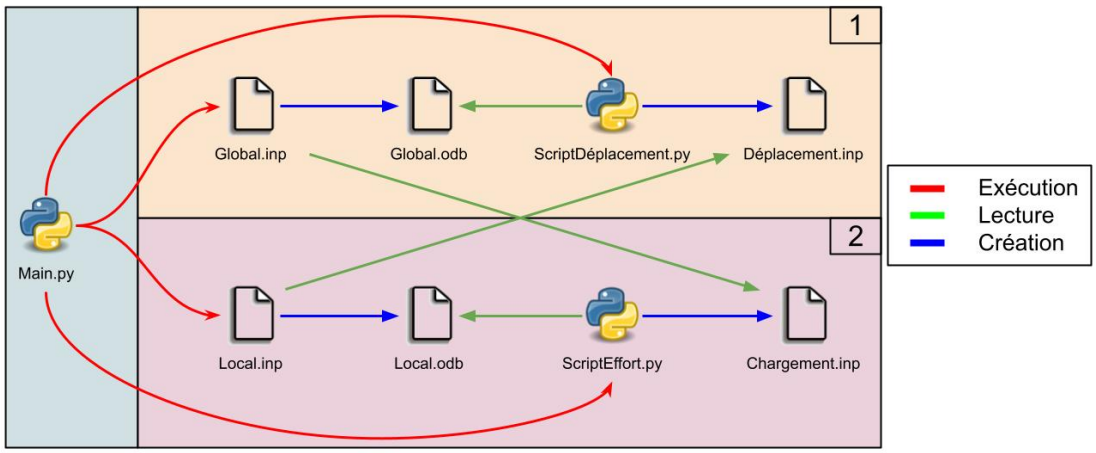


FIGURE 5.13 – Schématisation du fonctionnement de la méthode de couplage

Celui-ci est alors capable de :

1. effectuer un couplage noeud à noeud entre les deux modèles ;
2. créer un fichier "load.inp" contenant un chargement initial nul pour chaque noeud de l'interface Γ_G et un fichier "displacement.inp" contenant un déplacement nul pour chaque noeud couplés des interfaces Γ_G et Γ_F ;
3. lancer le calcul global en imposant sur Γ_G le chargement défini dans le fichier "load.inp" sur tous les pas de temps, récupérer à partir du fichier

.odb le déplacement de chacun des noeuds de Γ_A et mettre à jour le fichier "displacement.inp" ;

4. lancer le calcul local en imposant sur Γ_A et Γ_F le déplacement défini dans le fichier "displacement.inp" et récupérer les efforts de réaction ;
5. déterminer le nouveau chargement et mettre à jour le fichier "load.inp".
6. réitérer à partir de l'étape 3.

En vision algorithmique, voici ce que cela donne :

Algorithm 2 Couplage via python

```
Initialisation arbitraire de p_0(t) et résidu r_0 > ε
while r_j > ε do
  for t in step do
    Résoudre global avec chargement P_j(.,t). Calculer U_{Γ_G}(.,t)
  end for
  for t in step do
    Résoudre local aux/sub en imposant déplacement U_{Γ_G}(.,t). Calculer
    Λ_A(.,t) et Λ_F(.,t).
  end for
  for t in step do
    Déterminer résidu : R_j(t) = −(Λ_F(t) + P_j(t) − Λ_A(t))
    Mettre à jour le chargement : P_{j+1}(t) = P_j(t) + R_j(t)
  end for
  r_j = max_t ||R_j(t)||
end while
```

Avec la cosimulation, l'incompatibilité de maillage entre les modèles global et fin était gérée par le fichier *config* et l'utilisation d'un mapping toolkit (MTK) qui permet de projeter les quantités de façon conservative ou non, à partir de nœuds ou points d'intégration à condition que les surfaces d'échanges coïncident. Nous proposons ici une autre méthode consistant à ajouter dans le modèle local fin les noeuds et les éléments surfaciques correspondant pour représenter la surface d'échange du modèle global. En imposant que les noeuds qui délimitent cette « peau » aient les mêmes coordonnées que les noeuds de l'interface Γ_A, nous pouvons directement imposer le déplacement obtenu dans le modèle global sur les nœuds additionnels. La transmission du déplacement au modèle fin est

ensuite réalisée en imposant un *TIE* entre la nouvelle surface et la surface Γ_F. Le *TIE* est une contrainte qui relie deux surfaces, une maître et une esclave, de manière à ce que cette dernière (Γ_F) suive le déplacement du maître (ici Γ_A) tout au long de la simulation. La mise en œuvre du *TIE* dans Abaqus est très sophistiquée, elle dispose de différentes variantes dont une permettant de limiter les discontinuités de contrainte (en donnant une certaine liberté à la surface esclave, à l'instar des méthodes de mortar). Enfin la création de la peau dans le modèle de substitution permet de récupérer directement les efforts de réaction sur les noeuds qui la composent (sur le maillage grossier, ce qui permet de palier de nouveau l'incompatibilité de maillage) au lieu d'extraire ceux des noeuds de Γ_F. Dans (Guinard et al., 2018), il avait été proposé de séparer la surface d'incompatibilité (dans ce cas un raccord plaque-3D) et l'interface global-local, ici pour un raccord 3D-3D nous arrivons à gérer la discontinuité de maillage au niveau de l'interface.

Tout comme nous l'avons fait dans le chapitre 3, il est possible d'essayer d'utiliser un facteur de relaxation comme celui d'Aitken pour accélérer la convergence. La détermination du facteur de relaxation nécessite la transposition à une forme matricielle, où chaque matrice est de dimension (n, m) avec n le nombre de noeuds couplés m le nombre d'incréments temporels. Chaque colonne des matrices correspond à l'un des noeuds couplés, et chaque ligne correspond à un instant t. Ainsi, nous avons :

- P_j la matrice des chargement à l'itération j, avec la composante $p_{j_{x,t}}$ qui correspond au chargement sur le noeud x à l'instant t ;
- U_j la matrice des déplacement à l'itération j, avec la composante $u_{j_{x,t}}$ qui correspond au déplacement du noeud x à l'instant t ;
- Λ_j la matrice des efforts de réaction à l'itération j, avec la composante $\lambda_{j_{x,t}}$ qui correspond à l'effort de réaction du noeud x à l'instant t ;
- R_j la matrice des résidus à l'itération j, avec la composante $r_{j_{x,t}}$ qui correspond au résidu du noeud x à l'instant t.

Un unique facteur de relaxation est imposé à chaque itération pour l'ensemble des pas de temps. En imposant $\omega_1 = 1$, l'expression générale du coefficient

d'Aitken est la suivante :

$$\begin{aligned} \forall j \in \mathbb{N}^*,\ \omega_{j+1} &= \omega_j \frac{\mathrm{tr}(R_j^T(R_j - R_{j-1})}{\mathrm{tr}((R_j - R_{j-1})^T(R_j - R_{j-1}))} \\ P_{j+1} &= P_j + \omega_{j+1}.R_j \end{aligned} \tag{5.1}$$

où A^T représente la transposée de la matrice A et tr est l'opérateur de trace des matrices carrées.

L'algorithme intégrant la relaxation d'Aitken est donc :

Algorithm 3 Couplage via python avec relaxation d'Aitken

```
Initilisation arbitraire de P_0 et résidu r_0 > ε
while r_max > ε do
  for t in step do
    Résoudre global avec chargement P_j(.,t). Calculer U_ΓG(.,t)
  end for
  for t in step do
    Résoudre local aux/sub en imposant déplacement U_ΓG(.,t). Calculer
    Λ_A(.,t) et Λ_F(.,t).
  end for
  Déterminer résidu : R_j = −(Λ_Fj + P_j − Λ_Aj)
  Calculer matrice de relaxation Ω_j+1
  Mettre à jour le chargement : P_j+1 = P_j + Ω_j+1.R_j
  r_max = max_t r_j(t)
end while
```

Cette méthode de relaxation est ensuite testée sur le même cas test que le chapitre 3, à savoir la traction sur une plaque trouée en 2D.

Application sur un cas test

Étant donné la volonté d'utiliser notre algorithme pour une analyse directe cyclique, le chargement est modifié par rapport au cas test du chapitre 3. Celui-ci se traduisait par un déplacement imposé sur la surface supérieure et augmentant linéairement, et d'un encastrement de la surface inférieure. L'encastrement de la base inférieure est gardé, mais le déplacement supérieur est maintenant

remplacé ici par un déplacement sinusoïdal de la forme :

$$U = U_{max} \sin(\omega t), \tag{5.2}$$

avec $\omega = \pi$ de telle sorte que le chargement soit maximal à $t = 0.5$ et minimal à $t = 0$ ou t=1. La comparaison des résultats se fait au moment où le déplacement est le plus important, et est visible dans les figures ci-dessous. De plus, le déplacement maximal et les propriétés matériaux ont été modifiés de telle sorte que les déformations plastiques soient limitées à la zone locale. Les valeurs des différentes variables sont regroupées dans le tableau 5.1 :

U_{max} [mm]	ω	E [MPa]	ν	R_e [MPa]	ϵ
0.25	π	203000	0.3	750	1.10^{-9}

Tableau 5.1 – Définition des variables pour le cas test

La précision est fixée à $\epsilon = 1.10^{-9}$, une valeur volontairement très faible, afin d'étudier l'évolution du résidu au cours du couplage. Les résultats sont présentés dans la figure 5.14, avec une échelle logarithmique pour une meilleure visibilité. Deux configurations sont étudiées ici : avec et sans relaxation.

Enfin, chaque cas est lancé et traité dans un premier cas en simple précision, puis en double précision. Les dénominations « simple » et « double précision » font référence à la manière dont sont traités les nombres à virgules (ou float) dans la mémoire de l'ordinateur. En simple précision, les floats utilisent 32 bits (le bit étant l'unité fondamentale pour les systèmes informatiques), contre 64 bits pour les floats avec double précision. Le passage du premier au second augmente donc la précision des résultats, mais nécessite en conséquence un temps de calcul légèrement plus élevé.

En regardant les résultats, nous notons bien une décroissance du résidu maximal pour les deux configurations, avec un résidu qui diminue jusqu'à atteindre un ordre de grandeur de 10^{-7} pour les calculs en simple précision, et en dessous de 10^{-9} pour ceux en double précision. Les résultats sont donc bien en accord avec l'augmentation de la précision des calculs due au passage en double précision. En revanche, nous notons finalement une diminution plus

rapide du résidu dans la configuration sans relaxation. Nous pouvons alors en conclure que l'utilisation d'une relaxation basée sur Aitken semble mal adaptée à ce type de couplage. Une autre méthode de relaxation serait alors à définir pour accélérer les calculs. Mais pour la suite des travaux, nous resterons dans la configuration sans relaxation, en double précision.

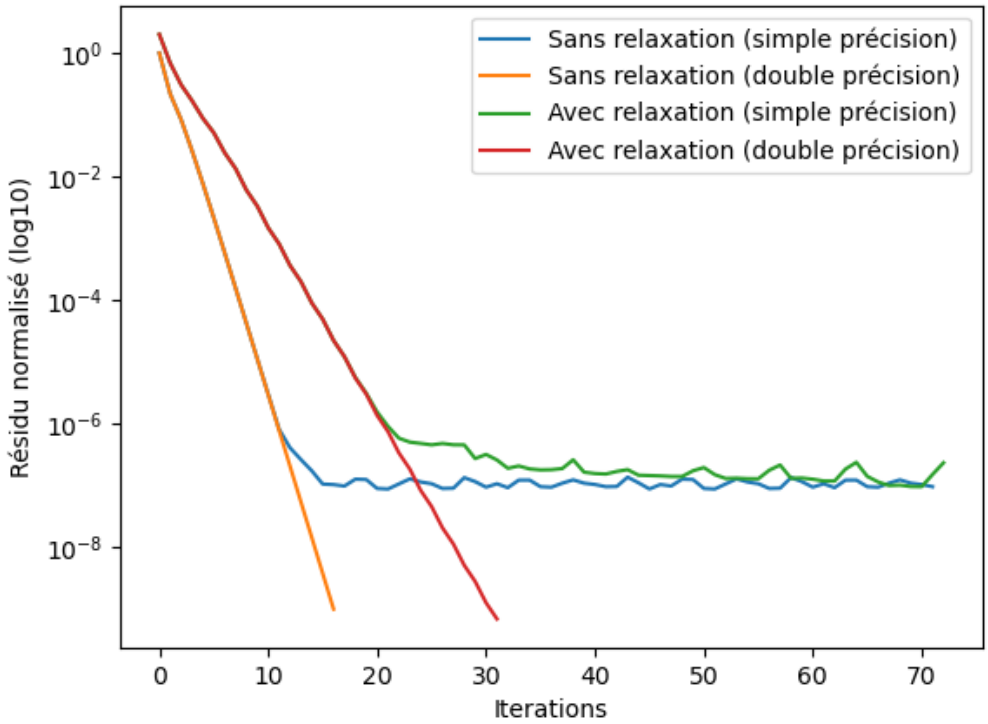


FIGURE 5.14 – Evolution du résidu maximal pendant le couplage avec et sans relaxation

Nous pouvons ensuite comparer les résultats issus du couplage global/local avec ceux obtenus en faisant la simulation « directe » de la traction sur plaque trouée. Les résultats sont affichés dans les figures 5.15 et 5.16. L'obtention des champs de contraintes de von Mises et de déformation plastique ainsi que les valeurs extrêmes identiques entre le modèle direct et le modèle couplé permet alors de valider le couplage pour un cas statique.

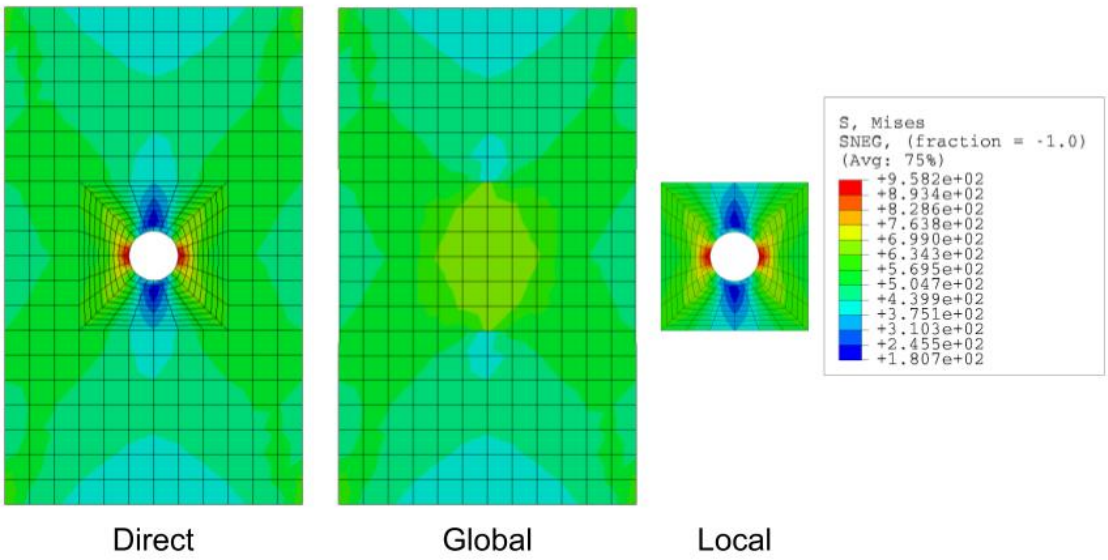


FIGURE 5.15 – Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python

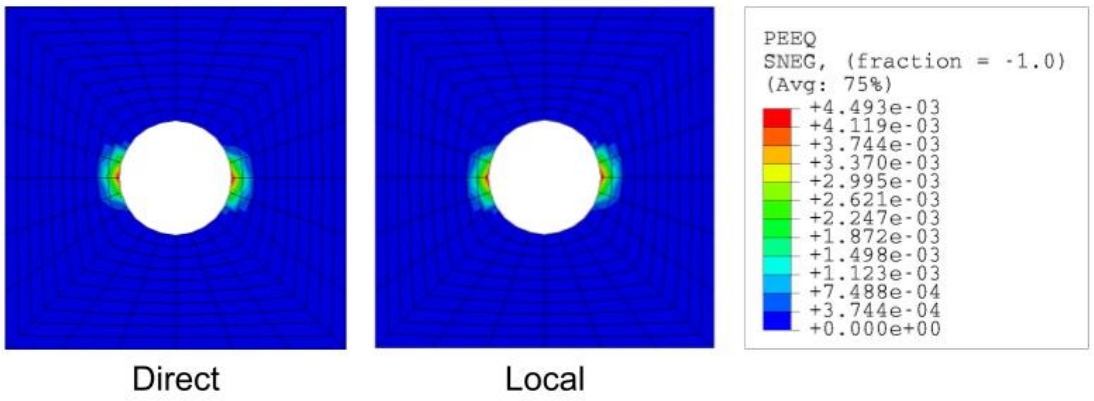


FIGURE 5.16 – Comparaison de la plasticité entre le modèle direct et le modèle couplé via python

Le couplage séquentiel est ensuite testé dans le cas d'une analyse direct cyclique. Les résultats sont présentés dans les figures 5.17 et 5.18. Les résultats sont cette fois-ci quasi-identiques avec des champs de contrainte et de plasticité similaires, mais des valeurs maximales légèrement différentes. Concernant la

zone locale, l'erreur relative est alors de 3.5% pour la contrainte maximale et de 1.6% pour la déformation plastique. Ces différences étant relativement faibles, la méthode est validée et peut-être appliquée au modèle de flexion rotative. Ces écarts peuvent sans doute être imputés à la nature inexacte des résolutions par DCA qui peut impacter sur la limite obtenue par le couplage global-local, on peut se référer à l'analyse de robustesse du couplage dans (Nouy & Pled, 2018). Une étude plus poussée de ce comportement reste nécessaire.

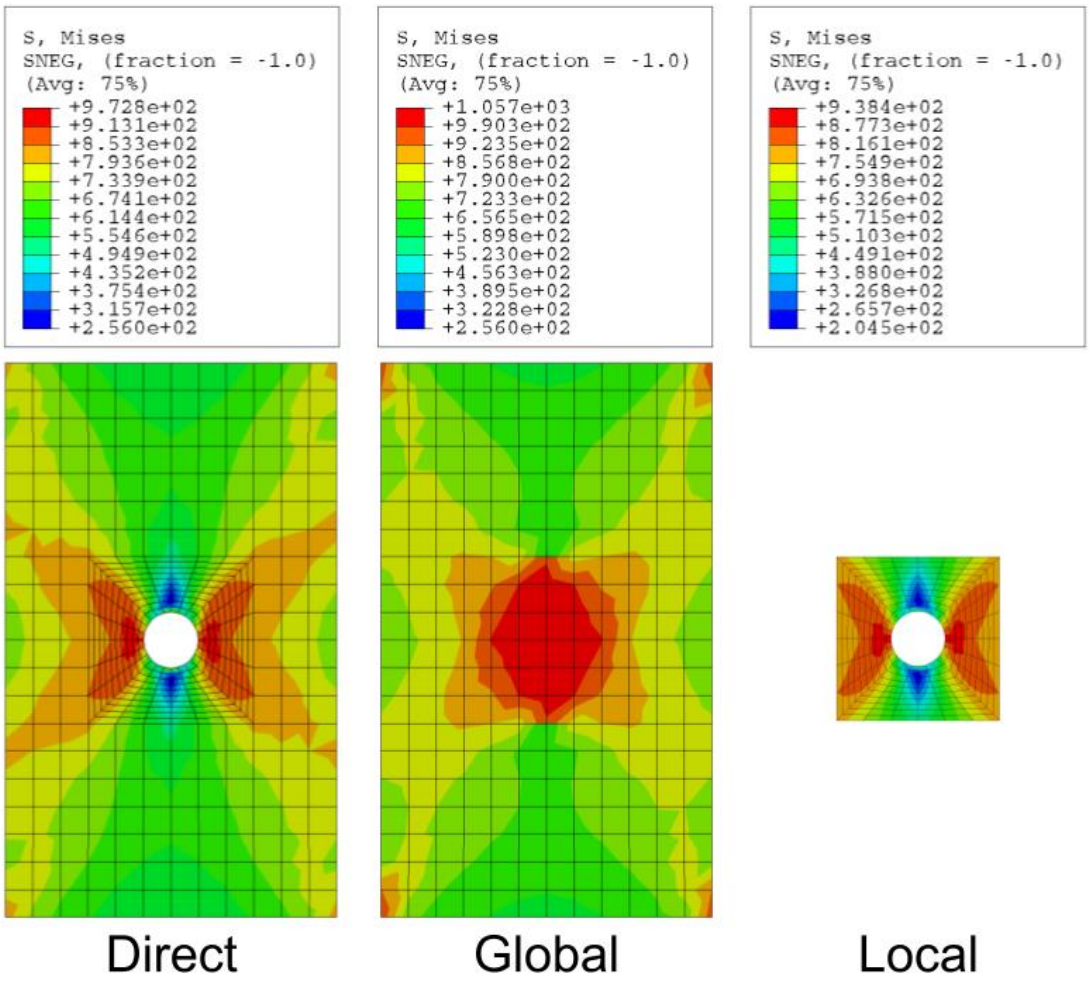


Figure 5.17 – Comparaison du champ de contrainte dans la plaque trouée entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA)

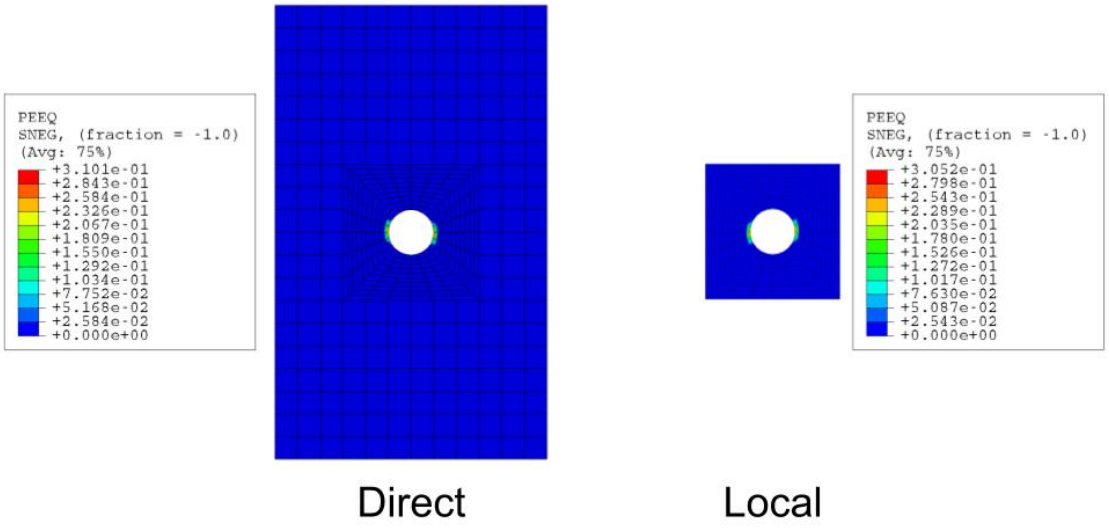


FIGURE 5.18 – Comparaison du champ de déformation plastique dans la plaque trouée entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA)

5.2.3 Application au système essieu-roue

1-way

Les résultats en *1-way* pour le domaine A sont affichés dans les figures 5.19 et 5.20. La comparaison après 120 cycles de sollicitations permet d'accentuer la différence de résultats entre les deux modèles. Concernant le modèle de Hendrycks, le passage du cycle 10 au cycle 120 engendre une déformation plastique passant d'environ 2.957% à 4.763% tandis que le modèle couplé provoque une augmentation de 35.07% à 935.3%. L'écart relatif entre les deux valeurs finales atteint alors environ 195%, une différence loin d'être négligeable. La localisation est également différente avec une déformation plastique confiné dans l'extrémité de la portée de calage dans le premier modèle, contre une déformation plastique qui se propage le long de la portée de calage. Enfin, nous pouvons noter une différence dans la répartition de la contrainte, puisque celle-ci est localisée dans le modèle initial légèrement en profondeur, à proximité de l'extrémité de l'essieu, tandis qu'elle est localisée en surface de l'essieu, à quelques centimètres de l'extrémité, dans le modèle couplé. De plus, la contrainte semble se concentrer en

surface de l'essieu, et non plus en profondeur. De nouveau, le nouveau modèle se rapproche des résultats expérimentaux.

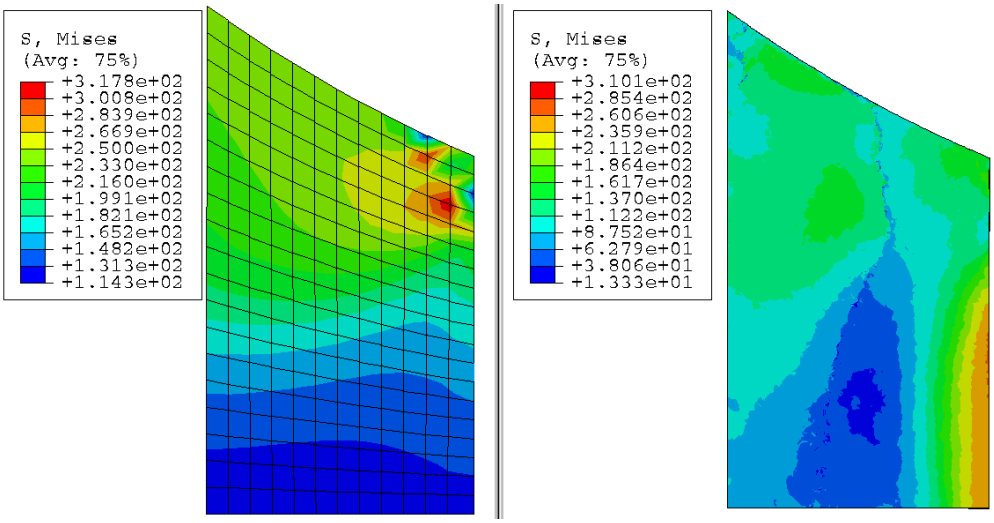


FIGURE 5.19 – Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté congé

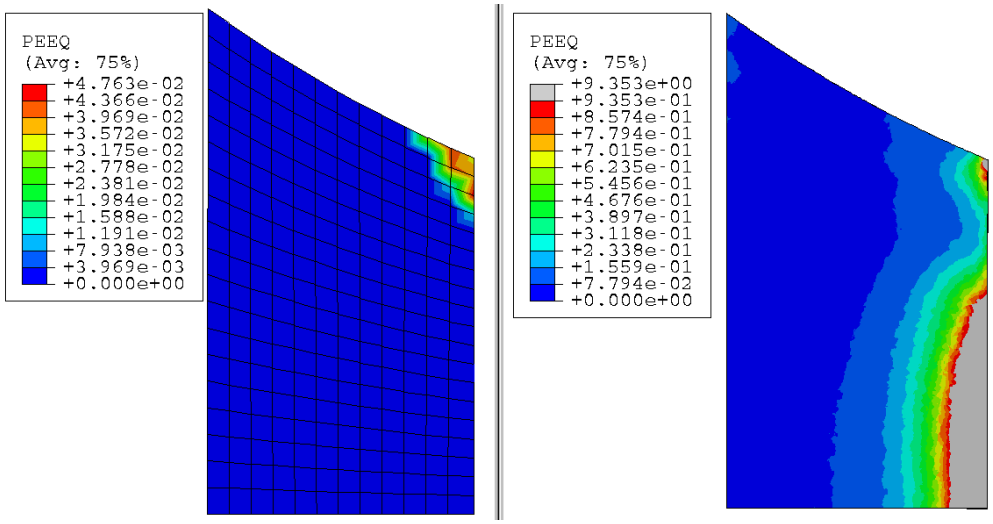


FIGURE 5.20 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté congé

Les résultats pour le domaine B sont quant à eux affichés dans les figures 5.21 et 5.22. Pour les deux modèles, le passage du cycle 10 au cycle 120 n'a engendré

aucune modification dans cette extrémité de l'essieu, aussi bien en terme de contrainte que de plasticité. Ces derniers résultats tendent à confirmer la non-nécessité de prendre en compte la microstructure dans cette zone.

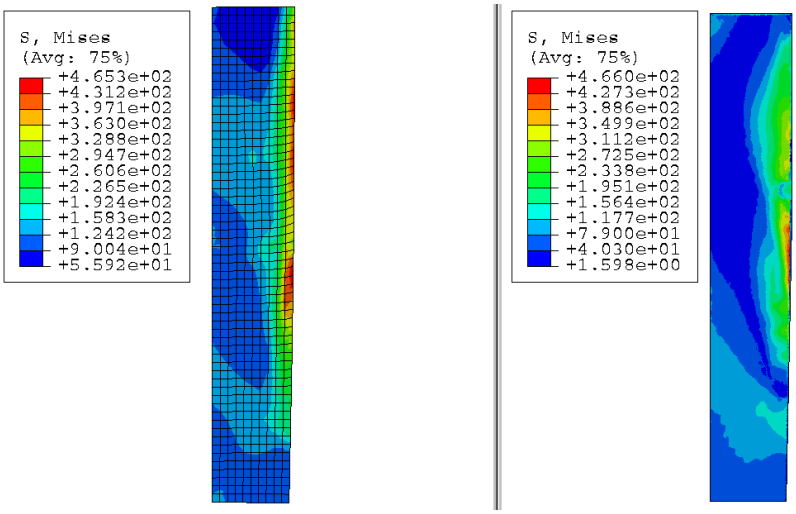


FIGURE 5.21 – Comparaison du champ de contrainte entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté chanfrein

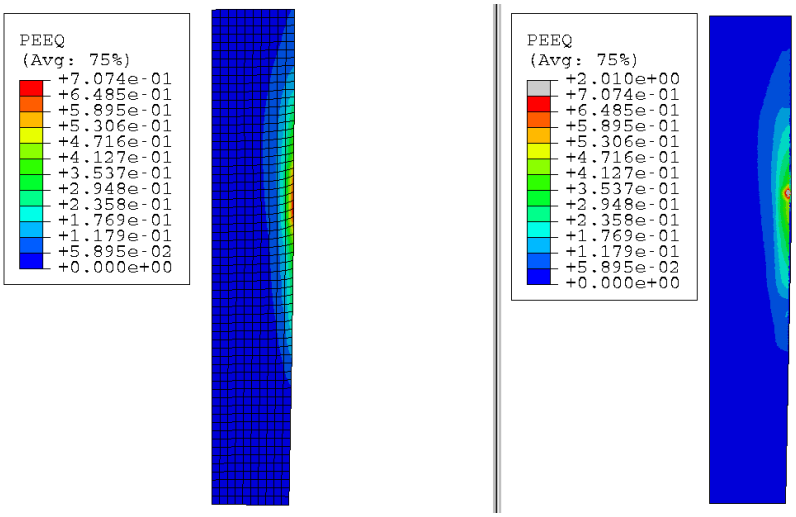


FIGURE 5.22 – Comparaison du champ de déformation plastique entre le modèle direct et le modèle couplé via python (DCA en *1-way*) - côté chanfrein

2-way

Nous utilisons ici le couplage via python en *2-way* avec le domaine A situé côté chanfrein, puisque la microstructure semble impacter la tenue en fatigue dans cette zone. Les résultats obtenus sont comparés avec les résultats en *1-way* afin de mettre en évidence les éventuelles différences de résultats entre les méthodes de couplage, et sont affichés dans les figures 5.23 et 5.24.

Au vu des images, il est clair que les résultats sont extrêmement similaires entre les deux modèles, que ce soit en terme de répartition de contrainte/plasticité et de valeur maximale. Nous pouvons en conclure que les résultats en *1-way* sont suffisamment fiables pour être pris en compte dans la suite de notre étude.

De plus, chaque itération prenant environ 10h pour le domaine A en *2-way* et cette méthode ayant nécessité un grand nombre d'itérations, pour atteindre un résidu inférieur au critère de convergence, son coût temporel (environ 15 jours) et computationnel est bien plus important qu'avec le *1-way*, pour des résultats quasi-identiques dans notre cas. Dans ce problème, il est alors plus intéressant pour l'industriel d'utiliser le modèle de type *1-way*.

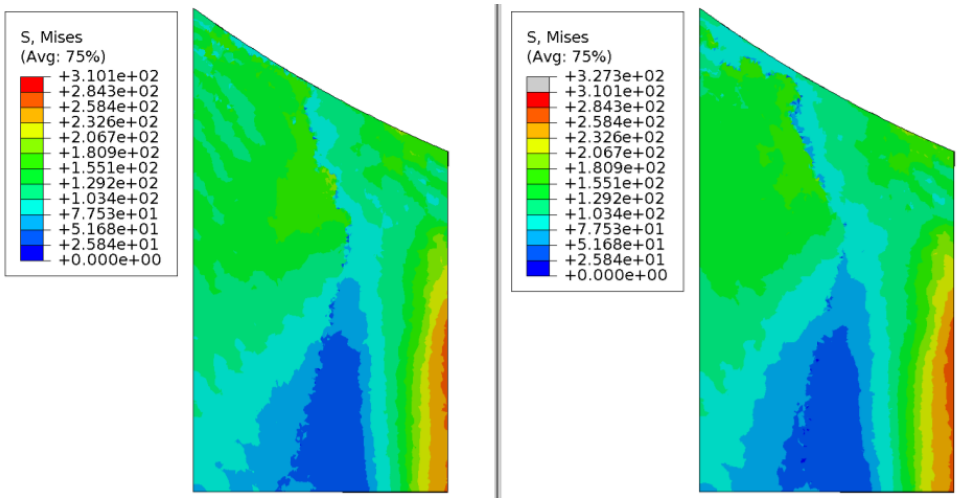


Figure 5.23 – Comparaison du champ de contrainte entre les modèles couplés via python (DCA en *1-way* à gauche, DCA en *2-way* à droite) - côté chanfrein

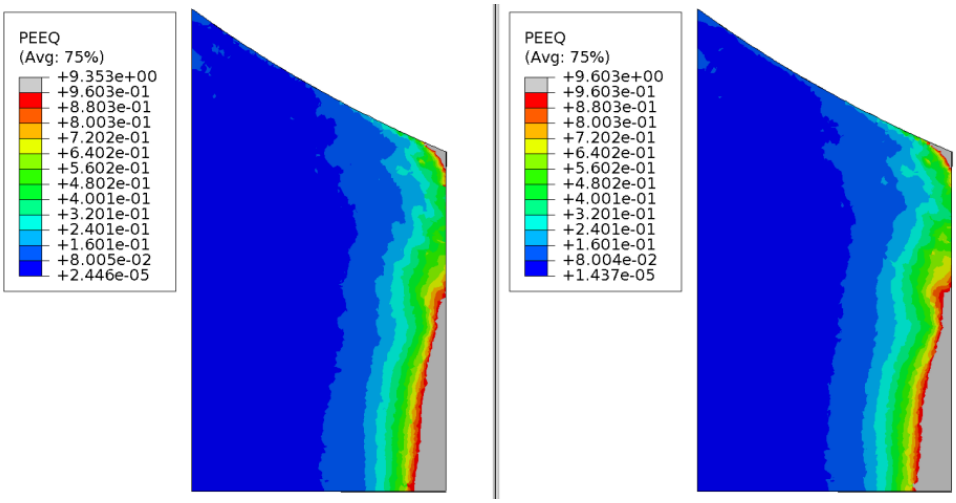


FIGURE 5.24 – Comparaison du champ de déformation plastique entre les modèles couplés via python (DCA en *1-way* à gauche, DCA en *2-way* à droite) - côté chanfrein

Fatigue

Une fois le cycle limite atteint avec *Abaqus*, nous pouvons importer les résultats dans le logiciel *fe-safe* pour s'intéresser à la tenue en fatigue. Un critère régulièrement utilisé dans l'industrie est celui de Dang Van (VAN KY, 1973). Tel qu'implémenté dans fe-safe, il est exprimé sous forme d'un paramètre adimensionnel qui évolue dans un intervalle centré autour de l'unité. Une valeur supérieure à 1 indique que le matériau est en dessous du seuil de fatigue et ne devrait pas subir d'endommagement dans les conditions de chargement considérées. À l'inverse, une valeur inférieure à 1 signifie que les sollicitations locales dépassent l'endurance du matériau, ce qui suggère un risque de fatigue et potentiellement une initiation de fissure. Cet indicateur permet ainsi d'identifier les zones critiques d'une structure et d'optimiser la conception en fonction des contraintes appliquées. Dans fe-safe, l'analyse du critère de Dang Van est réalisée à partir des tenseurs de contraintes obtenus par simulation éléments finis, en tenant compte des effets multiaxiaux et de la pression hydrostatique sur l'endurance du matériau. Les résultats obtenus avec le modèle de Hendyrcks, puis avec le modèle couplé en DCA sont respectivement présentés dans les figures 5.26 et 5.25.

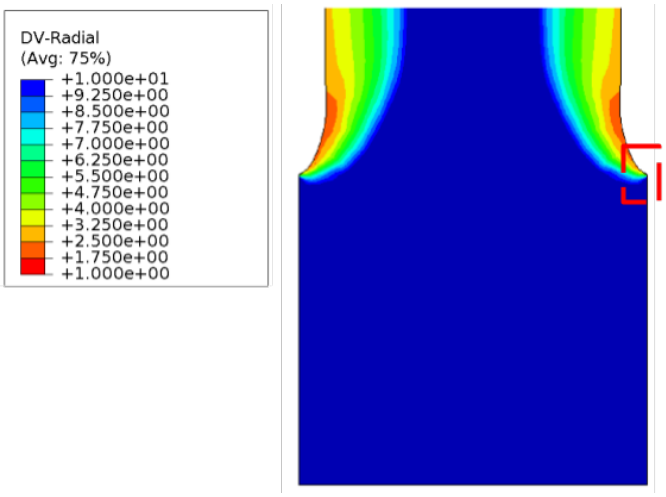


FIGURE 5.25 – Cartographie de l'indice de Dang-Van - modèle initial (sans microstructure)

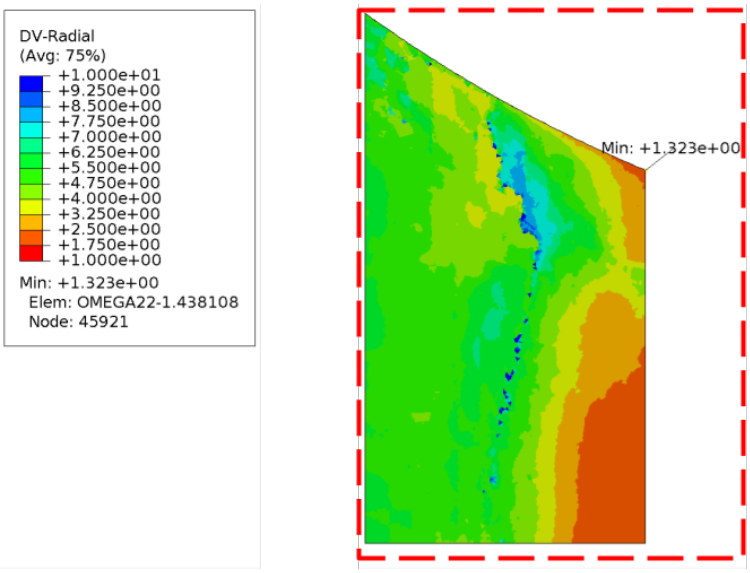


FIGURE 5.26 – Cartographie de l'indice de Dang-Van - modèle local (avec microstructure)

Dans le modèle précédant, Hendrycks a mis en évidence le respect du critère de Dang Van dans l'ensemble de l'essieu, avec une valeur minimale située dans le congé de raccordement, et une valeur globalement élevée au niveau de la portée calage. Mais en analysant la cartographie du critère de Dang Van dans

le modèle prenant en compte la microstructure, nous pouvons voir une diminution importante de ce critère à l'extrémité même de la portée de calage, et à quelques millimètres de cette dernière, avec une valeur minimale autour de 1.32. Cette seconde localisation coïncide ainsi avec l'emplacement de l'essieu où de l'initiation et de la propagation de fissure a été observé expérimentalement, validant ainsi notre modèle. Nous pouvons alors supposer qu'en fonction de l'agencement des grains, voire avec une meilleure modélisation du matériau (acier ferrito-perlitique), il serait possible d'obtenir des modèles locaux dans lesquels le critère de Dang Van ne serait pas respecté, mettant ainsi en évidence le dépassement de la limite d'endurance dans cette zone.

5.3 Conclusion

Ce dernier chapitre a permis d'obtenir un premier modèle multi-échelle utilisable par l'industriel pour simuler l'opération de calage et la sollicitation cyclique de l'essieu monté. Celui-ci se base sur les outils développés précédemment, pour intégrer l'évolution des surfaces en contact et le gradient de microstructure au sein de l'essieu. La prise en compte de ce dernier a été réalisé via un couplage global/local, méthode déjà intégrée dans le logiciel Abaqus à travers la co-simulation. L'industriel souhaitant étudier le comportement en fatigue de l'essieu après 120 cycles de chargement, une analyse directe cyclique a été proposée pour accélérer la modélisation de ces cycles. L'utilisation de la DCA a alors nécessité le développement d'une nouvelle méthode de couplage en se basant sur une approche de type *Schwarz waveform relaxation*. Les modèles global et local peuvent alors être couplés en *1-way*, qui permet une résolution plus rapide au détriment de la précision des résultats, ou en *2-way*, qui nécessite un temps de résolution plus important mais permet d'obtenir une meilleure précision. En raison du coût temporel du couplage en *2-way* et de la similarité des résultats obtenus entre les deux méthodes de couplages, les résultats en *1-way* semblent être largement suffisants pour l'industriel. La prise en compte de la microstructure a alors mis en évidence l'impact du gradient avec l'ajout d'une nouvelle zone critique vis-à-vis de la tenue en fatigue, à l'endroit même où MG-Valdunes a constaté de la fissuration sur ces essieux. Ce modèle semble

ainsi être valide et être utilisable par l'industriel en raison de son coût temporel relativement faible et de sa bonne corrélation avec les résultats expérimentaux.

Perspectives

Les résultats obtenus grâce à cette approche offrent plusieurs voies de développement futures, en particulier dans le cadre de l'optimisation des procédés de fabrication et de la maintenance des essieux ferroviaires.

1. **Amélioration de la prise en compte des phénomènes d'usure et de fretting-fatigue :** Bien que cette thèse ait proposé une modélisation fine des surfaces de contact, il reste encore des aspects à explorer, notamment l'intégration de lois d'usure plus complexes et dynamiques. Le couplage global/local pourrait être étendu pour prendre en compte les effets combinés de l'usure, du fretting-fatigue et de la dégradation des matériaux.
2. **Création d'un jumeau numérique :** Les résultats obtenus dans cette thèse montrent que l'approche de couplage global/local peut être intégrée dans des jumeaux numériques ferroviaires pour une surveillance en temps réel des composants critiques. Cela permettrait d'anticiper les défaillances et d'améliorer les stratégies de maintenance prédictive.
3. **Optimisation des processus industriels via des simulations multi-échelles :** En améliorant les outils de simulation basés sur le couplage global/local, il serait possible de proposer des solutions optimisées pour les procédés de fabrication, en tenant compte des effets de surface et des gradients de microstructure sur la résistance des essieux.

Bibliographie

Allix, O., Blanchard, M., & Gosselet, P. (2022). A non-intrusive global/local cycle-jumping techniques : application to visco-plastic structures. In F. Aldakheel, B. Hudobivnik, M. Soleimani, H. Wessels, C. Weissenfels & M. Marino (Éd.), *Current Trends and Open Problems in Computational Mechanics* (p. 22-30). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87312-7_3

Allix, O., & Gosselet, P. (2020). Non Intrusive Global/Local Coupling Techniques in Solid Mechanics : An Introduction to Different Coupling Strategies and Acceleration Techniques. In L. D. Lorenzis & A. Düster (Éd.), *Modeling in Engineering Using Innovative Numerical Methods for Solids and Fluids* (p. 203-220). Springer Nature Switzerland AG. https://doi.org/10.1007/978-3-030-37518-8_6

Amontons, G. (1999). De la resistance causée dans les machines (1). *Journal of the Japanese Society of Tribologists*, *44*, 229-235.

André, D., Iordanoff, I., Donzé, F., Fortin, J.,) J., Néauport, J., Baillet, L., Cahuc, O., Lorong, P., École doctorale des sciences physiques et de l'ingénieur (Talence, G., et al. (2012). *Modélisation par éléments discrets des phases d' ébauchage et de doucissage de la silice*. https://books.google.fr/books?id=utgi0AEACAAJ

Baudoin, P. (2015). *Caractérisation et identification de propriétés de matériaux métalliques à gradients de microstructure* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Charkaluk, Éric Mécanique]. Lille 1 2015. http://www.theses.fr/2015LIL10015/document

Berger, A. (2022). *Étude expérimentale des mécanismes et hétérogénéités de déformation d'aciers ferroviaires à gradient de microstructure* (thèse de doct.) [2022CLIL0011]. http://www.theses.fr/2022CLIL0011/document

Bettinotti, O., Guinard, S., Véron, E., & Gosselet, P. (2024). On the implementation in Abaqus of the global–local iterative coupling and acceleration techniques. *Finite Elements in Analysis and Design*, *236*, 104152. https://doi.org/10.1016/j.finel.2024.104152

Blanchard, M. (2018). *Méthode global/local non-intrusive pour les simulations cycliques non-linéaires* (thèse de doct.) [2018SACLN003]. http://www.theses.fr/2018SACLN003/document

Blanchard, M., Allix, O., Gosselet, P., & Desmeure, G. (2019a). Space/time global/local noninvasive coupling strategy : Application to viscoplastic structures.

Blanchard, M., Allix, O., Gosselet, P., & Desmeure, G. (2019b). Space/time global/local noninvasive coupling strategy : Application to viscoplastic structures. *Finite Elements in Analysis and Design*, *156*, 1-12. https://doi.org/10.1016/j.finel.2019.01.003

Bouchot, A., Ferrieux-Paquet, A., Mollon, G., Descartes, S., & Debayle, J. (2022). Segmentation and morphological analysis of wear track/particles images using machine learning. *Journal of Electronic Imaging*, *31*(5), 051605-051605.

Bouillanne, O., Mollon, G., Saulot, A., Descartes, S., Serres, N., Chassaing, G., & Demmou, K. (2022). How vorticity and agglomeration control shear strength in soft cohesive granular flows.

Buhmann, M. D. (2003). *Radial Basis Functions : Theory and Implementations*. Cambridge University Press.

Chai, T., & Draxler, R. (2014). Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? - Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geoscientific Model Development*, *7*(3), 1247-1250.

Chaise, T. (2011). *Mechanical simulation using a semi analytical method : from elasto-plastic rolling contact to multiple impacts* (Theses 2011ISAL0076). INSA de Lyon. https://theses.hal.science/tel-00701495

Chollet, F. (2018). *Deep Learning with Python*. Manning Publications.

Cormier, N., Smallwood, B. S., Sinclair, G. B., & Meda, G. (1999). Aggressive submodelling of stress concentrations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, *46*(6), 889-909.

Coulomb, C. A. (1809). *Théorie des machines simples, en ayant égard au frottement de leurs parties, et à la roideur des cordages*. Bachelier.

Cressie, N. (1990). *The Origins of Kriging* (T. 22). Springer.

Csati, Z. (2019). *Mesh-independent modelling of diffuse cracking in cohesive grain-based materials* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Moës, Nicolas et Massart, Thierry Mécanique]. Ecole centrale de Nantes 2019. http://www.theses.fr/2019ECDN0037/document

Cundall, P. A., & Strack, O. D. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *geotechnique*, *29*(1), 47-65.

De Boor, C. (1978). *A Practical Guide to Splines*. Springer-Verlag.

De Myttenaere, A., Golden, B., Le Grand, B., & Rossi, F. (2003). A review and evaluation of alternative measures of forecast accuracy. *International Journal of Forecasting*, *22*(4), 679-688.

Dugas, R. (1988). *A History of Mechanics*. Dover Publications. https://books.google.fr/books?id=vRIIGwwQs7oC

Fournier, A., Fussell, D., & Carpenter, L. (1982). Computer rendering of stochastic models. *Communications of the ACM*, *25*(6), 371-384.

Gander, M. J., & Stuart, A. M. (1998). Space-time continuous analysis of waveform relaxation for the heat equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, *19*, 2014-2031.

Gendre, L., Allix, O., Gosselet, P., & Comte, F. (2009). Non-intrusive and exact global/local techniques for structural problems with local plasticity. *Computational Mechanics*, *44*(2), 233-245. https://doi.org/10.1007/s00466-009-0372-9

Gosselet, P., Blanchard, M., Allix, O., & Guguin, G. (2018). Non-invasive global-local coupling as a Schwarz domain decomposition method : acceleration and generalization. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, *5*(4). https://doi.org/10.1186/s40323-018-0097-4

Gotoh, K., Jodrey, W., & Tory, E. (1978). A random packing structure of equal spheres – statistical geometrical analysis of tetrahedral configurations. *Powder Technology*, *20*(2), 233-242.

Guinard, S., Bouclier, R., Toniolli, M., & Passieux, J.-C. (2018). Multiscale analysis of complex aeronautical structures using robust non-intrusive coupling. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, *5*(1). https://doi.org/10.1186/s40323-017-0094-z

Hall, E. O. (1951). The Deformation and Ageing of Mild Steel : III Discussion of Results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, *64*(9), 747. https://doi.org/10.1088/0370-1301/64/9/303

Hendrycks, B. (2023). *Modélisation et optimisation multi-critères de la tenue en fatigue d'essieux ferroviaires innovants* (thèse de doct.). Lille 1 2023.

Hubert, C., Andre, D., Dubar, L., Iordanoff, I., & Charles, J.-L. (2016). Simulation of continuum electrical conduction and Joule heating using DEM domains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, *110*(9), 862-877. https://doi.org/10.1002/nme.5435

Hunter, J. D. (2007). *Matplotlib : A 2D Graphics Environment* (T. 9). IEEE Computer Society.

Iordanoff, I., Iliescu, D., Charles, J.-L., & Néauport, J. (2010). Discrete Element Method, a Tool to Investigate Complex Material Behaviour in Material Forming. *NUMIFORM 2010 : Proceedings of the 10th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes Dedicated to*

Professor O. C. Zienkiewicz (1921-2009), p.778-786. https://doi.org/10.1063/1.3457634

J., P. N. (1953). The Cleavage Strength of Polycrystals. *Journal of the Iron and Steel Institute*, *174*, 25-28. https://cir.nii.ac.jp/crid/1570291225556359040

Jürgens, H., & Saupe, D. (2006). *Chaos and fractals : new frontiers of science*. Springer New York.

Karupannasamy, D., de Rooij, M., & Schipper, D. (2013). Multi-scale friction modelling for rough contacts under sliding conditions. *Wear*, *308*(1), 222-231. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wear.2013.09.012

Kounoudji, K. A., Renouf, M., Mollon, G., & Berthier, Y. (2015a). Analyse tribologique d'un contact d'un assemblage boulonné via la DEM. *12e Colloque national en calcul des structures*.

Kounoudji, K. A., Renouf, M., Mollon, G., & Berthier, Y. (2015b). Analyse tribologique d'un contact d'un assemblage boulonné via la DEM. *12e Colloque national en calcul des structures*. https://hal.science/hal-01517307

Ladevèze, P. (1989). La méthode à grand incrément pour l'analyse de structures à comportement non-linéaire décrit par variables internes. *C.R.A.S 309 Série II*, *309*(11), 1095-1099.

Langueh, A., Dufrénoy, P., Charkaluk, É., Brunel, J., doctorale Sciences pour l'Ingénieur (Lille)., É., & de mécanique de Lille (LML)., L. (2013). *Contribution au dimensionnement des roues ferroviaires en fatigue de contact de roulement*. https://books.google.fr/books?id=gSUe0AEACAAJ

LeCun, Y., Kavukcuoglu, K., & Farabet, C. (2010). Convolutional networks and applications in vision. *ISCAS*, 253-256. http://dblp.uni-trier.de/db/conf/iscas/iscas2010.html#LeCunKF10

Lemaitre, J., Chaboche, J.-L., Benallal, A., & Desmorat, R. (2020). *Mécanique des matériaux solides-3e éd.* Dunod.

Maitournam, H., Pommier, B., & Thomas, J.-J. (2002). Détermination de la réponse asymptotique d'une structure anélastique sous chargement thermodynamique cyclique. *C. R. Mecanique*, *330*, 703-708.

Maitournam, H. (2002). Structures sous chargements mobiles : aspects mécaniques et fatigue. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:171489542

McCulloch, W. S., & Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, *5*, 115-133.

Miller, G. S. (1986). The definition and rendering of terrain maps. *Proceedings of the 13th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, 39-48.

Moghaddam, S. R. M., Acharya, A., Redfern, M. S., & Beschorner, K. E. (2018). Predictive multiscale computational model of shoe-floor coefficient of

friction. *Journal of Biomechanics*, *66*, 145-152. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jbiomech.2017.11.009

Motamedi, N., Magnier, V., & Wannous, H. (2023). Towards the identification of the link between the contact roughness and the friction-induced vibration : Use of deep learning. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, *99*, 104949.

Nagelkerke, N. J. (1991). A note on a general definition of the coefficient of determination. *Biometrika*, *78*(3), 691-692.

Newton, I. (1687). *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*. Royal Society, London.

Nouy, A., & Pled, F. (2018). A multiscale method for semi-linear elliptic equations with localized uncertainties and non-linearities. *ESAIM : M2AN*, *52*(5), 1763-1802.

Oumaziz, P., Gosselet, P., Boucard, P.-A., & Guinard, S. (2017). A non-invasive implementation of a mixed domain decomposition method for frictional contact problems. *Computational Mechanics*, *60*, 797-812. https://doi.org/10.1007/s00466-017-1444-x

Passerat, S. (2000). *Comportement tribologique d'aciers et d'alliages de titane renforcés par traitements superficiels en glissement et en fretting* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Denape, Jean Mécanique]. Bordeaux 1 2000. http://www.theses.fr/2000BOR10567

Peigney, M., & Stolz, C. (2001). Approche par contrôle optimal des structures élastoviscoplastiques sous chargement cyclique. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Series IIB, Mechanics*, *329*(9), 643-648. https://doi.org/10.1016/S1620-7742(01)01381-2

Peigney, M., & Stolz, C. (2003). An optimal control approach to the analysis of inelastic structures under cyclic loading. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *51*(4), 575-605. https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00104-7

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. (2007). *Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing* (3rd). Cambridge University Press.

Python Software Foundation. (2024). *pickle — Python object serialization* [Python 3.11.5 Documentation]. https://docs.python.org/3/library/pickle.html

Quey, R., Dawson, P., & Barbe, F. (2011). Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *200*(17), 1729-1745. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.01.002

Rosenblatt, F. (1957). *The perceptron, a perceiving and recognizing automaton Project Para*. Cornell Aeronautical Laboratory.

Rousseau, J. (2009). *Modélisation numérique du comportement dynamique de structures sous impact sévère avec un couplage éléments discrets / éléments finis* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Daudeville, Laurent et Marin, Philippe Sciences de la Terre, de l'univers et de l'environnement (Grenoble ; 1971-2015)]. http://www.theses.fr/2009GRE10219/document

Routh, E. J. (1860). *An Elementary Treatise on the Dynamics of a System of Rigid Bodies*. Cambridge University Press.

Roux, C. (2016). *Dimensionnement en fatigue multiaxiale des toiles de roues ferroviaires sous sollicitations multi-paramètres à amplitude variable* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Maitournam, Habibou Mécanique des solides]. Université Paris-Saclay (ComUE) 2016. http://www.theses.fr/2016SACLX109/document

Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *nature*, *323*(6088), 533-536.

Saad, S. (2016). *Modélisation de la tenue en fatigue d'essieux ferroviaires issus d'un procédé de forgeage* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Dufrénoy, PhilippeCharkaluk, Éric et Magnier, Vincent Mécanique, Énergétique et Sciences des matériaux]. Lille 1 2016. http://www.theses.fr/2016LIL10050/document

Savalle, S., & Culie, J. (1978). Méthodes de calcul associées aux lois de comportement cyclique et d'endommagement. *La recherche aérospatiale*, *5*, 263-278.

Schikora, J. (2022). Dauerfestigkeitsprüfung von Radsatzwellen des Herstellers MG-Valdunes (Frankreich) aus EA4T für die Produktqualifikation nach EN 13260.

Schlangen, E., & Garboczi, E. J. (1997). Fracture simulations of concrete using lattice models : computational aspects. *Engineering fracture mechanics*, *57*(2-3), 319-332.

SciPy community. (2024). *SciPy : Interpolation Routines* [Version 1.11.3]. SciPy. https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/interpolate.html

Smith, M. (2009). *ABAQUS/Standard User's Manual, Version 6.9*. Dassault Systèmes Simulia Corp.

Taboada, A., & Renouf, M. (2023). Rheology and breakdown energy of a shear zone undergoing flash heating in earthquake-like discrete element models. *Geophysical Journal International*, *233*(2), 1492-1514. https://doi.org/10.1093/gji/ggad004

Team, K. D. (2023). Keras Documentation [Accessed : 2024-08-01].

Team, T. D. (2023). TensorFlow Documentation [Accessed : 2024-08-01].

Team, T. M. D. (2023). Matplotlib Documentation [Accessed : 2024-08-01].

Team, T. P. D. (2023). ParaView Documentation [Accessed : 2024-08-01].

Temizer, I., & Wriggers, P. (2008). A multiscale contact homogenization technique for the modeling of third bodies in the contact interface. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *198*(3-4), 377-396.

Van Ky, D. (1973). *Sur la résistance à la fatigue des métaux*. wydawca nieznany. https://books.google.fr/books?id=HM_5ewEACAAJ

Waddad, Y. (2017). *Multiscale thermomechanical strategies for rough contact modeling : application to braking systems* (thèse de doct.). Lille 1.

Willmott, C. J., & Matsuura, K. (2005). Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *Climate Research*, *30*(1), 79-82.

Yameogo, A. (2004). *Etude expérimentale et numérique de l'amorçage et de la propagation de fissure de fretting dans un assemblage roue-essieu ferroviaire* (thèse de doct.) [Thèse de doctorat dirigée par Prioul, Claude Mécanique et matériaux Châtenay-Malabry]. Ecole centrale de Paris 2004. http://www.theses.fr/2004ECAP0991

Zarka, J., Engel, J., & Inglebert, G. (1980). On a simplified inelastic analysis of structures. *Nuclear Engineering and Design*, *57*, 333-368.

Annexe A

Définition des domaines locaux pour la création des microstructures

Sommaire du présent chapitre

A.1 Domaine A	**160**
A.2 Domaine B	**161**

Cette partie regroupe les tableaux contenant les points délimitant les différents domaines locaux, qui sont affichés sur la figure A.1.

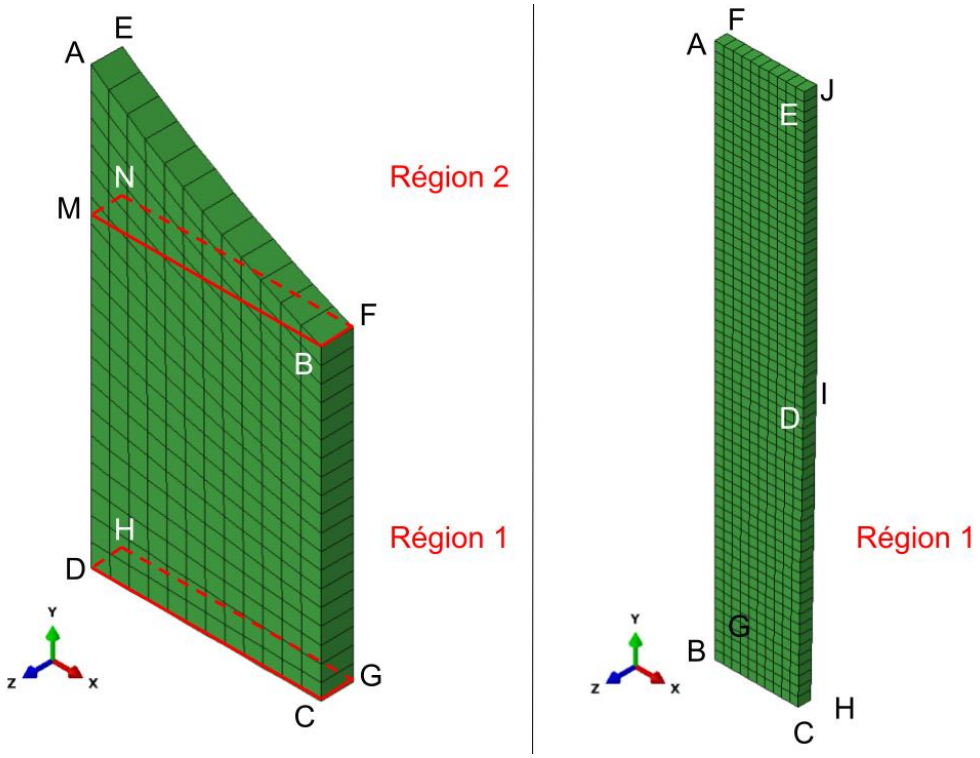


FIGURE A.1 – Définition des domaines A (gauche) et B (droite) pour la génération des microstructures

A.1 Domaine A

	Repère cartésien			Repère cylindrique	
	x [mm]	y [mm]	z [mm]	r [mm]	θ [°]
M	94.662	174	0	94.662	0
B	97.662	174	0	97.662	0
C	97.662	170	0	97.662	0
D	94.662	170	0	94.662	0
N	94.661	174	-0.413	94.662	-0.25
F	97.661	174	-0.426	97.662	-0.25
G	97.661	170	-0.426	97.662	-0.25
H	94.661	170	-0.413	94.662	-0.25

TABLEAU A.1 – Position des points délimitant la région 1 du domaine A

	Repère cartésien			Repère cylindrique	
	$x\ [mm]$	$y\ [mm]$	$z\ [mm]$	$r\ [mm]$	$\theta\ [°]$
A	94.662	175.685	0	94.662	0
M	94.662	174	0	94.662	0
B	97.662	174	0	97.662	0
E	94.661	175.685	-0.413	94.662	-0.25
N	94.661	174	-0.413	94.662	-0.25
F	97.661	174	-0.426	97.662	-0.25

Tableau A.2 – Position des points délimitant la région 2 du domaine A

A.2 Domaine B

	Repère cartésien			Repère cylindrique	
	x [mm]	y [mm]	z [mm]	r [mm]	$\theta\ [°]$
A	94.662	18	0	94.662	0
B	94.662	0	0	94.662	0
C	97.462	0	0	97.462	0
D	97.662	10	0	97.662	0
E	97.662	18	0	97.662	0
F	94.661	18	-0.413	94.662	-0.25
G	94.661	0	-0.413	94.662	-0.25
H	97.661	0	-0.413	97.661	-0.25
I	97.661	10	-0.425	97.661	-0.25
J	94.661	18	-0.426	94.661	-0.25

Tableau A.3 – Position des points délimitant le domaine B

Modélisation multi-échelle de la plasticité et des interactions de frottement dans les assemblages ferroviaires essieu-roue

Résumé

Cette thèse propose une approche multi-échelle pour modéliser les phénomènes mécaniques dans les assemblages ferroviaires en vue de leur dimensionnement. L'étude se concentre sur deux aspects principaux : l'influence des défauts de surface sur le comportement mécanique lors du calage des roues sur les essieux, et l'impact du gradient de microstructure induit par le processus de forgeage sur la durée de vie en fatigue des essieux. Dans une première partie, un modèle numérique est développé pour simuler les interactions de frottement entre deux surfaces rugueuses, en tenant compte de l'usure progressive pendant le processus de calage. Cette approche est basée sur une modélisation par éléments discrets couplée à de l'IA, permettant de représenter fidèlement les effets de surface sur la tenue mécanique. La seconde partie intègre les effets du gradient de microstructure dans le calcul à l'aide d'une technique de couplage global-local. Cet historique engendre un état de précontrainte et déformation plastique susceptible d'affecter la tenue en fatigue de l'essieu monté sous chargement de flexion rotative, en particulier à cause du fretting aux bords des portées de calage. En combinant ces deux approches, cette thèse propose un modèle multi-échelle amélioré, visant à mieux comprendre et prédire la durée de vie des essieux montés. Une grandeur d'intérêt en vue du dimensionnement est le cycle élastoplastique stabilisé pour l'estimation duquel une association originale du couplage global-local et de la méthode cyclique directe est proposée.

Mots clés : frottement multi-échelle, cosimulation, plasticité, microstructure

---

Abstract

This thesis proposes a multi-scale approach to modeling mechanical phenomena in railway assemblies with a view to their dimensioning. The study focuses on two main aspects: the influence of surface defects on the mechanical behavior of wheelsets, and the impact of the microstructure gradient induced by the forging process on the fatigue life of axles. In the first part, a numerical model is developed to simulate frictional interactions between two rough surfaces, taking into account progressive wear during the assembly process. This approach is based on discrete-element modeling coupled with AI, enabling surface effects on mechanical strength to be faithfully represented. The second part integrates the effects of the microstructure gradient into the calculation using a global-local coupling technique. This history generates a state of prestress and plastic deformation likely to affect the fatigue life of the axle under rotary bending loading, in particular due to fretting at the edges of the wedge spans. By combining these two approaches, this thesis proposes an improved multi-scale model, aimed at better understanding and predicting the service life of axles. The stabilized elastoplastic cycle is of particular interest for design purposes, and an original combination of global-local coupling and the direct cyclic method is proposed for its estimation.

Keywords: multi-scale friction, cosimulation, plasticity, microstructure

---

Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle (LaMcube) UMR 9013

Bâtiment ESPRIT, Cité Scientifique, – Boulevard Paul Langevin – 59655 Villeneuve d'Ascq – France