

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

## Université Amar Telidji - Laghouat



Faculté de Technologie

### THÈSE DE DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité : Mécanique

Présentée et soutenue publiquement  
le .....

**Rayane Karim**

#### THEME

Simulation et Modélisation de la Diffusion Atomique dans les Solides

#### JURY :

Monsieur	Benchatti Ahmed	<b>Président du jury</b>	Professeur	Université de Laghouat
Monsieur	Djeghlal Med Lamine	<b>examineur</b>	Professeur	Ecole ENP Alger
Monsieur	Lefkair Ibd Khaldoun	<b>examineur</b>	Professeur	Université de Laghouat
Monsieur	Keddam Mourad	<b>examineur</b>	Professeur	USTHB
Monsieur	Allaoui Omar	<b>Encadreur</b>	Professeur	Université de Laghouat

# Dédicaces

A mon père ma mère

Ma femme mes enfants

# Remerciements

A tous ceux qui m'ont soutenu de près ou de loin un grand merci,

Merci au Pr Allaoui Omar pour avoir accepté de diriger ce travail, pour ses orientations conseils et soutien.

Mes remerciement vont aussi aux membres du jury qui ont bien voulu examiner ce travail ;

Pr Djeghlal Med Lamine, Pr Kedam mourad, Pr Lefkair Ibn Khaldoun et le president du jury

Pr Benchatti ahmed

## Liste des figures

- Figure A.1 Résistance à la déformation
- Figure A.2 Résistance à la compression
- Figure A.3 Dopage d'un semi-conducteur
- Figure A.4 Autodiffusion dans un même matériau
- Figure A.5 Profils de concentration avant et après diffusion
- Figure A.6 Diffusion lacunaire
- Figure A.7 Diffusion interstitielle
- Figure A.8.1 Profil linéaire du régime permanent
- Figure A.8.2 Indépendance de la concentration du temps
- Figure A.9 Diffusion linéaire descriptive
- Figure A.10 Conditions aux limites et conditions initiales
- Figure A.11 Profils de concentration
- Figure B.1 Diagramme d'équilibre du système binaire Fe-B
- Figure B.2 Types de couches borurées obtenues en fonction du milieu et des conditions de boruration
- Figure B.3 Variation des coefficients de diffusion du bore, du carbone et de l'azote en fonction de l'inverse de la température
- Figure B.4 Influence des principaux éléments d'alliage sur l'épaisseur de la couche borurée.
- Figure B.5 Usure enregistrée sur une pièce d'une machine agricole qui a subi différents traitements de surface. a- 8630 Steel après traitement thermique. b- après boruration. c- après chromage dur.
- Figure C.1 Méthodes typiques de calcul scientifique des matériaux en termes de taille et de temps
- Figure C.2 Modèle de neurone
- Figure C.3 Architecture perceptron multicouche
- Figure C.4 Structure d'un réseau RBF type
- Figure C.5 Illustration des fonctions d'appartenances floues
- Figure C.6 Modèle logique floue
- Figure C.7 Modèles hybrides de calculs informatisés

- Figure C.8    Modèle neuro-flou-génétique
- Figure 2.1    Schéma simplifié d'un neurone biologique.
- Figure 2.2    Neurone pré-synaptique et neurone post-synaptique.
- Figure 2.3    Modélisation d'un neurone artificiel.
- Figure 2.4    Représentation mathématique d'un neurone formel.
- Figure 2.5    Modélisation de liaison entre plusieurs neurones artificiels
- Figure 2.6    Représentation du fonctionnement d'un neurone artificiel
- Figure 2.7    Différents types de fonctions de transfert pour un neurone artificiel.
- Figure 2.8    Représentation d'un réseau à perceptrons en couche unique
- Figure 2.9    Représentation d'un réseau multicouche.
- Figure 2.10    Illustration de la rétro-propagation.
- Figure 2.11    Réseau de 3 neurones (Les 2 entrées sont considérées comme deux neurones)
- Figure 2.12    Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-B4C
- Figure 2.13    Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-B4C
- Figure 2.14    Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-Al
- Figure 2.15    Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-Al
- Figure 2.16    Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-SiC
- Figure 2.17    Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-SiC
- Figure 3.1    Diagramme de Mamdani pour le processus de Boruration
- Figure 3.2    Règle de Sugeno
- Figure 3.3    Diagramme de Takagi-Sugeno pour le processus de Boruration
- Figure 3.4    Schématique de la Méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.5    Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée Température (°C)
- Figure 3.6    Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée Temps (h)
- Figure 3.7    Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie épaisseur (μm)
- Figure 3.8    Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani entrées triangulaires pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

- Figure 3.9 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani avec entrées triangulaire pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.10 Fonctions d'appartenances gaussiennes d'entrée Temps (h)
- Figure 3.11 Fonctions d'appartenance gaussiennes d'entrée Température (°C)
- Figure 3.12 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.13 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.14 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Sugeno, entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.15 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Sugeno, entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C
- Figure 3.16 Schématique de la Méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-Al
- Figure 3.17 Fonction d'appartenance triangulaires d'entrée Température (°C)
- Figure 3.18 Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie épaisseur (µm)
- Figure 3.19 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps de traitement Méthode Mamdani avec entrées triangulaires pour le bain Borax-Al
- Figure 3.20 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani avec entrées triangulaires pour le bain Borax-Al
- Figure 3.21 Fonctions d'appartenances gaussienne d'entrée Température (°C)
- Figure 3.22 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani avec entrées gaussiennes pour le bain Borax-Al
- Fig3.23 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani avec entrées Gaussiennes pour le bain Borax-Al
- Figure 3.24 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Sugeno avec entrées gaussiennes pour le bain Borax-Al
- Figure 3.25 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Sugeno avec entrées Gaussiennes pour le bain Borax-Al
- Figure 3.26 Schématique de la Méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.27 Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée Température (°C)
- Figure 3.28 Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie épaisseur (µm)
- Figure 3.29 Représentation graphique des Règles avec résultats pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.30 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance triangulaires pour le bain Borax-SiC

- Figure 3.31 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance triangulaires pour le
- Figure 3.32 Fonctions d'appartenances gaussiennes d'entrée Température
- Figure 3.33 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance gaussiennes pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.34 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance gaussiennes pour le
- Figure 3.35 Fonctions d'appartenances gaussiennes de sortie épaisseur Figure 3.36 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Mamdani avec entrées sorties gaussiennes pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.37 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Mamdani entrées sorties gaussiennes pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.38 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Sugeno entrées gaussiennes pour le bain Borax-SiC
- Figure 3.39 Epaisseur de couche en fonction du temps de traitement (a) et de la température (b) Méthode Sugeno entrées gaussiennes pour le bain Borax-SiC
- Figure 4.1 Triangle de pascal pour la construction de base polynomiale
- Figure 4.2 Epaisseur de couche Fonction de la température de traitement (a) et du temps (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-B4C
- Figure 4.3 Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-B4C
- Figure 4.4 Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-Al
- Figure 4.5 Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-Al
- Figure 4.6 Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-SiC
- Figure 4.7 Evolution 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-SiC

## Liste des tableaux

Tableau A.1	Valeur de la fonction d'erreur où $Z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$
Tableau B.1	Solubilité du bore dans le fer à différentes températures
Tableau B.2	Principales caractéristiques des borures Fe <sub>2</sub> B et FeB
Tableau B.3	Boruration par la technique des pâtes
Tableau B.4	Boruration par la technique des poudres
Tableau B.5	Réaction pouvant avoir lieu dans un ciment contenant le carbure de bore, NaBF <sub>4</sub> et le carbure de silicium
Tableau B.6	Facteurs de fréquence et énergies d'activation de diffusion du bore
Tableau B.7	Quelques exemples d'utilisation industrielle des pièces borurées
Tableau B.8	Agents réducteurs et Composition chimique des bains utilisés pour la boruration de l'acier C35
Tableau B.9	Températures minimales praticables de boruration en fonction du bain de boruration
Tableau B.10	Épaisseurs des couches borurées en fonction du bain de boruration, du temps et de la température
Tableau C.1	Fonction d'activation pour réseau de neurone artificiel
Tableau C.2	les plus importantes Variable de description du RNA
Tableau C.3	Spécification de vis
Tableau C.4	Comparaison des propriétés de matériaux pour différentes fibres
Tableau C.5	Comparaison de de propriétés de matériaux pour différentes matrices
Tableau.C.6	Fonctions d'appartenance floue
Tableau C.7	Constituants des calculs informatisés
Tableau C.8	Comparaison de caractéristiques des méthodes de calculs informatisés
Tableau 2.1	Loi de Hebb
Tableau 2.2	Base d'exemples d'apprentissage
Tableau 2.3	Base d'exemples d'apprentissage pour la loi de Hebb
Tableau 2.4	Données expérimentales utilisées pour la modélisation
Tableau 2.5	Erreurs quadratiques moyennes
Tableau 3.1	Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-B <sub>4</sub> C épaisseur de couche en fonction du temps et de la température de traitement

Tableau 3.2	Description de règles pour le bain Borax-B <sub>4</sub> C
Tableau 3.3	Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-Al épaisseur de couche en fonction du temps et de la température
Tableau 3.4	Description de règles Si... Donc ... pour le bain Borax-Al
Tableau 3.5	Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-SiC épaisseur de couche en fonction du temps et de la température
Tableau 3.6	Description de règles pour le bain Borax-SiC
Tableau 3.7	Erreurs quadratiques moyennes en fonction de la méthode utilisée
Tableau 4.1	Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-B <sub>4</sub> C
Tableau 4.2	Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-Al
Tableau 4.3	Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-SiC
Tableau 4.4	Erreurs quadratiques moyennes

# Table des matières

Introduction générale	1
CHAPITRE I : Etude Bibliographique	3
A. Etude Bibliographique sur le phénomène de diffusion	3
A.1. Introduction	3
A.2. Domaine d'utilisation	3
A.2.1 Domaine mécanique	3
A.2.2 Domaine électronique	4
A.3. Types de diffusion	5
A.3.1 Autodiffusion	5
A.3.2 Inter diffusion	5
A.4. Mécanismes de diffusion	5
A.4.1 Mécanisme lacunaire	5
A.4.2 Mécanisme interstitiel	6
A.4.3 Mécanisme interstitiel combine au mécanisme lacunaire	6
A.4.4 Mécanisme de groupe mettant en jeu plusieurs atomes	6
A.5 Fondement de la diffusion	7
A.5.1 Flux de diffusion et la loi de Fick	7
A.5.2 La diffusion et la température	7
A.6 Equations de diffusion	8
A.6.1 Première loi de Fick	8
A.6.2 La diffusion en régime permanent	9
A.6.3 Deuxième loi de Fick	9
A.6.4 Solution analytique	11
A.6.5 Equation de la fonction d'erreur	12
B Etude Bibliographique sur la boruration	14
B.1 Introduction	14
B.2 Etude du système d'équilibre binaire fe-b	14
B.3 Propriétés des couches borurées réalisées sur les aciers	15
B.3.1 Morphologie des couches	15

B.3.2	Types des couches	16
B.3.3	Epaisseur des couches	17
B.3.4	Les principales caractéristiques des borures de fer	18
B.4	Procédés de boruration des aciers	19
B.4.1	Boruration en milieu gazeux	19
B.4.2	Boruration en milieu liquide	20
B.4.3	Boruration en milieu solide	22
B.4.3.1	Technique des poudres	22
B.4.3.2	technique des pates	22
B.4.4	Autres procédés de boruration	23
B.5	Etude des équilibres thermodynamiques dans le cément de boruration	24
B.6	Formation et croissance des couches borurées	25
B.7	Influence du carbone et des principaux éléments d'alliage sur les couches borurées	27
B.7.1	Carbone	27
B.7.2	Silicium et aluminium	27
B.7.3	Chrome	27
B.7.4	Manganèse	28
B.7.5	Molybdène	28
B.8	Influence des traitements thermiques sur les couches borurées	28
B.8.1	Traitements thermiques avant boruration	29
B.8.2	Traitements thermiques après boruration	29
B.9	Applications industrielles de la boruration	30
B.10	Données expérimentales	32
B.10.1	Traitements de boruration	32
B.10.2	Mesure de l'épaisseur des couches borurées	34
B.11	Références bibliographiques	35
C	Etude Bibliographique sur la modélisation et simulation en SDM	40
C.1	Modélisation et Simulation	40
C.2	Ce que l'on entend par modélisation en Science des Matériaux et ingénierie MSDM	41
C.3	Echelles dans la structure du matériau et de son comportement	42
C.4	Comment développer des modèles	42

C.5	Méthodes pour la Modélisation et simulation en Sciences de Matériaux	44
C.5.1	Méthode des différences finies	44
C.5.2	Analyse par éléments finis	45
C.5.3	Méthode de Monte Carlo	45
C.5.4	Méthodes à champs de phase	45
C.5.5	Les méthodes du premier principe (méthodes ab initio)	46
C.5.6	Dynamique moléculaire DM	47
C.5.7	Réseau de neurones Artificiels	48
C.5.7.1	Perceptron multicouche (MLP)	50
C.5.7.2	Réseau de fonction a base radiale	51
C.5.7.3	Réseau de neurones récurrent	52
C.5.7.4	Application de la technique des réseaux de neurones	52
C.5.8	Logique Floue	54
C.5.8.1	Processus de fuzzification des entrées	58
C.5.8.2	Processus d'inférence	58
C.5.8.3	Processus de défuzzification	59
C.5.8.4	Application de la logique floue en ingénierie des matériaux	60
C.5.9	Algorithmes génétiques	61
C.5.9.1	Applications des algorithmes génétiques en Ingénierie des matériaux	62
C.5.10	Modèles Hybrides	63
C.5.10.1	Modèle Neuro-floue (Neurofuzzy)	64
C.5.10.2	Modèle Floue-Génétique	65
C.5.10.3	Modèle Neuro-génétique	65
C.5.10.4	Modèle Neuro-floue-génétique	65
C.5.10.5	Applications des méthodes hybrides en ingénierie des matériaux	66
CHAPITRE 2	Modélisation par réseau de neurones	72
2.1	Généralités	72
2.2	Le neurone biologique	72
2.3	Le neurone formel (artificiel)	73
2.4.	Fonctionnement d'un réseau de neurones artificiels	75
2.4.1	Le réseau à couche unique	77

2.4.2	Les réseaux multicouches	78
2.5	Utilisation des réseaux de neurones artificiels	79
2.5.1	Phase d'apprentissage	79
2.5.2	Phase de test	82
2.6	Exemples d'apprentissage	82
2.7	Application	86
2.7.1	Implémentation de réseaux de neurones :	88
2.7.2	Bain Borax-B <sub>4</sub> C	89
2.7.3	Bain Borax-Al	90
2.7.4	Borax-SiC	91
2.8	Conclusion	92
2.9	Références bibliographiques	93
Chapitre III Modélisation par logique Floue		94
3.1	Introduction	94
3.2	Modèles Logiques Floues	95
3.2.1	Méthode de Mamdani	95
3.2.2	Méthode de Tagaki-Sugeno	96
3.3	Application	97
3.3.1	Borax-B <sub>4</sub> C	98
3.3.1.1	Méthode de Mamdani pour Borax-B <sub>4</sub> C	98
3.3.1.1.1	Méthode de Mamdani pour Borax-B <sub>4</sub> C fonctions entrées linéaires	99
3.3.1.1.2	Méthode de Mamdani pour Borax-B <sub>4</sub> C fonctions entrées Gaussiennes	101
3.3.1.1.3	Méthode de Sugeno pour Borax-B <sub>4</sub> C	103
3.3.2	Borax-Al	104
3.3.2.1	Méthode de Mamdani pour Borax-Al	104
3.3.2.1.1	Méthode de Mamdani pour Borax-Al fonctions entrées linéaires	105
3.3.2.1.2	Méthode de Mamdani pour Borax-Al fonctions entrées gaussiennes	107
3.3.2.1.3	Méthode de Sugeno pour Borax-Al	108
3.3.3	Borax-SiC	109
3.3.3.1	Méthode de Mamdani pour Borax-SiC	110
3.3.3.1.1	Méthode de Mamdani pour Borax-SiC fonctions entrées linéaires	110

3.3.3.1.2 Méthode de Mamdani pour Borax-SiC fonctions entrées gaussiennes	112
3.3.3.1.3 Méthode de Mamdani pour Borax-SiC fonctions entrées/Sorties gaussiennes	114
3.3.3.1.4 Méthode de Sugeno pour Borax-SiC	116
3.4. Conclusion	117
3.5 Références	118
Chapitre IV : Approximation au sens des éléments Finis	119
4.1 Introduction	119
4.2 Approximation par Eléments Finis	120
4.3 Application	123
4.3.1 Bain Borax-B <sub>4</sub> C	123
4.3.2 Bain Borax-Al	124
4.3.3 Bain Borax-SiC	125
4.4 Conclusion	127
4.5 Références	128
Conclusion Générale	129

# **Introduction générale**

L'ingénierie des surfaces représente une méthode attractive et économiquement viable visant à améliorer la couche superficielle des matériaux [1]. Étant donné que la surface du matériau conditionne sa durée de vie dans plusieurs applications, son objectif étant de développer une large gamme de propriétés fonctionnelles différentes du substrat incluant les propriétés physiques, chimiques, électriques, électroniques, magnétiques ou mécaniques. Faisant partie de l'ingénierie des surfaces, le traitement thermo-chimique utilise la diffusion thermique pour incorporer des atomes métalliques ou non dans la surface du matériau pour modifier sa composition chimique et sa microstructure [1].

Le processus est réalisé en milieu solide, liquide ou gazeux avec un ou plusieurs éléments actifs simultanés. Pour la majorité des traitements thermo-chimiques, le mécanisme inclut une décomposition de l'espèce solide, liquide ou gazeuse, la scission de la molécule gazeuse pour former des atomes naissants, l'absorption des atomes, leur diffusion dans la structure métallique et la réaction avec la structure du substrat pour modifier les phases existantes ou en former d'autres. Dans un processus à échelle industrielle l'ensemble de la pièce est soumis à des températures élevées, à la diffusion en surface vient s'ajouter le changement en volume que subissent les matériaux qui pour certains traitements peut induire des transformations de phases augmentant ainsi la complexité du procédé.

Historiquement, le traitement thermo-chimique était limité aux pièces usinées, forgées ou laminées avec des applications aux machines industrielles, l'industrie automobile, l'outillage, le forage pétrolier, l'exploitation minière et la défense [2]. Le processus clé couvrait la nitruration, la cémentation et leur combinaison. Similairement, l'acier était en pratique le seul matériau sujet à la modification. Pour améliorer la prévisibilité et la répétabilité, le traitement conventionnel de nitruration a été raffiné et une technique alternative de nitruration par ions (plasma) fut introduite. Pendant ce temps, la modification du traitement thermo-chimique inclut d'autres procédés tels que la boruration, l'aluminisation, la chromisation ou d'autres diffusions thermo-réactives explorant le vanadium, molybdène et d'autres éléments formant des carbures. Bien que n'ayant pas encore atteint le niveau d'application de la nitruration, elles ont servi avec succès plusieurs champs d'applications industrielles.

L'objectif principal de ce travail est l'étude expérimentale, la modélisation et la simulation de la diffusion atomique ; dans ce cadre la boruration par bain de sels fondus de l'acier XC38 a été retenue ; vu que le procédé est assez bien maîtrisé au sein du labo génie des procédés de l'université de Laghouat et que les moyens d'expérimentation sont disponibles.

Le traitement de Boruration consiste à enrichir la surface des substrats métallique par des atomes de bore qui peuvent interagir avec les atomes du substrat pour former des couches de borures ; ce type de traitement confère aux surfaces traitées des améliorations de propriétés en augmentant la dureté, améliorant la tenue à la fatigue, la résistance à l'usure et à la corrosion.

Tout au long de l'étude, le modèle à établir consiste à mettre en œuvre une corrélation explicite ou non entre les entrées du problème que l'on considère pour notre cas le type de bain utilisé pour la boruration, la température de traitement (°C) et le temps de maintien (h) lors de la boruration, avec l'épaisseur de couches de borures obtenue en  $\mu\text{m}$ .

Cette étude est structurée en quatre chapitres :

## Introduction

Le premier chapitre aborde une étude bibliographique ; pour des raisons évidentes de clarté, cette partie a été scindée en trois parties ; une première partie concernant une étude bibliographique sur le phénomène de diffusion ; une seconde concernant la modélisation et simulation et enfin une troisième concernant la modélisation et simulation en ingénierie des matériaux mettant l'accent de façon non exhaustive sur les différentes méthodologies utilisées.

Le deuxième chapitre traite de l'utilisation du réseau de neurones artificiels pour l'établissement d'un modèle, une description méthodologique est décrite pour l'utilisation de cette méthode et des expérimentations numériques y sont abordé pour optimiser les paramètres entrant en jeu pour l'établissement de ce modèle.

Le troisième chapitre aborde la modélisation et simulation par logique floue ; où sont présentés les modèles flous utilisés avec leurs méthodologies d'applications, les résultats obtenus par ces différents types de modèles y sont présentés pour les différents bains de sels fondus.

Le quatrième chapitre traite de la modélisation par approximation au sens des éléments finis des résultats expérimentaux. Une description de la méthodologie de développement d'un modèle d'approximation par éléments finis y est décrite ; suivie d'une présentation des différentes simulations obtenues par ce modèle.

On termine cette étude par une conclusion générale et des perspectives d'études.

## Références

- [1] F.Czerwinski, Heat Treatment - Conventional and Novel Applications Intech 2012
- [2] D. Pye, Practical Nitriding and Ferritic Nitrocarburizing, Materials Park, Ohio: ASM International, 2003.

# **Chapitre I**

## **Etude Bibliographique**

### A. Etude Bibliographique sur le phénomène de diffusion

#### A.1. Introduction

Le phénomène de diffusion est un phénomène très général dans la nature, qui correspond à la tendance à l'étalement d'espèces, particules, atomes ou molécules grâce à une excitation énergétique apportée par la chaleur. Suivant le milieu dans lequel se déplacent ces espèces, l'étalement sera plus ou moins grand. A température ambiante le phénomène de diffusion sera très important dans un milieu gazeux, plus faible dans un milieu liquide et pratiquement nul dans un milieu solide. Pour obtenir un phénomène de diffusion dans un solide ou un cristal, il faudra chauffer le matériau à des températures voisines de 1000°C.

Grâce au gradient de concentration qui s'établit entre le milieu externe (soit le carbone, le bore...) qui a une concentration plus grande que celle du milieu solide le phénomène de diffusion aura lieu, le mouvement des atomes se fait de la concentration élevée vers la concentration la moins élevée.

Dans la suite, nous nous intéresserons essentiellement aux mécanismes de diffusion dans le milieu solide. Pour mieux comprendre l'aspect macroscopique du phénomène de diffusion, il faut avoir une idée des phénomènes et mécanismes mis en jeu à l'échelle atomique.

Les mécanismes ne seront possibles qu'à la condition que les espèces concernées soient suffisamment excitées (niveau d'énergie suffisant) pour statistiquement franchir les barrières d'énergie que constituent par exemple les barrières de potentiel atomique.

Ces barrières de potentiel vont dépendre des mécanismes mis en jeu. Par exemple un petit atome tel que le Bore pourra s'insérer entre les mailles du réseau cristallin et nécessitera donc une énergie plus faible pour se déplacer. En général, la diffusion est le mouvement d'un atome d'une position de maille vers une autre position, la diffusion d'un atome n'est possible que si :

- ❖ Il y a un espace adjacent
- ❖ L'atome a une énergie suffisante

#### A.2. Domaine d'utilisation :

##### A.2.1. Domaine mécanique

La diffusion est utilisée surtout pour améliorer les propriétés mécaniques des aciers spécialement dans les traitements de surface, tels que la cémentation (carburation), boruration, nitruration, ...etc. Traitement contre l'usure et contre les chocs mécaniques (ex : le traitement de surface des engrenages par carbone) ce qui donne des matériaux :

Dur à se déformer : les atomes de carbone « verrouillent » les plans de la maille ;  
Les atomes en noir (soudent la structure) et empêchent les plans de glisser

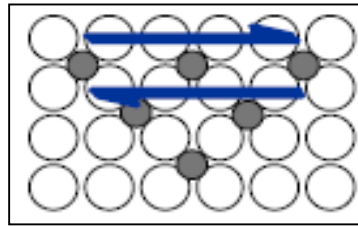


Figure A.1 Résistance à la déformation

Dur à se casser (fissurer) : les atomes de carbone augmentent la résistance en compression.

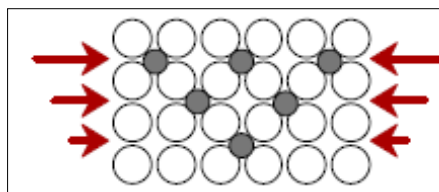


Figure A.2 Résistance à la compression

### A.2.2. Domaine électronique :

La diffusion est aussi utilisée dans le domaine électrique car les cristaux dans leurs états naturels ne sont pas des cristaux parfaits, ils contiennent des défauts cristallins. On introduit des impuretés (dopant) de nature et en quantité contrôlées afin d'obtenir un cristal qui s'approche de l'état parfait, cette technique est très utilisée dans le dopage des semi-conducteurs. Le dopage d'un matériau consiste à introduire, dans sa matrice, des atomes d'un autre matériau [2]

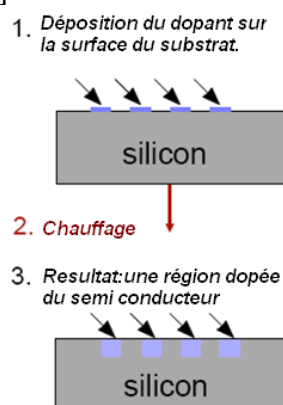


Figure A.3 Dopage d'un semi-conducteur

### A.3. Types de diffusion [3] :

#### A.3.1. Autodiffusion :

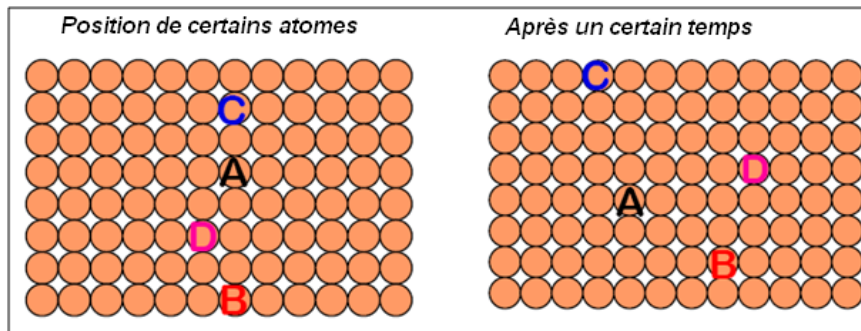


Figure A.4 Autodiffusion dans un même matériau

Dans un élément solide les atomes de la même espèce se déplacent aussi dans le volume de la matrice

#### A.3.2. Inter diffusion :

Dans un alliage les atomes tendent de se déplacer des régions de haute concentration vers les régions de basse concentration

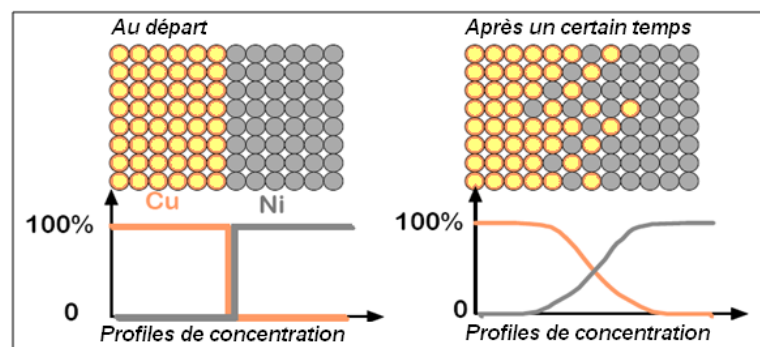


Figure A.5 Profils de concentration avant et après diffusion

### A.4. Mécanismes de diffusion : [2]

Le processus de diffusion peut être divisé en plusieurs mécanismes : mécanisme lacunaire, mécanisme interstitiel, mécanisme combiné et un mécanisme de groupe mettant plusieurs atomes en jeu :

#### A.4.1. Mécanisme lacunaire :

Correspondant à l'occupation d'une lacune ou vacance laissée par un atome du réseau cristallin qui peut, lui aussi se mouvoir en laissant des lacunes.

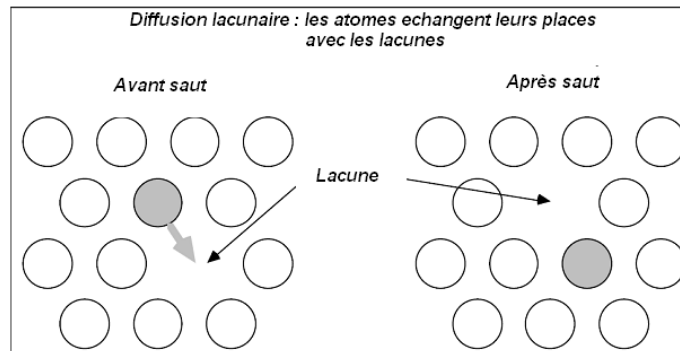


Figure A.6 Diffusion lacunaire

#### A.4.2. Mécanisme interstitiel :

Vu que la compacité maximale dans les réseaux cristallins ne dépasse jamais 70%. Les petits atomes ont donc une possibilité de déplacement entre les sites cristallins. Ce mécanisme sera prépondérant pour les petits atomes

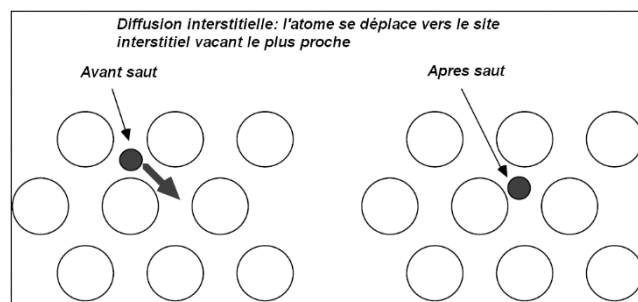


Figure A.7 Diffusion interstitielle

#### A.4.3. Mécanisme interstitiel combiné au mécanisme lacunaire :

Ce phénomène correspond à un placement en site substitutionnel d'un atome initialement positionné en site interstitiel tout en envoyant en site interstitiel l'atome en site cristallin d'origine. Ce phénomène correspond au "carreau sur place" du joueur de boules qui chasse la boule en lui prenant sa place.

#### A.4.4. Mécanisme de groupe mettant en jeu plusieurs atomes :

Ce mécanisme de placement en force est plutôt typique des gros atomes. Ces mécanismes peuvent être modélisés indépendamment mais nécessiteraient des gros moyens de calcul pour simuler l'avancement d'une quantité importante d'atomes dopants dans un cristal. Il est donc plus facile de traiter le problème de façon macroscopique et statistique, ce que nous allons faire par la suite.

### A.5. Fondement de la diffusion : [4]

Les modèles de processus de diffusion sont généralement conçus pour simuler le profil de la concentration d'un ou plusieurs composants en fonction de temps, et de la température. Le profil de concentration peut être tracé en fonction de la distance qui correspond aux conditions initiales et aux conditions aux limites qui obéissent aux lois de diffusion.

Ces profils de concentration peuvent être mesurés expérimentalement en utilisant une microsonde électronique pour effectuer des mesures de concentration progressivement le long de la longueur d'un échantillon, les profils de concentration expérimentales prises sur un couple de diffusion sont comparés à un modèle de simulation, la comparaison des profils de concentration simulées et expérimentales est une façon d'évaluer la précision d'un modèle de diffusion et la base de données de diffusion employées .

Les profils de concentration peuvent aussi être utilisés pour créer des bases de données de diffusion.

#### A.5.1. Flux de diffusion et la loi de Fick : [4]

Deux lois fondamentales de la diffusion ont été formulées au 19<sup>ème</sup> siècle par Adolph Fick. Ces lois peuvent être utilisées pour modéliser une variété de problèmes de diffusion dans les systèmes binaires.

#### A.5.2. La diffusion et la température :

L'expression mathématique générale du coefficient de diffusion  $D$  est donnée par la relation A.1 :

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q_a}{RT}\right) \quad (\text{A.1})$$

$D$ : Coefficient de diffusion

$D_0$  : Coefficient indépendant de la température

$Q_a$ : Énergie d'activation [J/mol ou eV/atom]

$T$  : Température absolue en [K]

$R$  : Constante des gaz parfaits [8,314 J/mol.K]

Le coefficient de diffusion augmente si la température augmente,  $D$  dépend fortement de la température ; quasi-nul à la température ambiante, ce coefficient est de l'ordre de l'unité en micron carré par heure pour des températures de l'ordre de 1100°C.

$D_0$  est un coefficient indépendant de la température

$Q_d$ : est l'énergie d'activation et représente la quantité d'énergie nécessaire pour lancer un processus de diffusion, on doit souvent faire face à une barrière énergétique (c'est-à-dire apporter un minimum d'énergie pour le démarrage). Cette énergie nous renseigne aussi sur la facilité ou la difficulté d'une espèce (un solide) de se diffuser à l'intérieur d'un solide, si  $Q_d$  est grande cela veut dire que la diffusion se fait difficilement, si c'est le contraire c'est-à-dire  $Q_d$  à une valeur très petite, la diffusion se fait facilement. Pratiquement l'énergie d'activation d'un mécanisme substitutionnel est plus grande que celle d'un mécanisme interstitiel donc le mouvement des atomes entre les interstices est plus facile par rapport à un autre mécanisme.

$$Q_d(\text{sub}) > Q_d(\text{int})$$

### A.6. Equations de diffusion

#### A.6.1. Première loi de Fick :

La première loi de Fick est donnée par la relation :

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{A.2}$$

Où  $J$  est le flux, l'équation montre que le flux des atomes résulte d'une variation de concentration  $C$ , avec la distance  $x$  (à savoir le gradient de concentration)  $D$  est le coefficient de diffusion, ou la diffusivité de l'élément diffusant dans l'alliage.

Le coefficient de diffusion est un indicateur de la facilité avec laquelle une substance se diffuse au sein d'une autre par le phénomène de diffusion. Il est désigné par la lettre majuscule  $D$  et a comme unité  $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . L'unité de flux dépend des unités de concentration  $C$ , ce qui en unité (SI) est normalement apparaît sous la forme  $\text{Kg}/\text{m}^2$  ou  $\text{mol}/\text{m}^2$ ; bien que d'autres unités soient utilisées avec des unités de masse. Le flux est donné par  $\text{Kg}/\text{m}^2/\text{S}$  et avec les unités de mole  $\text{mol}/\text{m}^2/\text{S}$  ou en fraction molaire.

Pour que le processus de diffusion se produise, un gradient de concentration est nécessaire. Ce processus est régi par les lois de Fick, la première loi relie le flux de diffusion  $J$  (nombre d'atome qui traversent une unité de surface par unité de temps) au gradient de concentration à l'aide d'un coefficient  $D$  appelé coefficient de diffusion.

La première loi de Fick traduit la tendance à l'étalement ; le flux d'atomes est proportionnel au gradient de concentration de ces atomes.

**A.6.2. La diffusion en régime permanent :**

Dans ce régime le profil de concentration est linéaire, il est en fonction de la distance seulement, il ne varie pas avec le temps au cours du processus de diffusion, comme illustre les deux figures A.8.1 et A.8.2 :

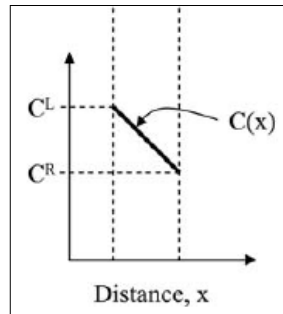


Figure A.8.1 Profil linéaire du régime permanent

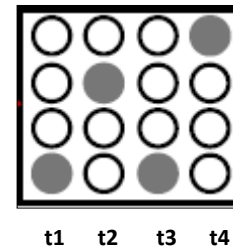


Figure A.8.2 Indépendance de la concentration du temps

La concentration des atomes en noir a  $t_1 = t_2 = t_3 = t_4$  ; elle est la même, un atome (en noir) a chaque laps de temps, le flux de la matière diffuse est indépendant du temps.

Si le profil de concentration est linéaire on peut écrire (voir Figure A8.1) :

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_L - C_R}{x_L - x_R} = \text{constante A.3}$$

**A.6.3. Deuxième loi de Fick :**

Soit un cristal sous forme d'un cube parallélépipède étendu dans une seule direction (axe des x), l'espèce diffuse se déplace du côté gauche du parallélépipède vers le côté droit. Nous définissons deux plans parallèles dans ce parallélépipède  $P_1$  et  $P_2$ , séparés par une distance élémentaire  $dx$ . (Figure A.9)

L'espèce diffuse va se déplacer dans cet espace, parmi les atomes de ce soluté, il y a des atomes qui vont se loger dans les sites vacants de la matrice, d'autres vont se substituer avec les atomes de la structure mère, et d'autres vont se faufiler dans les sites interstitiels entre les atomes de la matrice.

Donc dans ce mouvement de la matière diffuse il va y avoir une accumulation de cette matière entre les deux plans  $P_1$  et  $P_2$ .

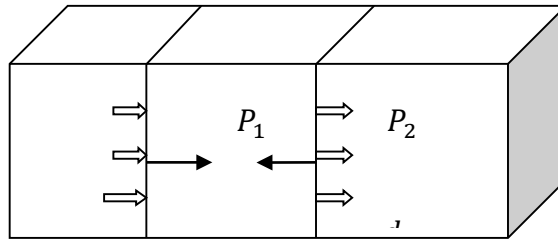


Figure A.9 Diffusion linéaire descriptive

Le taux d'accumulation d'atome = le taux de changement de flux

- Le taux d'accumulation de la matière diffuse entre ces deux plans  $P_1$  et  $P_2$  est défini comme la variation de concentration par rapport au temps par unité de volume élémentaire soit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} \times A \times dx \quad A.4$$

Où  $A$  : est la surface de chaque plan  $P_1$  et  $P_2$

et  $dx$  est la distance élémentaire de déplacement du soluté

- Le taux de changement de flux est défini par le taux de transport du soluté par unité de surface soit :

$$A[J(x) - J(x + dx)] \quad A.5$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} \times A \times dx = A[J(x) - J(x + dx)]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} \times dx = [J(x) - J(x + dx)]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{[J(x) - J(x + dx)]}{dx}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \lim_{dx \rightarrow \infty} \frac{J(x + dx) - J(x)}{dx}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x} \quad A.6$$

En substituant l'expression du flux de la première loi de Fick on obtient

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

Si le coefficient de diffusion est constant ( $D = \text{constant}$ )

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad A.7$$

Cette dernière expression est appelée la deuxième loi de Fick

**A.6.4. Solution Analytique : [3]**

L'équation différentielle (A.7) est appelée la deuxième loi de Fick, le phénomène de diffusion est gouverné par cette équation différentielle.

La deuxième loi de Fick admet une solution analytique si  $D$  (le coefficient de Diffusivité) ne varie pas avec le temps, il est en fonction de la température  $D=D(T)$ . La solution analytique est :

$$C(x, t) = A \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) + B \quad \text{A.8}$$

Où  $A, B$  sont des constantes à définir des conditions aux limites et aux conditions initiales, cette équation est appelée modèle mathématique, ce modèle sera introduit dans un code de calcul dans le but de la simulation numérique.

Le profil de concentration répond aux conditions aux limites et aux conditions initiales suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} C(0, t) = C_s \\ C(\infty, t) = C_0 \end{array} \right\} \text{Conditions aux limites}$$

$$C(x, 0) = 0 \} \text{condition initiale}$$

Le schéma A.10 illustre ces conditions :

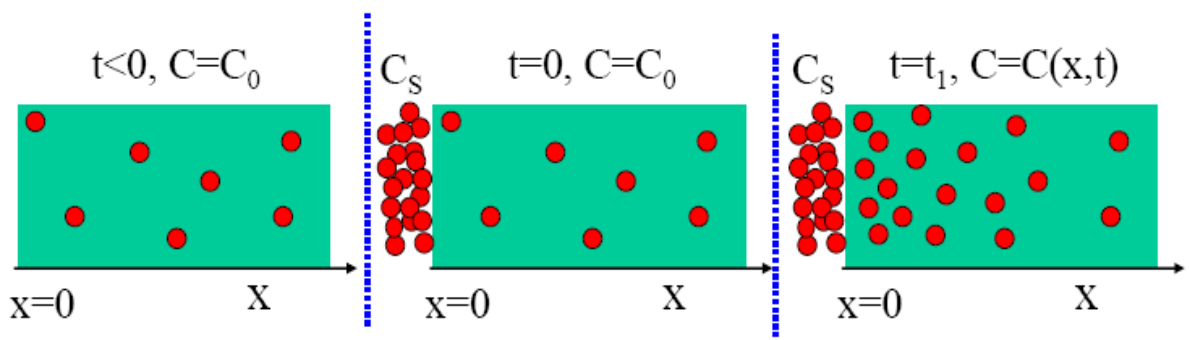


Figure A.10 Conditions aux limites et conditions initiales

La résolution de l'équation différentielle de Fick qui est soumise à ces conditions est :

$$\frac{C(x, t) - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad \text{A.9}$$

Le profil de concentration varie selon le temps de maintien. Chaque temps de maintien a une allure. La figure A.11 illustre trois courbes de concentration.

L'épaisseur de la couche diffuse correspond au temps de maintien, quand le temps est important l'épaisseur le sera aussi.

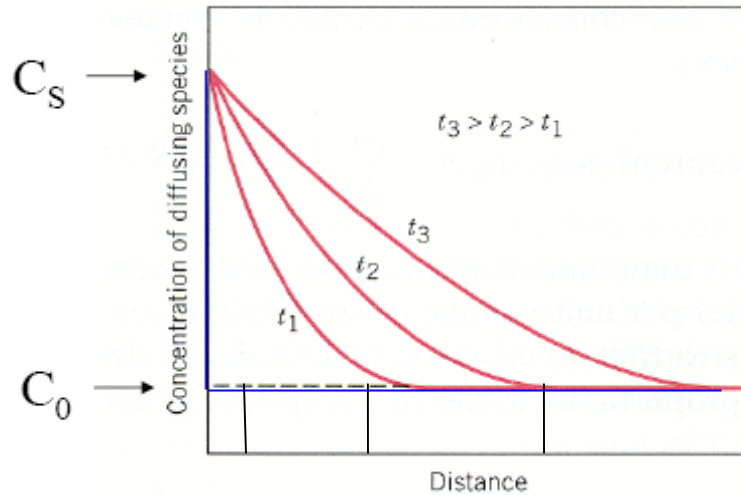


Figure A.11 Profils de concentration

La deuxième loi de Fick prend en compte l'équation de continuité. Dans un élément de volume donné, d'épaisseur  $dx$ , si le flux entrant est supérieur au flux sortant, la concentration de l'espèce considérée augmente. Cette équation est aussi utilisée pour les porteurs d'électrons et de trous dans un semi-conducteur. Mais dans le cas des atomes, il n'y a ni génération, ni recombinaison.

#### A.6.5. Equation de la fonction d'erreur :

La solution de la deuxième loi de Fick peut être écrite comme suit :

$$C(x, t) = A \operatorname{erf}(Z) + B \quad \text{A.10}$$

Où  $A$  et  $B$  sont des constantes qui peuvent être calculées à partir de deux concentrations quelconques d'un profil de concentration, et  $Z$  une variable sans (dimension) définie par :

$$Z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad \text{A.11}$$

Et  $\operatorname{erf}(Z)$  est la fonction erreur qui est définie par :

$$\operatorname{erf}(Z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^Z \exp(-\eta^2) d\eta \quad \text{A.12}$$

## CHAPITRE I : Etude Bibliographique

L'intégrale de la fonction erreur n'a pas de solution algébrique simple, mais les tableaux obtenus par les méthodes numériques sont disponibles dans les manuels.

Tableau A.1 : Valeur de la fonction d'erreur où  $Z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$

<i>z</i>	<i>erf(z)</i>	<i>z</i>	<i>erf(z)</i>	<i>z</i>	<i>erf(z)</i>
0	0	0.6	0.6039	1.4	0.9523
0.05	0.0564	0.65	0.6420	1.5	0.9661
0.1	0.1125	0.7	0.6778	1.6	0.9763
0.15	0.1680	0.75	0.7112	1.7	0.9838
0.2	0.2227	0.8	0.7421	1.8	0.9891
0.25	0.2763	0.85	0.7707	1.9	0.9928
0.3	0.3286	0.9	0.7969	2	0.9953
0.35	0.3794	0.95	0.8209	2.2	0.9981
0.4	0.4284	1	0.8427	2.4	0.9993
0.45	0.4755	1.1	0.8802	2.6	0.9998
0.5	0.5205	1.2	0.9103	2.7	0.9999
0.55	0.5633	1.3	0.9340	2.8	0.9999

### B. Etude Bibliographique sur la boruration

#### B.1. Introduction

La boruration est un traitement thermo-chimique de surface qui est connu depuis 1895 d'après les travaux de Moisson, et a vu son application industrielle vers les années 70 dans plusieurs pays [1]. Le procédé de boruration consiste à placer les pièces à traiter dans un milieu très riche en bore, puis à les mettre dans des fours à haute température pour faciliter la diffusion de ce dernier et favoriser la formation de borures avec le matériau de base.

Le traitement de boruration peut être appliqué à une très grande variété de matériaux (alliages ferreux, alliages non ferreux à base de Ni, Ti, Co,... et cermets) à cause des bonnes propriétés mécaniques et chimiques apportées aux matériaux traités. En effet, les aciers borurés ont une dureté superficielle élevée qui se maintient à haute température, une bonne résistance à l'usure adhésive et abrasive, et une bonne stabilité chimique à l'attaque par les acides et les métaux fondus (en particulier, le zinc et l'aluminium). En fonction du milieu contenant la source de bore, les traitements de boruration peuvent être effectués dans un milieu gazeux, liquide, solide ou plasma.

Avant d'évoquer les propriétés des couches borurées et les procédés utilisés pour l'obtention de ces couches, nous avons jugé très utile de présenter le système d'équilibre binaire entre le Fer et le Bore et les phases constituantes de ce système.

#### B.2. Etude du système d'équilibre binaire Fe-B

La figure B.1 [2, 3] présente le diagramme d'équilibre du système binaire **Fe-B**. D'après cette figure, on peut signaler les constatations suivantes :

- La solubilité du bore dans le fer est très faible. Elle est de l'ordre de 2 ppm dans la ferrite à 720 °C comme valeur minimale, et de 210 ppm comme valeur maximale dans l'austénite à 1149 °C [4]. Le tableau B.1 regroupe les valeurs de la solubilité du bore dans le fer en fonction de la phase et de la température.
- Au-delà des limites de solubilité du bore dans le fer, le bore et le fer forment ensemble les borures  $Fe_2B$  et  $FeB$

**Le borure  $Fe_2B$**  : Est un composé chimique formé entre le fer et le bore pour une concentration atomique en bore de 33,33 %. Ce même borure  $Fe_2B$  forme avec le fer un eutectique à 1149 °C (Figure B.1).

**Le borure  $FeB$**  : Ce composé chimique correspond à une concentration atomique en bore de 50 %. Ce deuxième borure  $FeB$  n'est stable que sur une gamme de composition chimique extrêmement étroite (Figure B.1).

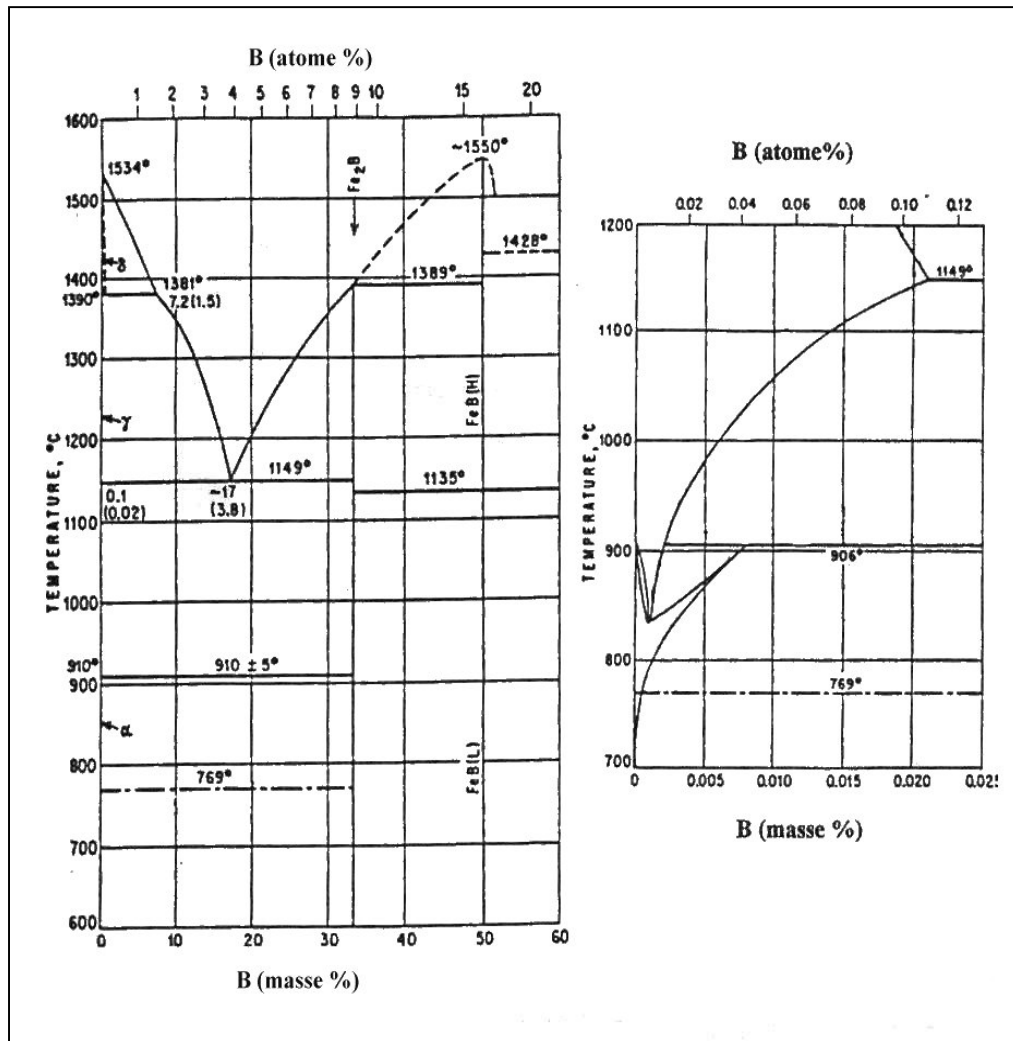


Figure B.1 Diagramme d'équilibre du système binaire Fe-B [2, 3]

Tableau B.1 Solubilité du bore dans le fer à différentes températures [4]

Température (°C)	Bore en solution ppm (par masse)
710 ( $\alpha$ )	2
906 ( $\alpha$ )	82
906 ( $\gamma$ )	21
1149 ( $\gamma$ )	210

### B.3. Propriétés des couches borurées réalisées sur les aciers

#### B.3.1. Morphologie des couches

Les couches borurées réalisées sur les aciers au carbone et les aciers faiblement alliés ont, en général, une forme aciculaire très accentuée orientée perpendiculairement à la surface traitée. Cette forme aciculaire assure un bon accrochage des couches borurées au métal de base.

Dans le cas d'aciers fortement alliés cette dentelure est atténuée, voire inexistante pour certains aciers, ce qui peut conduire à des risques d'écaillage de la couche borurée, surtout lorsque celles-ci est soumise à des sollicitations de chocs. Parfois, l'écaillage se fait lors de la trempe à l'eau ou à l'huile, dans le cas où le substrat devrait être durci.

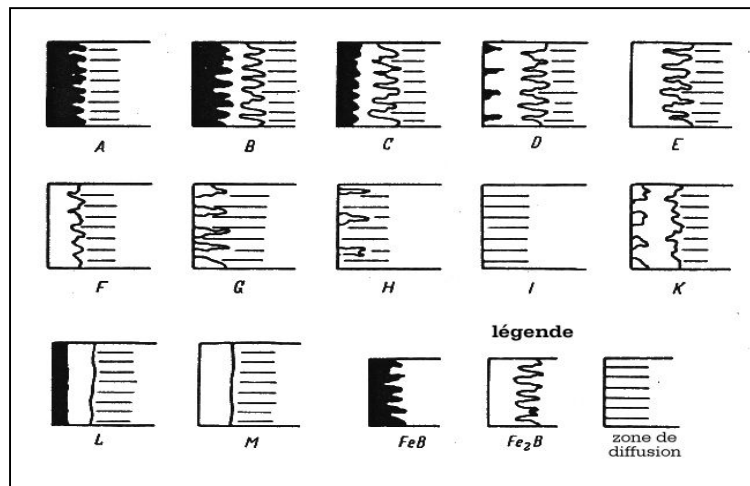
#### B.3.2. Types des couches

Selon le milieu et les conditions de boruration, les couches borurées obtenues sur les aciers peuvent être monophasées (constituées uniquement du borure  $Fe_2B$ ) ou biphasées (constituées des deux borures  $FeB$  vers l'extérieur de la surface et  $Fe_2B$  vers l'intérieur).

Le choix entre la réalisation d'une configuration monophasée et une autre biphasée se fait sur la base des conditions de sollicitations des pièces traitées. Pour une bonne résistance à l'usure abrasive sans choc, la couche biphasée est préférée à cause du borure  $FeB$  qui est plus dur que le borure  $Fe_2B$ , alors que la couche monophasée est plus souhaitée dans les sollicitations à chocs.

Après de nombreux travaux de recherches de boruration dans différents milieux et dans des conditions très variées, Kunst et Shaaber [5] ont réussi à classer les couches borurées en fonction de leurs qualités.

La figure B.2 présente les différents types des couches borurées qui peuvent être obtenues après un traitement de boruration.



**Figure B.2** Types de couches borurées obtenues en fonction du milieu et des conditions de boruration [5]

**Couche A :** Couche monophasée de FeB.

**Couche B :** Couche à deux phases FeB et Fe<sub>2</sub>B.

**Couche C :** Couche à deux phases FeB plus mince que dans B.

**Couche D :** Couche à deux phases, mais seulement des dents de FeB isolés.

**Couche E :** Couche monophasée de Fe<sub>2</sub>B fortement dentelée.

**Couche F :** Couche monophasée de Fe<sub>2</sub>B moins fortement dentelée.

**Couche G :** Couche dentelée de Fe<sub>2</sub>B.

**Couche H :** Couche dentelée de Fe<sub>2</sub>B très isolée.

**Couche I :** Zone de diffusion.

**Couche K :** Couche dégénérée.

**Couche L :** Couche à deux phases FeB et Fe<sub>2</sub>B non dentelée.

**Couche M :** Couche monophasée Fe<sub>2</sub>B non dentelée.

Pour évaluer la qualité d'une couche borurée donnée, il suffit d'effectuer un test métallographique qui permet de vérifier la présence d'une ou de deux phases et d'estimer la profondeur des couches, ainsi que la nature de l'interface entre la couche et le substrat.

### B.3.3. Epaisseur des couches

Théoriquement l'épaisseur d'une couche borurée n'est pas limitée. Il suffit d'augmenter la durée et/ou la température de traitement pour obtenir des couches borurées de plus en plus épaisses.

A cause de la grande fragilité des couches borurées, le plus souvent, l'épaisseur de cette dernière est limitée à des profondeurs adéquates aux conditions de travail :

- On se limite à des épaisseurs de l'ordre de 10 à 20  $\mu\text{m}$  pour les pièces mécaniques travaillant dans des conditions de chocs afin d'éviter la fissuration et l'écaillage des couches borurées.
- On peut aller jusqu'à 400  $\mu\text{m}$  pour les pièces subissant une usure par abrasion sans choc.

Toutefois, il faut signaler que lors des traitements de boruration, une surépaisseur d'environ 20 à 25 % de l'épaisseur de la couche borurée est enregistrée sur les pièces traitées. Par conséquent, ce phénomène doit être pris en considération lors des traitements de boruration, en sous dimensionnant les pièces à traiter dès le début.

### B.3.4. Les principales caractéristiques des borures de fer

Les couches borurées sur les aciers sont connues pour leurs propriétés mécaniques et chimiques particulières :

- La dureté des couches borurées est de l'ordre de 1800 HV pour  $\text{Fe}_2\text{B}$  et 2100 HV pour FeB et elle se maintient même à des températures très élevées.
- Les propriétés tribologiques des couches borurées sont très bonnes. La boruration est utilisée pour l'amélioration de la tenue à l'usure abrasive et est considérée comme un traitement concurrent aux autres revêtements utilisés pour leurs applications tribologiques tels que TiC, TiN,....
- Les couches borurées présentent une grande résistance au phénomène d'endommagement du type usure adhésive. Le coefficient de frottement, dans les conditions de frottement mixte est  $\mu = 0,1 - 0,15$  pour frottement sur acier ou sur alumine [1].
- Dans le domaine nucléaire, ces couches présentent un intérêt important lié aux propriétés neutroniques du Bore. Donc ces couches peuvent être utilisées comme absorbant sous forme massive [6].
- Les couches borurées ont, d'une manière générale, une stabilité chimique très remarquable ce qui les laisse très envisageables dans les différents milieux agressifs. Dans beaucoup de travaux, les couches borurées ont montrés une bonne résistance à l'attaque par la plupart des acides et des bases (HCl,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{H}_3\text{PO}_4$ , NaOH, KOH,...).

- A cause de la grande différence entre les coefficients de dilatation thermique des couches borurées et de l'acier, lors du refroidissement après boruration, il apparaît des contraintes internes très intenses qui peuvent conduire à des fissures à la surface borurée.
- La rugosité des couches borurées est de l'ordre de 2 à 4 µm pour les surfaces polies et de 4 à 6 µm pour les surfaces rectifiées.

Les principales caractéristiques physico-chimiques et mécaniques des borures Fe<sub>2</sub>B et FeB sont présentées dans le tableau B.2.

**Tableau B.2 : Principales caractéristiques des borures Fe<sub>2</sub>B et FeB**

Propriété	Fe <sub>2</sub> B	FeB
Température de fusion (°C)	1390	1550
Température de Curie (°C)	742	325
Densité (g/cm <sup>3</sup> )	6.75	7.43
Coefficient de dilatation thermique entre 20 et 900 °C (10 <sup>-6</sup> °C <sup>-1</sup> )	11.53	8.6
Conductibilité thermique (W/cm °C)	0,2-0,3	0.1-0.2
Résistivité électrique (µΩ cm)	10	20
Module d'élasticité (GPa)	590	285-295
Dureté (HV)	1800-2000	1900-2100

#### **B.4. Procédés de boruration des aciers**

Le bore qui diffuse à travers la surface des matériaux traités peut être apporté par une réaction chimique ou électrochimique entre un milieu contenant du bore et le matériau. Ce milieu peut être gazeux, liquide ou solide (poudre ou pâte).

Ces différentes voies de boruration ont fait l'objet de plusieurs recherches, et chacune de ces voies présente des avantages et des inconvénients. Dans ce paragraphe, nous présenterons les principales méthodes utilisées pour la boruration des aciers.

##### **B.4.1. Boruration en milieu gazeux**

La boruration en milieu gazeux s'effectue par la décomposition ou la dissociation thermique des composés volatils de bore. Les composés les plus utilisés dans ce procédé sont le diborane (B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), les halogénures de bore (BF<sub>3</sub>, BCl<sub>3</sub>, BBr<sub>3</sub>,...) et les composés organiques du bore ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>B, (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>B,...).

**a) - Le diborane** : Généralement le diborane est utilisé sous forme d'un mélange « diborane-hydrogène » pour pouvoir obtenir des couches borurées de qualité

satisfaisante [8]. Le rendement de transfert de bore du milieu gazeux au substrat peut être amélioré par l'incorporation d'un dispositif de bombardement ionique dans l'enceinte de boruration [9]. Toutefois, le diborane reste peu utilisé en raison de sa toxicité et de son inflammabilité.

***b) - Les halogénures de bore*** : La boruration avec le tri chlorure de bore ( $\text{BCl}_3$ ) ou le tri bromure de bore ( $\text{BBr}_3$ ) s'accompagne d'une corrosion importante de l'acier traité, ce qui conduit généralement à des couches non compactes [10].

***c) - Les composés organiques du bore*** : Les composés organiques les plus utilisés sont le tri méthyle de bore ( $(\text{CH}_3)_3\text{B}$ ) et le tri éthyle de bore ( $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{B}$ ). Ces composés étant riches en carbone, leur utilisation provoque concurremment une cémentation des aciers traités, ce qui a pour effet de réduire la qualité des couches superficielles obtenues [11].

En général, les couches borurées produites sont uniformes et ont un très bon état de surface, ce qui rend l'opération de nettoyage des pièces traitées inutile.

Malgré les avantages que présente la boruration en milieux gazeux, ce procédé n'a pas connu un grand succès à l'échelle industrielle à cause des problèmes suscités.

### **B.4.2. Boruration en milieu liquide**

La libération de bore naissant à la surface de la pièce traitée nécessite la réduction chimique du composé porteur de bore. Cette réduction peut s'effectuer soit par voie électrochimique sous une tension appliquée, soit par voie chimique par l'addition d'un agent réducteur au bain de boruration.

Les sels utilisés dans les traitements de boruration avec ou sans électrolyse ont été abondamment décrits par plusieurs chercheurs [12-13].

#### **a - Boruration électrochimique dans des sels fondus**

Les électrolytes les plus utilisés dans ce procédés sont généralement à base de tétra borate de sodium (connu sous le nom borax:  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ ) ou de tétra fluoroborate de potassium ( $\text{KBF}_4$ ).

Du borax pur ( $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ ) et du tétra fluoroborate de potassium pur ( $\text{KBF}_4$ ) ont été utilisés avec succès. Toutefois, des fluorures et des chlorures alcalins sont généralement ajoutés aux composés de base, dans le but d'améliorer les propriétés physico-chimiques des bains de boruration (température du liquidus, viscosité, conductivité électrique,...).

La composition chimique du bain de boruration est choisie en fonction de la température d'utilisation :

- Les électrolytes à base de  $\text{KBF}_4$  sont utilisés pour des températures comprises entre 600 et 850°C
- Les électrolytes à base de  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$  sont utilisés pour des températures variant de 800 à 1050°C.

Dans tous les cas recensés, la boruration électrolytique a donné lieu à des couches borurées biphasées.

### **b - Boruration thermochimique dans des sels fondus**

Le mécanisme de boruration dans des sels fondus présuppose la formation d'une cellule galvanique où le substrat joue le rôle de cathode et les fines particules de l'agent réducteur en suspension dans le bain jouent le rôle de micro-anodes.

Selon ce mécanisme, étudié en détail par Lyakhovich [14], la boruration n'a lieu que si et seulement si le potentiel de la surface de la pièce traitée est supérieur à celui de l'agent réducteur.

Sur la base de la théorie suscitée, plusieurs métaux et substances chimiques peuvent jouer le rôle de l'agent réducteur qui permet d'obtenir le bore atomique nécessaire dans tous les traitements de boruration.

Les agents réducteurs les plus utilisés sont :

- **L'aluminium** : La grande affinité de l'aluminium pour l'oxygène rend cet élément apte à réduire le bore qui est présent sous forme d'anhydride borique ( $\text{B}_2\text{O}_3$ ) qui se forme après la dissociation thermique du borax.

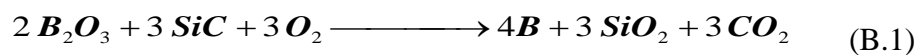
Ce genre de réducteur conduit généralement à des couches borurées biphasées ( $\text{Fe}_2\text{B}+\text{FeB}$ ) ayant une épaisseur assez satisfaisante. Toutefois, il faut signaler que tous les bains constitués du borax et d'aluminium sont caractérisés par une viscosité très élevée, ce qui gêne d'une façon très remarquable le processus de boruration jusqu'à le bloquer dans certains cas.

Parfois, de la cryolite ( $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ ) ou certains sels neutres sont ajoutés aux bains de boruration pour en réduire la viscosité et redémarrer le processus.

- **le carbure de bore :** Le carbure de bore est l'agent réducteur le plus utilisé dans les traitements de boruration dans des sels fondus à base de borax.

La proportion de carbure de bore dans le borax ne doit pas dépasser 40% par masse afin d'éviter que le bain ne devienne pâteux et n'entraîne une boruration non uniforme de la surface traitée.

- **le carbure de silicium :** Le carbure de silicium (SiC) est utilisé lorsqu'on désire produire une couche borurée monophasée (Fe<sub>2</sub>B). La réaction de l'anhydride borique résultant de la dissociation thermique montre clairement que la présence d'oxygène en quantité suffisante est nécessaire à la libération de bore atomique (équation B.1).



La proportion du carbure de silicium dans le bain de boruration est aussi limitée à 35% par masse afin de maintenir sa viscosité à un niveau acceptable.

- **Autres agents réducteurs :** D'autres agents réducteurs différents de ceux cités dans le paragraphe précédent à base de ferro-alliages ou de carbures (le silicium, le calcium-silicium, le ferro-silicium, le ferro-manganèse, le carbure de calcium et la poudre de bore) ont également été utilisés par plusieurs chercheurs. En particulier, le carbure de calcium a donné des résultats plus que satisfaisants, mais l'explosivité de ce produit a limité son utilisation.

### B.4.3. Boruration en milieu solide

#### B.4.3.1 Technique des poudres

En raison de sa simplicité et de la propreté des pièces qu'elle produit, la boruration dans des poudres est la technique la plus utilisée actuellement dans la plupart des pays industrialisés. Cette technique consiste à emballer les pièces à traiter dans des caisses en acier remplies de poudre de boruration, puis à chauffer ces caisses dans des fours à moufles. Les poudres de boruration ayant généralement une mauvaise conductibilité thermique, des temps relativement importants doivent être impartis à l'homogénéisation de la température.

#### B.4.3.2 Technique des pâtes

Cette technique est surtout utilisée pour les borurations partielles et pour la boruration de grosses pièces qui sont difficiles à traiter par la technique des poudres. Les pièces à

## CHAPITRE I : Etude Bibliographique

borurer sont couvertes de pâte de boruration puis chauffées par induction ou par effet Joule ou enfournées dans des fours conventionnels.

Dans le cas d'une boruration partielle, les zones à ne pas borurer sont protégées par des dépôts électrolytiques de cuivre ou d'autres produits qui empêchent la diffusion du bore et inhibent la corrosion à haute température.

Les pâtes de boruration se composent de deux constituants :

1. Un constituant solide contenant une source riche en bore (carbure de bore, ferrobore, bore amorphe), un activateur (cryolite ou fluoroborates) et un diluant inerte (alumine ou carbure de silicium).
2. Un liant liquide de nature organique (méthyle cellulose ou nitrocellulose dissoute dans l'acétate de butyle).

Les paramètres de boruration usuellement utilisés dans la technique des pâtes sont présentés dans le tableau B.3.

**Tableau B.3** Boruration par la technique des pâtes [4]

Milieu de boruration	Température de boruration (°C)	Temps de boruration (h)	Epaisseur de la couche borurée(µm)	Borures obtenus
50% B <sub>4</sub> C + 50 % Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub> + liant	1200	2-3 min.	35-125	FeB+Fe <sub>2</sub> B
45% B <sub>4</sub> C + 55 % Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub> + liant	950	4	120	FeB+Fe <sub>2</sub> B
80% ( 50% Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 50% B <sub>4</sub> C) + 20% Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub>	800-1050	2-4	30-250	FeB+Fe <sub>2</sub> B
80% B <sub>4</sub> C + 20 % Na <sub>3</sub> AlF <sub>6</sub>	800-1050	2-4	30-250	FeB+Fe <sub>2</sub> B
40-60 % B <sub>4</sub> C + 60-40 % NaF	1100	0,15	90-120	FeB+Fe <sub>2</sub> B
95 % B + 5 % MgF	950	1,5	85	Fe <sub>2</sub> B
60 % B + 40 % Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> + liant	750-950	0,5-2	15-200	FeB+Fe <sub>2</sub> B

### B.4.4. Autres procédés de boruration

D'autres procédés de boruration en plus que ceux déjà décrits précédemment sont également employés pour réaliser des couches borurées sur des aciers ou d'autres substrats. Parmi ces procédés on peut citer :

- ❑ Boruration dans un lit fluidisé
- ❑ Boruration par déposition physique en phase vapeur (P.V.D.)
- ❑ Boruration par déposition chimique en phase vapeur (C.V.D.)
- ❑ Projection de borures par torche plasma
- ❑ Boruration à composants multiples
- ❑ Boruration par bombardement ionique

Les paramètres de boruration et la composition chimique des mélanges recommandés pour la technique des poudres sont rassemblés dans le tableau B.4.

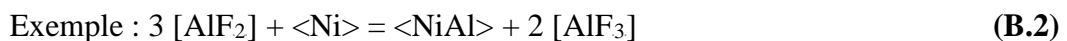
**Tableau B.4** Boruration par la technique des poudres [4]

Milieu de boruration	Température de boruration (°C)	Temps de boruration (h)	Epaisseur de la couche borurée (µm)	Borures obtenus
100% B amorphe dans une atmosphère de H <sub>2</sub>	850-900	2-5	30-130	FeB+Fe <sub>2</sub> B
100% B amorphe dans une atmosphère de H <sub>2</sub> +HCl	850-900	2-5	40-300	FeB+Fe <sub>2</sub> B
75% B amorphe + 25% Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	950-1050	2-5	45-330	FeB+Fe <sub>2</sub> B
33% B amorphe + 65% Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 2% NH <sub>4</sub> Cl	850-900	2-5	100	FeB+Fe <sub>2</sub> B
50% B amorphe + 49% Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 1% NH <sub>4</sub> F HF	815	6-24	120	FeB+Fe <sub>2</sub> B
66 % Ferrobore + 32 % Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 2 % BaF <sub>2</sub>	900	8	180	FeB+Fe <sub>2</sub> B
(8-22) % B <sub>4</sub> C + (92-78) % Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> sous vide	900-1000	3-9	25-190	FeB+Fe <sub>2</sub> B
4.75 % B <sub>4</sub> C + 5% KBF <sub>4</sub> + 90.25% SiC	900	4	100	FeB+Fe <sub>2</sub> B
100% B <sub>4</sub> C	950-1000	2-6	50-300	FeB+Fe <sub>2</sub> B
98-99 % B <sub>4</sub> C +1-2% AlF <sub>2</sub>	800-1000	2-6	60-300	FeB+Fe <sub>2</sub> B
50% B <sub>4</sub> C +43 % Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 3% KBF <sub>4</sub>	970	3-4	100-140	FeB+Fe <sub>2</sub> B
40-70% source de bore [B amorphe, ferrobore, nickel-bore] + 1-5% activateur (NH <sub>4</sub> Cl, NaF, KBF <sub>4</sub> , AlF <sub>3</sub> ) + diluant inerte (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ,MgO, SiC)	950-1050	3-5	70-250	FeB+Fe <sub>2</sub> B
Ekabor1, Ekabor 2, Ekabor 3	900	4-12	100-200	FeB+Fe <sub>2</sub> B ou Fe <sub>2</sub> B

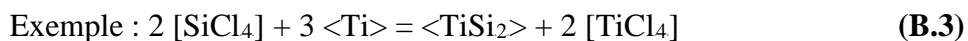
### B.5. Etude des équilibres thermodynamiques dans le ciment de boruration

Plusieurs types de réactions peuvent être produits à la surface d'une pièce entourée de ciment de boruration et placée dans une caisse activée. Parmi ces réactions, on peut citer :

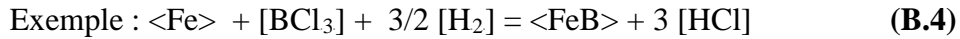
**La dismutation d'un halogénure volatil :**



- **L'échange du donneur avec les atomes du substrat :**



- **La réduction d'un halogénure volatil par l'hydrogène** (cas des activateurs halogénures d'ammonium)



L'étude des équilibres thermodynamique dans les ciments de boruration et au contact du substrat, et l'observation des gradients de pressions qui en découlent, permettent souvent de connaître la réaction prépondérante dans un système donné.

D'une manière générale, dans les procédés de cémentation activée dans des caisses, il y a toujours compétition entre :

1. D'une part, la diffusion gazeuse des halogénures, qui tend à équilibrer les activités des espèces gazeuses à la surface du substrat et au voisinage du ciment.
2. D'autre part, la diffusion en phase solide au sein du matériau traité qui abaisse l'activité de l'élément déposé en surface.

Le tableau B.5 rassemble les réactions qui peuvent avoir lieu dans un ciment contenant : le carbure de bore,  $\text{NaBF}_4$  et le carbure de silicium.

**Tableau B.5 :** Réaction pouvant avoir lieu dans un ciment contenant : le carbure de bore,  $\text{NaBF}_4$  et le carbure de silicium

L'équation de la réaction	$\Delta G^1$ [KJ]	$\Delta S^2$ [KJ]
$\text{NaBF}_4 \longrightarrow \text{NaF} + \text{BF}_3$	< 0	> 0
$4 \text{BF}_3 + 3 \text{SiC} + \frac{3}{2} \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{SiF}_4 + 3 \text{CO} + 4 \text{B}$	-560	110
$3 \text{SiF}_4 + \text{B}_4\text{C} + \frac{3}{2} \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{BF}_3 + \text{SiO}_2 + \text{CO} + 2 \text{Si}$	-793	94
$\text{B}_4\text{C} + 3 \text{SiC} + 3 \text{O}_2 \xrightarrow[\text{SiF}_4]{\text{BF}_3} 4 \text{B} + 2 \text{Si} + \text{SiO}_2 + 4 \text{CO}$	-1353	204

D'après les réactions du tableau B.5, on peut dire que le traitement de boruration dans un milieu solide avec des poudres à base de  $\text{NaBF}_4$  comme activateur, s'effectue avec un processus mixte : l'un dans le gaz et le second dans le solide.

---

<sup>1</sup> G : l'enthalpie libre

<sup>2</sup> S : l'entropie

**B.6. Formation et croissance des couches borurées**

Selon plusieurs auteurs [22,23], les atomes de bore libérés par le milieu de boruration sont adsorbés à la surface du substrat puis entrent en solution solide dans le fer ou l’acier. Lorsque la solubilité maximale du bore est atteinte, les borures se précipitent. Avec l’augmentation de la teneur en bore à la surface, les premiers germes du borure Fe<sub>2</sub>B apparaissent sur les points les plus réactifs de la surface du substrat (rayures, rugosité, joints de grains, dislocations, ...). Avec le temps, la concentration du bore au niveau de l’interface **milieu de boruration / Fe<sub>2</sub>B** atteint une valeur critique, ce qui conduit à l’apparition des premiers germes du borure FeB à la surface du substrat.

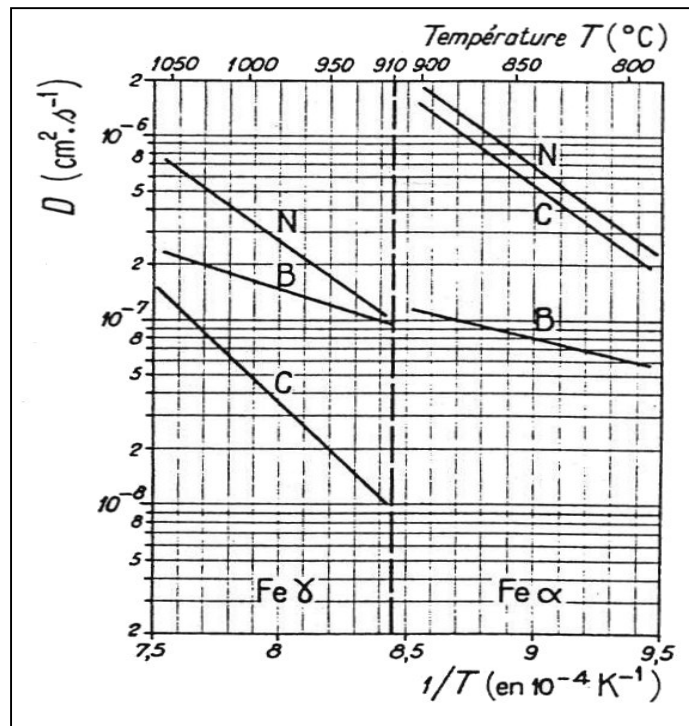
La croissance des couches borurées est initialement gouvernée par la déposition de bore atomique à la surface du substrat, et dès qu’une certaine concentration critique de bore est atteinte en surface, le contrôle revient à la diffusion.

Le tableau B.6 présente les facteurs de fréquence et les énergies d’activation de diffusion du bore dans le fer, dans un acier contenant 0,09 % de carbone et dans un borure de fer contenant entre 8 et 11% de bore.

**Tableau B.6** : Facteurs de fréquence et énergies d’activation de diffusion du bore [24].

Substrat	Elément diffusant	D <sub>0</sub> (cm <sup>2</sup> /s)	Q <sub>d</sub> (Kcal./at. g)
Fer Armco	B	4,8 10 <sup>-5</sup>	13,9
Acier (C=0,09% ; Mn=0,4% ; Si=0,10%)	B	8,4 10 <sup>-5</sup>	15,3
Borure de fer (9 à 11,5% B)	B	0,71	42,4

La figure B.3 représente une comparaison entre les coefficients de diffusion du bore, du carbone et de l'azote dans le fer à différentes températures.



**Figure B.3** Variation des coefficients de diffusion du bore, du carbone et de l'azote en fonction de l'inverse de la température [24]

## B.7. Influence du carbone et des principaux éléments d'alliage sur les couches borurées

La plupart des éléments d'alliages ont un effet sur la nature, la qualité et l'épaisseur des couches borurées obtenues sur les aciers. Dans ce paragraphe, nous allons parler particulièrement des éléments les plus utilisés comme éléments d'addition.

### B.7.1. Carbone

Selon Matuschka [25], la solubilité du carbone dans les borures de fer est très faible. Ainsi, malgré la possibilité d'une faible décarburation en milieu oxydant au début du traitement, la croissance de la couche borurée s'accompagne d'un rejet de carbone vers le cœur du substrat. Ce rejet se traduit par la formation d'une sous-couche riche en carbone et en borocarbures  $\text{Fe}_3(\text{B,C})$  et  $\text{Fe}_{23}(\text{B,C})_6$  [26,27]. L'épaisseur de cette sous-couche dépend de la teneur en carbone de l'acier boruré, de la température et du temps de boruration.

L'augmentation de la teneur en carbone des aciers diminue l'épaisseur de la couche borurée et aplanit les interfaces  $\text{FeB}/\text{Fe}_2\text{B}$  et  $\text{Fe}_2\text{B}/\text{substrat}$  [28]. Kunst et Schaaber [29,30] ont attribué ces effets à la difficulté qu'ont les atomes de bore à diffuser à travers la zone riche en borocarbures. Toutefois, il faut signaler que Galibois et al. [31,32] ont réussi à produire des couches borurées aciculaires sur des aciers contenant jusqu'à 1 % de carbone.

### B.7.2. Silicium et aluminium

En raison de leur très faible solubilité dans les borures de fer, le silicium et l'aluminium se déplacent massivement vers le substrat pendant la formation des couches borurées. Ce qui conduit à un enrichissement notable de la zone sous-jacente à  $\text{Fe}_2\text{B}$  en ces deux éléments [25, 27 et 34]. Cette ségrégation peut conduire à une stabilisation de la ferrite dans les aciers riches en silicium et en aluminium. Aussi la firme Degussa recommande-t-elle de limiter la teneur en silicium et en aluminium dans les aciers destinés à être borurés à 1 et 0.3 %, respectivement, et cela afin d'éviter la formation d'une sous-couche ferritique tendre en dessous de la couche borurée [35].

### B.7.3. Chrome

Les recherches effectuées sur la distribution du chrome dans les aciers borurés s'accordent sur le fait qu'un enrichissement en chrome des couches borurées a lieu. La présence de chrome dans la couche borurée modifie sensiblement sa structure et ses propriétés. Les travaux effectués par des chercheurs italiens ont montré qu'en plus de la diminution de l'épaisseur et de la modification de la morphologie, une forte teneur en chrome défavorise la formation de couches borurées monophasées [36-37]. Lorsque la teneur en chrome de l'acier boruré atteint 13% de la masse, la couche borurée s'enrichit d'un nouveau borure indépendant, le borure de chrome  $\text{CrB}$ .

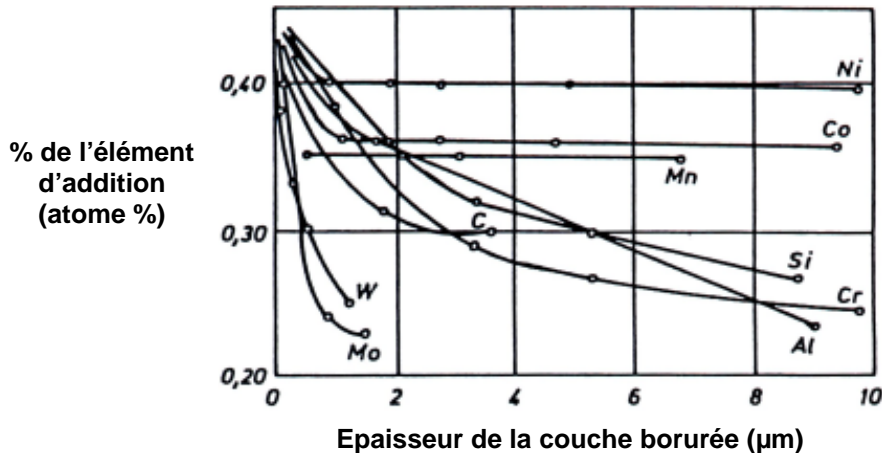
### B.7.4. Manganèse

Par rapport aux autres éléments d'alliage, le manganèse affecte légèrement les couches borurées. Par exemple, Carbucicchio et al. [39] n'ont enregistré aucun changement dans la morphologie ou dans l'épaisseur de la couche borurée produite sur un acier contenant 0.7% de manganèse.

### B.7.5. Molybdène

Le molybdène se distribue uniformément dans les borures  $\text{FeB}$  et  $\text{Fe}_2\text{B}$ . La substitution du molybdène au fer se traduit par la formation des borures  $(\text{Fe},\text{Mo})\text{B}$  et  $(\text{Fe},\text{Mo})_2\text{B}$ . Cette

formation gêne énormément la croissance de la couche borurée. En résumé, la plupart des éléments d'alliage sur l'épaisseur des couches borurées est présentée dans la figure B.4. Il est clair qu'un grand nombre de ces éléments retardent la croissance des borures.



**Figure B.4** Influence des principaux éléments d'alliage sur l'épaisseur de la couche borurée [40].

### B.8. Influence des traitements thermiques sur les couches borurées

Des traitements thermiques sont souvent appliqués aux aciers, soit avant boruration pour améliorer la structure et faciliter le traitement, soit après boruration pour améliorer les propriétés du matériau de base [41].

#### B.8.1. Traitements thermiques avant boruration

Biruk et al. [42] ont étudié l'influence des traitements thermiques avant boruration sur les couches borurées. Les résultats obtenus montrent que tous les traitements thermiques qui conduisent à un grain austénitique fin permettent de réaliser une couche borurée plus épaisse. Ainsi, la couche borurée la plus épaisse est obtenue dans l'acier ayant subi un traitement de chauffage cyclique qui a produit la structure la plus fine.

Cette accélération de la formation des borures a été attribuée à l'action des joints de grains comme court-circuit de diffusion.

#### B.8.2. Traitements thermiques après boruration

Les traitements thermiques appliqués après boruration ont généralement pour but l'augmentation de la dureté du substrat (trempe et revenu) ou la transformation d'une couche biphasée en couche monophasée (recuit).

**a) - Trempe et revenu :** La température d'austénitisation doit être bien en dessous de la température eutectique Fe-Fe<sub>2</sub>B (1149 °C pour le système binaire Fe-B). C'est pour cette raison que la boruration des aciers rapides qui requièrent des températures d'austénitisation avant trempe très élevées n'est guère envisageable. Afin d'éviter la déboruration, il est recommandé de réaliser l'austénitisation et le revenu dans des bains de sels neutres, dans une atmosphère contrôlée ou sous vide. En raison de l'enrichissement en carbone de la zone située sous la couche borurée, il n'est nullement nécessaire de recourir à la trempe à l'eau pour transformer cette sous-couche en martensite dans les aciers au carbone.

**b) – Recuit :** La première tentative de transformer une couche borurée biphasée en une couche monophasée par l'action d'un recuit a été conduite par Ornig et Schaaber [43]. Une telle transformation peut s'avérer utile dans la boruration des aciers fortement alliés où il est difficile de produire des couches borurées monophasées épaisses.

La transformation d'une couche borurée biphasée en une couche monophasée entraîne une augmentation de la porosité [44] et s'accompagne d'un accroissement de volume [25, 43, 45, et 46].

### **B.9. Applications industrielles de la boruration**

Généralement, on utilise la boruration chaque fois que l'on doit faire face à des problèmes sévères d'usure, particulièrement d'usure abrasive, ou à des problèmes de corrosion dans des milieux acides ou basiques ou encore dans des métaux fondus.

Subrahmanyam et al. [47] ont montré que la boruration augmente considérablement la résistance à l'usure adhésive et abrasive des aciers mi-durs. De leur côté, Eyre et Morri [48] ont trouvé que les aciers au carbone et les fontes grises borurés résistent bien à l'usure adhésive. Dans une étude comparative entre la boruration et d'autres traitements thermo-chimiques de surface (nituration, vanadisation, carburation,...), Habig [49] a montré que la boruration confère aux aciers la meilleure résistance à l'usure adhésive pour des longues durées de traitement.

Pour ce qui est de la résistance aux milieux corrosifs, Bazille [50] a trouvé que la boruration confère aux aciers une bonne résistance à la plupart des acides y compris l'acide chlorhydrique. Tsipas et al. [51] ont montré que les aciers borurés résistent bien à l'acide naphthénique à haute température (650°C) sous des conditions oxydantes aussi bien

en phase liquide qu'en phase vapeur. Une bonne tenue dans les milieux basiques ayant un pH variant entre 12 et 14 (exemple : KOH dans l'industrie textile) a été reportée par Lisnikova et Freid [52]. Fichtl [53] juge que la boruration est devenue un traitement conventionnel de durcissement superficiel comme la nitruration et la carburation et qu'elle est appliquée régulièrement dans les industries textile, pétrolière et chimique (guide-fils, tuyaux, brûleurs, becs d'injection,). Brian Jones [54] a trouvé que la boruration des pièces de machines utilisées dans l'agriculture peut être très bénéfique à ce secteur, et montré que le traitement de boruration, comparé au chromage dur, est de loin meilleur.

La figure B.5 montre l'usure obtenue sur une pièce mécanique utilisée dans les machines agricoles en fonction du traitement de surface appliquée. Sur la figure, il est facile de constater que la pièce borurée est celle qui a subi le minimum de dégâts.



**Figure B.5** Usure enregistrée sur une pièce d'une machine agricole en 8630 Steel qui a subi différents traitements de surface. **a-** après traitement thermique. **b-** après boruration. **c-** après chromage dur.

Enfin, la boruration réduit considérablement l'attaque des aciers par le zinc fondu ; ainsi, en Grande Bretagne, des bacs de galvanisation des aciers fabriqués en titane ont été remplacés avec succès par des aciers mi-durs borurés. Le tableau B.7 regroupe quelques exemples d'utilisation des pièces borurées dans l'industrie.

Tableau B.7 : Quelques exemples d'utilisation industrielle des pièces borurées [4].

Branche de l'industrie	Applications
<b><u>Construction mécanique</u></b>	Mandrins, tambours, disques de freins, lamelles d'embrayage Buses à vapeur surchauffée Glissières, douilles de guidage, plaques-filières, plaques d'appui Pignons coniques, bagues de paliers Pistons de pompe Poulies conductrices Poinçons d'emboutissage, outils d'estampage, canons de perçage Moules Rouleaux marqueurs, rouleaux transporteurs Herses, socs de charrue
<b><u>Industrie automobile</u></b>	Engrenages, culbuteurs, soupapes
<b><u>Industrie du bâtiment</u></b>	Eléments de transport et d'utilisation du béton
<b><u>Industrie chimique</u></b>	Corps, moteurs et chemises de pompes Bacs destinés à contenir de la cryolite, du zinc ou de l'aluminium fondus
<b><u>Industries textile et plastique</u></b>	Buses, plaques de buses, guide-fils, tubes Molettes de coupe, vis de boudineuses, cylindres

## B.10. Données expérimentales

Les valeurs des épaisseurs des couches borurées utilisées pour la validation des modèles proposés dans cette étude ont été prises d'un travail expérimental antérieur réalisé sur la boruration d'un acier au carbone C35 dans des sels fondus à des températures comprises entre 800 et 1050 °C pour des durées de maintien allant de 2 à 6 heures. Pour plus d'informations, nous avons jugé d'une grande utilité de présenter la procédure expérimentale utilisée pour réaliser les couches de borures sur l'acier C35 et les épaisseurs obtenues en fonction de la température et la durée de maintien à cette température.

### B.10.1. Traitements de boruration

Les traitements de boruration ont été effectués dans un milieu liquide (bains de sels fondus) constitué de Borax (Tetraborate de sodium  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ ) additionné d'un agent réducteur. Trois différents agents réducteurs ont été utilisés pour réduire le

Borax fondu et produire le bore atomique qui diffuse à travers la surface de l'acier et forme avec le substrat les couches borurées.

Les trois agents réducteurs utilisés et la composition chimique du bain de sel fondu correspondant sont groupés dans le Tableau **B8**.

**Tableau B8** : Agents réducteurs et Composition chimique des bains utilisés pour la boruration de l'acier C35.

<b>Agent Réducteur</b>	<b>Composition Chimique du Bain de Boruration</b>
Carbure de Bore	70 % $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ + 30 % $\text{B}_4\text{C}$
Aluminium	70 % $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ + 30 % Al
Carbure de Silicium	70 % $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ + 30 % SiC

Le borax utilisé dans la préparation des bains de sels est obtenu par déshydratation à 800° C de tetraborate de sodium hydraté ( $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ ). Les mélanges Borax-carbure de bore (Borax- $\text{B}_4\text{C}$ ) et Borax-carbure de silicium (Borax-SiC) sont réalisés à froid. Par contre, le mélange Borax-Aluminium (Borax-Al) n'est réalisé qu'une fois le borax est complètement fondu, et cela afin d'éviter toute réaction perturbatrice de l'aluminium avec l'atmosphère durant la mise à température du bain.

La boruration effectuée dans les bains Borax-Aluminium (Borax-Al) donne naissance à des produits de réaction qui réduisent progressivement le volume utile du creuset, ce qui a poussé à changer de creuset après chaque opération de boruration.

Des essais préliminaires ont permis de déterminer les températures de boruration minimales praticables avec chaque bain. Au-dessous de cette température, la viscosité initiale du bain est telle que ce dernier n'est plus maniable. Le tableau **B9** rassemble les températures minimales praticables en fonction du bain de boruration.

**Tableau B9** : Températures minimales praticables de boruration en fonction du bain de boruration.

Bain de boruration	Température minimale praticable de boruration (°C)
70 % Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> + 30 % B <sub>4</sub> C	800
70 % Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> + 30 % Al	850
70 % Na <sub>2</sub> B <sub>4</sub> O <sub>7</sub> + 30 % SiC	900

La température de boruration utilisée a été limitée à un maximum de 1050 °C afin de demeurer bien en dessous de la température eutectique Fe<sub>2</sub>B-Fe (T = 1149 °C - Figure B1).

### B.10.2. Mesure de l'épaisseur des couches borurées

La méthode d'estimation de l'épaisseur des couches borurées consiste à mesurer sur un microscope optique les longueurs des cinq aiguilles les plus profondes et celles des cinq aiguilles les moins profondes et de prendre la longueur moyenne de ces dix aiguilles comme étant la valeur de l'épaisseur de la couche borurée à l'endroit sélectionné. Ces mesures sont répétées à trois, quatre ou cinq endroits différents, la valeur moyenne de ces mesures étant prise comme l'épaisseur moyenne de la couche borurée.

Les valeurs des mesures des épaisseurs des couches borurées obtenues en fonction des bains de sels de boruration, la température du traitement et la durée de maintien à cette température sont données dans le Tableau B10.

**Tableau B10** : Epaisseurs des couches borurées en fonction du bain de boruration, du temps et de la température.

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 800</b>						
2	22	23	21	16	20	25
	26	28	29	35	30	
4	36	42	45	48	37	50
	68	57	55	59	53	
6	70	62	57	69	71	75
	87	85	81	89	79	

<b>Borax-Al : 800</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-SiC : 800</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 850</b>						
2	32	36	34	42	31	45
	55	52	60	51	57	
4	60	52	56	63	52	70
	88	85	92	77	75	
6	80	78	85	75	91	95
	113	125	105	100	98	

<b>Borax-Al : 850</b>						
2	22	23	18	15	20	25
	29	28	31	34	30	
4	37	47	44	48	39	55
	76	60	72	62	65	
6	68	55	52	72	62	80
	96	92	98	105	100	

<b>Borax-SiC : 850</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 900</b>						
2	65	48	55	62	53	70
	90	86	87	78	76	
4	96	102	85	100	99	110
	129	137	125	110	117	
6	126	135	105	100	132	145
	185	175	155	172	165	

<b>Borax-Al : 900</b>						
2	28	36	34	40	33	45
	62	55	52	53	57	
4	70	65	60	66	62	85
	110	105	97	100	115	
6	90	84	92	95	88	110
	130	136	128	125	132	

<b>Borax-SiC : 900</b>						
2	5	7	8	10	8	15
	25	22	27	18	20	
4	20	18	22	25	30	35
	50	45	42	46	52	
6	30	35	38	42	40	50
	70	65	62	60	58	

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 950</b>						
2	90	82	78	95	92	105
	130	110	120	125	128	
4	120	142	135	118	145	170
	210	200	205	212	213	
6	168	155	150	175	172	200
	220	225	248	242	245	

<b>Borax-Al : 950</b>						
2	55	45	54	52	50	65
	88	80	81	75	70	
4	97	102	88	100	95	120
	140	144	134	148	152	
6	137	135	120	130	140	170
	208	205	215	195	215	

<b>Borax-SiC : 950</b>						
2	18	21	22	20	23	30
	40	42	39	38	37	
4	55	50	54	48	55	65
	85	75	80	70	78	
6	80	75	82	85	78	100
	125	12	12	11	11	
	5	0	2	5	8	

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 1000</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-Al : 1000</b>						
2	88	82	90	76	92	100
	120	125	115	112	100	
4	135	140	148	130	150	180
	222	215	205	225	230	
6	187	178	165	195	190	245
	290	300	315	305	325	

<b>Borax-SiC : 1000</b>						
2	33	30	32	30	28	45
	60	65	62	58	52	
4	80	78	82	75	85	105
	136	134	132	120	128	
6	118	125	120	125	124	160
	198	200	205	195	190	

<b>Borax-B<sub>4</sub>C : 1050</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-Al : 1050</b>						
2						
4						
6						

<b>Borax-SiC : 1050</b>						
2	58	62	60	56	57	80
	112	110	95	100	90	
4	112	120	128	135	125	160
	205	200	188	202	185	
6	175	172	180	185	192	245
	292	302	312	310	330	

**B.11. Références bibliographiques Partie A**

- [1] Vermesan G., Jacquot P., Vermesan E., *La Boruration*, Traitement thermique, 1995, Vol. 284-95, 39-44.
- [2] Busby P. E., Warga M. E., Wells C., *Diffusion and solubility of boron in iron and steel*, Journal of Metals, 1953, 1463-1468.
- [3] McBride C. C., Spretnak J. W., Rudolph S., *A study of the Fe-Fe<sub>2</sub>B system*, Transactions of the ASM, 1987, Vol. 46, 499-524.
- [4] Allaoui O., *Boruration sans électrolyse des aciers dans des sels fondus et caractérisation des couches borurées obtenues*, Mémoire de Magister, 1995, ENP d'Alger.
- [5] Kunst H., Schaaber O., *Observations on surface boronization of steel*, Harterei-Technische Mittenlungen, 1967, Vol. 22, 275-292.
- [6] Thénevot F., Goeuriot P., Couturier J.-M, Levêque R., *Amélioration des propriétés des résistance à l'usure d'aciers inoxydables par boruration directe ou séquentielle*, Traitements et revêtements des métaux, A. Niku-Lari, Hermes, Paris, pp 50-62.
- [7] Bazille P., *La Boruration*, Revue de Mécanique, Matériaux et Electricité, 1977, Vol. 336, 26-32.
- [8] Casadesus P., Frantz C., Gantois M., *Boriding with a thermally instable gas diborane*, Metallurgical transactions A, 1979,
- [9] Casadesus P., Frantz C., Gantois M., *Etude structurale des couches borurées élaborées par bombardement ionique sur le fer et les aciers au carbone*, Mémoires Scientifiques de la Revue de Métallurgie, 1979, 9-21.
- [10] Pchelkina M. A., Lakhtin Yu. M., *Boronizing in a boron trichloride atmosphere*, Metal Science and Heat Treatment of metals, 1960, Vol. 2, 397-398.
- [11] Zhigach A. F., Antonov I. S., Pchelkina M. A., Yukin G. I., Dobrodeev A. S., Mataeev V. N., *Surface impregnation of steel with boron from the gas phase*, Metal Science and Heat treatment of Metals, 1959, vol. 1, 51-56.
- [12] Ornig H., Schaaber O., *Observation of surface boriding of steel*, Harterei-Technische Mittenlungen, 1962, 17, (3), 131-140.
- [13] Nogtev N. N., Ragozin Yu. N., *Electrolytic boriding in boric anhydride*, Metal Science and Heat Treatment of metals, 1962, 4, 523
- [14] Lyakhovich L.S., *Traitement thermochimique des métaux et alliages, Aide mémoire*, Ed. Metallurgia, 1981, 80-110 (en russe).

- [15] **Sinha A. K.**, *Boriding*, Surface hardening of steel, Metals Handbook vol. 5, 10<sup>th</sup> edition, 1990, Surface Cleaning, Finishing and coating, 437-447.
- [16] **Matuschka A. G. V.**, *Boronizing*, Hayden and Son Inc., Philadelphia, 1980, ISBN 85501 640X.
- [17] **Fichtl W., Trausner N., Graf Von Matuschka A.**, *Boronizing with Ekabor*, 1988, Documentation E.S.K.
- [18] **Kunst H., Schaaber O.**, *Beobachtungen beim Oberflächenborieren von Stahl III-Borierverfahren*, Harterei-Technische Mitteilungen, 1967, Vol. 22, 1-25.
- [19] **Carbucicchio M., Mazza G., Sambogna G.**, *Some effects of thermo chemical on iron boriding*, 3<sup>rd</sup> International Conference on Heat Treatment of Materials, Shanghai, 1983, 9.79.
- [20] **Goeriot P., Thévenot F.**, *Boruration des aciers et cermets : le traitement "BORUDIF "*, Matériaux et Techniques, 1985, Vol. (5-6), 217-221.
- [21] **Tsipas D. N., Rus J.**, *Boronizing of alloy steels*, Journal of Materials Science Letters, 1987, Vol. 6, 118-120.
- [22] **Casadesus P.**, *Mise au point d'un traitement de boruration des aciers par bombardement ionique avec le diborane*, Thèse, 1977, Université de Nancy, France.
- [23] **Palombarini M G., Carbucicchio M.**, *Growth of boride coatings on iron*, Journal of Materials Science Letters, 1987, Vol. 6, 415-416.
- [24] **Guiraldenq P.**, *Diffusion dans les métaux*, Techniques de l'Ingénieur **MII** : Etudes des alliages, 1978, 55, 1, 31-33.
- [25] **Matuschka A. G. V.**, *Boronizing*, Hayden and Son Inc., Philadelphia, 1980, ISBN 85501 640X.
- [26] **Dukarevich I.S., Mozharov M.V.**, *A radioactive isotope study of carbon redistribution in the borided layer*, Protective Coatings on Metals, 1972, 4 , 3 1-33.
- [27] **Dukarevich I.S., Mozharov M.V., And Shigarev A.S.**, *Redistribution of elements in boride coatings*, Metal Science and Heat Treatment, 1973, 15, 160-162.
- [28] **Casadesus P.**, *Mise au point d'un traitement de boruration des aciers par bombardement ionique avec le diborane*, 1977, Thèse, Université de Nancy, France.
- [29] **Badini C., Gianogli C., Pradelli G.**, *The effect of carbon, chromium and nickel on the hardness of borided layers*, Surface and Coatings Technology, 1987, 30 , 157-170.
- [30] **Chatterjee-Fischer R.**, *Technologie des couches borurées a multiples composants à propriétés spéciales*, Traitement Thermique 1982, 169 , **41-47**.

- [31] **Chatterjee-Fischer R.**, *Time to take a look at multicomponent boriding*, Metal Progress, 1986, April, 24-37,.
- [32] **Galibois A., Boutenko O., Voyzelle B.**, *Mécanisme de formation des couches borurées sur les aciers à haut carbone: I - Technique des pates*, Acta Metallurgica, 1980, Vol. 28, 1753-1763.
- [33] **Galibois A., Boutenko O., Voyzelle B.**, *Mécanisme de formation des couches borurées sur les aciers à haut carbone: II - Technique des poudres*, Acta Metallurgica , 1980, Vol. 28 , 1765-1771.
- [34] **Dukarevich I.S., Balter M.A.**, *The effect of silicon on the microstructure and phase composition of the borided layer*, Protective Coatings on Metals, 1969, Vol. 1, 30-34.
- [35] **Degussa, 1982**, *Boriding with durferrit products*, Documentation Degussa.
- [36] **Palombarini G., Carbuicchio M., Cento L.**, *Electron probe microanalysis of Nickel and Chromium in Fe-C-Ni and Fe-C-Cr alloys borided at 850 °C*, Journal of Materials Science, 1984, Vol. 19 , 3732-3738.
- [37] **Palombarini G., Sambogna G., Carbuicchio M.**, *Iron-Boron reactivity in powder boriding, Depending on the medium and the base alloy composition, 5<sup>th</sup> International Conference on Heat Treatment of Materials*, 1986, Budapest, 1470-1477.
- [38] **Carbuicchio M., Palombarini G.**, *Iron - Boron reaction products depending on the base alloy composition*, Journal of Materials Science Letters, 1984, Vol. 3 , 1046-1048.
- [39] **Carbuicchio M., Palombarini G., Sambogna G.**, *Composition and structure of boride layers grown on low-manganese ternary iron alloys*, Journal of Materials Science, 1984, Vol. 19 , 4035-4039.
- [40] **Samsonov G. V., Epik A. P.**, *Boride coatings*, Coatings of high-temperature materials, Plenum press, New York, 1966, 7-111.
- [41] **Habig K.-H., Kunst H.**, *Modellverschleißuntersuchungen an boriertem und anders warmbehandeltem stahl C 45*, Harterei-Technische Mittellungen, 1975, Vol. 30, 99-107.
- [42] **Biruk N. G., Kostenko A. A., Trakshinskii R. B., Demchenko I. L., Oleinik N. L., Guzova I. I.**, *Effect of preliminary heat treatment on the formation of a boronized layer on steel 34*, Metal Science and Heat Treatment, 1990, Vol. 32, 922-924.
- [43] **Ornig H., Schaaber O.**, *Observation of surface boriding of steel*, Harzerei-Technische Mittellungen, 1962, Vol. 17, (3), 131-140.
- [44] **Fiedler H. C. and Hayes E. J.**, *The formation of a soft layer in borided hot work die steels*, Metallurgical Transactions A, 1970, Vol. 1, 1071-1073.
- [45] **Biddulph . R. H.**, *Boronizing*, Heat Treatment of Metals, 1974, Vol. 3, 95-97.

- [46] **Segers L., Fontana A., Winand R.,** *Electrochemical boriding of iron in molten salts*, Electrochemica Acta, 1991, Vol. 1, 41-47.
- [47] **Subrahmanyam J., Gopinath K.,** *Wear Studies on boronized mild steel*, Wear, 1984,95 , 287-292.
- [48] **Eyre T.S. et Morri J.,** *The metallurgy and wear characteristics of boride coatings*, Heat Treatment of Metals, 1978, Vol. 4 , 103-105.
- [49] **Habig K.-H.,** *Wear protection of steels by boriding, vanadizing, nitriding, carburising, and hardening*, 1980, Materials in Engineering, 2, (December),
- [50] **Bazille P.,** *La Boruration, dans les traitements thermiques superficiels de diffusion, influence sur les propriétés mécaniques*, 12 et 13 Juin 1975, Journées de Printemps du GAMI, Lyon, France.
- [51] **Tsipas D. N., Noguera H., Rus J.,** *Corrosion behavior of boronized low carbon steel*, Materials Chemistry and Physics, 1987,18 , 295-303.
- [52] **Lesnikova K. P., Freid M. Kh.,** *The effect of boriding on corrosion resistance of carbon steels*, Zashch. Met., 1980,16, 163-164 (en russe).
- [53] **Fichtl W.,** *Boronizing and its practical applications*, Revue Internationale des Hautes Températures et Réfractaires, 1980,17 , 33-34.
- [54] **Brian Jones,** Boron hardening makes combine parts last longer FARMING, November-December 2000.

### C. Etude Bibliographique sur la modélisation et simulation en SDM

Avec le développement d'ordinateurs de plus en plus rapides, peu coûteux et la disponibilité de logiciels pour plusieurs applications, la modélisation informatique et la simulation des matériaux a cessé d'être entièrement dans les mains de spécialistes pour être accessible à ceux qui utilisent la modélisation non comme activité principale, mais comme outil auxiliaire à leur intérêt principal. Avec ce changement dans l'accessibilité à la modélisation et simulation des matériaux de nouvelles possibilités intéressantes sont apparues pour avancer significativement le développement et le raffinement des matériaux et de leurs traitements. Dans ce qui suit une présentation des principales caractéristiques et possibilités de la modélisation en science des matériaux et leur ingénierie suivie d'une discussion sur leur utilisation dans une perspective de découverte, développement et application de matériaux [1].

#### C.1. Modélisation et Simulation

Il est approprié, avant de commencer la discussion sur la modélisation et simulation des matériaux, de considérer ces termes plus attentivement. Qu'entend-on par un modèle ou une simulation ? Comment sont-ils différents. Sans être trop pédant, la définition de ces termes rend plus facile la discussion si on est plus précis. Un modèle est une idéalisation d'un comportement réel, c.à.d. une description approximative basée sur une sorte de raisonnement empirique et/ou physique. Un modèle naît souvent comme un ensemble de concepts, puis est généralement transcrit en une forme mathématique à partir de laquelle on peut calculer une quantité ou déterminer un comportement. La distinction entre la théorie et le modèle est que, dans la création du modèle, la tentative est de créer une idéalisation d'un comportement réel avec une certaine précision, non une description fondamentale qui est strictement vraie. La simulation est l'étude de la réponse d'un système modélisé à des contraintes ou forces extérieures. Les simulations sont effectuées en soumettant le modèle à des entrées et contraintes qui simulent des événements réels. Un élément clé à retenir à propos des simulations est qu'elles sont basées sur les modèles. Ainsi, la simulation ne représente pas la réalité, elle est plutôt un modèle de la réalité. La précision de la simulation relative au système réel qu'elle essaye d'imiter dépend de plusieurs facteurs, certains impliquant la méthode de simulation elle-même, par exemple la précision dans la résolution numérique d'un système d'équations. Cependant, et souvent, les plus larges erreurs dans la simulation, au moins par rapport à la façon dont

elle décrit convenablement le système réel, sont les insuffisances des modèles sur lequel la simulation est basée. Ainsi, on ne peut séparer la simulation des modèles sous-jacents.

### **C.2. Ce que l'on entend par modélisation en Science des Matériaux et ingénierie MSDM**

Dans les termes les plus généraux la modélisation en Science des Matériaux et ingénierie « Computational Materials Science and Engineering (CMSE) » est l'utilisation informatisée de la modélisation et simulation pour la compréhension et la prédiction du comportement des matériaux. En pratique, on fait généralement la distinction entre modélisation en SDM « Computational Materials Science », dont les objectifs sont une meilleur compréhension et prédiction du comportement des matériaux, et Ingénierie des matériaux par modélisation qui est axée aux applications, généralement avec un accent sur le produit. On note que cette distinction est arbitraire et pas bien définie, étant donné que les méthodes de base sont généralement les mêmes et que ce sont leurs applications qui diffèrent dans leurs objectifs. On peut utiliser la MSDM pour de nombreux usages. On peut, par exemple, prendre un modèle qui incorpore d'une certaine manière le comportement physique essentiel d'un système et interroger ce modèle sur la phénoménologie d'un processus ou d'une propriété. Le but de tels calculs est généralement l'obtention d'une compréhension et non la description d'un comportement d'une manière précise. Par exemple un modéleur peut éliminer tous les processus physiques à l'exception de celui d'intérêt, effectuant ainsi une « expérience propre » qui met en lumière le rôle d'un processus spécifique sur le comportement. On peut aussi, développer des modèles et méthodes plus détaillées pour la prédiction de propriétés ou comportement pour un matériau spécifique, par exemple la prédiction du comportement thermodynamique ou des propriétés mécaniques d'un nouvel alliage. Les modèles sur lesquels ces calculs sont basés peuvent être compliqués ou simples, dépendant de l'objectif de l'étude et de la précision désirée. Les deux types de modélisation de matériaux sont courants. La MSDM est plus puissante quand elle a un lien fort avec l'expérience. Dans sa forme la plus simple, les données expérimentales peuvent servir de validation pour l'exactitude des modèles et des calculs qui y sont basés. Toutefois, utilisées ensemble, la MSDM fournit une compréhension plus profonde du matériau que ce qui est possible par l'expérience seule en scrutant des phénomènes que l'expérience ne peut voir. La modélisation peut aussi prédire des comportements, même sous des

conditions pour lesquels on n'a pas de données expérimentales ou comme écran pour systèmes avec plusieurs paramètres où effectuer toutes les expériences n'est pas faisable.

### **C.3. Echelles dans la structure du matériau et de son comportement**

La modélisation et simulation des matériaux est complexe, largement à cause de la large gamme des échelles de dimensions et de temps qui gouvernent le comportement du matériau. Les échelles de dimension qui gouvernent un phénomène peuvent varier du nanomètre de l'atome au mètre d'une structure d'ingénierie. Similairement, l'échelle de temps peut varier du femto seconde de la vibration atomique aux décennies de l'usage des matériaux en produits. A partir de ces échelles de processus physiques, il n'est pas surprenant qu'une seule technique ne peut fonctionner à toutes les échelles. Ainsi, plusieurs méthodes ont été développées, chacune se focalisant sur un ensemble spécifique de phénomènes physiques et appropriés pour une échelle de temps et de dimension bien définis. Sur la figure C.1, une vue schématique des échelles de temps et de dimension pour un type de comportement de matériau ; le comportement mécanique d'un matériau cristallin [1].

### **C.4. Comment développer des modèles**

La première, et la plus importante, étape dans le processus de modélisation des matériaux est la création d'un modèle qui décrit les propriétés et le comportement d'un matériau aux échelles de temps et de dimension d'intérêt. Dans ce qui suit les étapes de création de modèle sont détaillées. Souvent les modèles s'égarent pour cause que l'on n'a pas au départ une idée claire de ce que l'on veut modéliser. Ce type de faux pas peut survenir si l'on n'a pas une assez bonne compréhension du problème ou que l'on n'a pas assez bien réfléchi à ce que le modèle doit accomplir. Le problème étant bien défini, l'étape suivante est de spécifier quelles informations le modèle doit donner et quelles informations l'on a en main pour utiliser le modèle ; en d'autres termes les entrées et les sorties. Cette étape est critique, et qui est souvent pas bien considérée. Ignorant des informations qui peuvent être importantes peut aboutir à de modèles de mauvaises qualités ou trop complexes (ou les deux), créant des problèmes pour des simulations ultérieures.

L'étape suivante est l'identification des mécanismes physiques, qui est la partie la plus difficile dans l'effort de modélisation. On peut ne pas avoir une image complète de la phénoménologie du problème. C'est à cette étape que la modélisation à une échelle plus

petite souvent entre en jeu, aidant à identifier les processus physiques sous-jacents à une plus grande échelle. Un examen rigoureux des données expérimentales et tendances peut mener à l'élaboration d'une meilleure compréhension des mécanismes physiques. Tandis que l'identification du problème, des entrées et sorties, et les mécanismes qui définissent le cadre de travail réel du développement du modèle, il aussi essentiel de spécifier la qualité nécessaire du modèle. Les modèles ne doivent pas être plus complexes que nécessaire pour un problème spécifique. Tout ce qui est en plus est un gaspillage d'efforts. La recherche de perfection dans un modèle conduit généralement à une grande complexité, qui peut présenter des difficultés lorsque l'on veut interroger le modèle, c.-à-d., quand on calcule quelque chose basée sur le modèle. Après la création d'un modèle, le simple fait de faire une analyse dimensionnelle montre souvent ou le modèle peut être incorrect. L'analyse dimensionnelle est un moyen de vérifier les relations entre les quantités physiques en se basant sur leurs dimensions ; elle repose sur le fait que ne peuvent être comparées que des grandeurs ayant la même dimension ; en effet, il est possible de comparer deux longueurs entre elles, mais pas une longueur et une masse par exemple. Les modèles sont inutiles à moins que l'on puisse faire quelque chose avec eux, ce qui nécessite généralement une implémentation dans un code informatique de quelque sorte. Souvent cette étape a une influence majeure sur la forme du modèle ; s'il ne peut être implémenté ou nécessite un temps important pour son usage il est alors inutile. Il y'a donc souvent un équilibre à trouver entre la précision souhaitée d'un modèle et la capacité de l'utiliser pour des calculs. Après l'implémentation, l'étape suivante est le point réel en MDSM, à savoir calculer quelque chose avec le modèle, c.-à-d., s'interroger et voir comment le modèle répond. Ceci peut être une étape de validation, dans laquelle les prédictions du modèle sont comparées aux données expérimentales disponibles, ou à la théorie, etc. pour évaluer la qualité du modèle, la zone de sa validité, sa sensibilité aux paramètres, etc. On utilise souvent cette comparaison pour ajuster le modèle et le rendre plus précis et plus robuste. Il est fréquent de revenir à la construction du modèle à ce stade pour l'ajuster afin qu'il réponde mieux aux besoins des calculs. La raison du développement du modèle est bien sûr son utilisation pour calculer quelques propriétés de matériaux. Ces « quelques » propriétés dépendent du problème. On note que le composant critique à cette étape est la visualisation des résultats de façon à montrer ses caractéristiques principales. Enfin on n'oubliera pas de mentionner l'importance du processus de vérification et validation (V&V). La validation est une tentative d'évaluation de la qualité du modèle et de sa capacité à décrire certains comportements, tandis que la

vérification est le processus assurant que le code informatique calcule actuellement ce qui était prévu. Le but étant de modéliser la réponse du matériau. Pour assurer cela avec précision un bon modèle et une bonne implémentation en code informatique sont requis en même temps. Trop souvent, l'un ou les deux processus sont desservis, conduisant à de mauvaises simulations. En ingénierie des matériaux et pour la prise de décision basée sur la simulation de modèles, le processus de V&V s'avère vital.

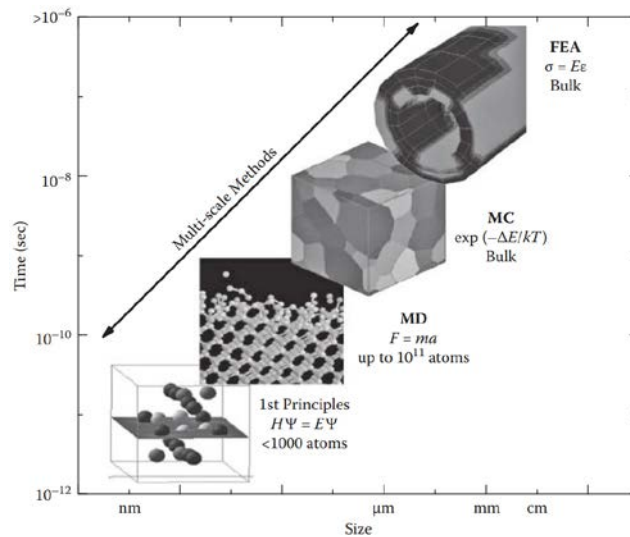


Figure C.1 Méthodes typiques de calcul scientifique des matériaux en termes de taille et de temps [1]

### C.5. Méthodes pour la Modélisation et simulation en Sciences de Matériaux

Dans cette section les méthodes utilisées pour la modélisation en science des matériaux sont brièvement décrites.

#### C.5.1 Méthode des différences finies

La simulation d'un procédé ou de phénomènes se déroulant à échelle microscopique fait en général appel à la mécanique des milieux continus. Une fois le problème posé en termes de physico-chimie ou de thermodynamique via le formalisme mathématique que sont les équations de conservation et les équations d'état appropriées, avec les conditions aux limites et les conditions initiales nécessaires. On est confronté finalement au problème de résolution d'équations aux dérivées partielles souvent non linéaires pour le domaine considéré. Pour des raisons de non linéarité ou de géométrie complexe du domaine une solution analytique n'existe pas dans la plupart des cas : on a alors recours à une méthode numérique de résolution. Parmi de nombreuses méthodes développées à ce jour, celle des différences finies, qui est la plus « légère » du point de vue formalisme

mathématique ainsi que de la mise en œuvre informatique dans le cadre d'un langage de programmation [1]. Son idée de base étant l'approximation de la dérivée partielle de l'équation différentielle à partir du développement en série de Taylor d'une fonction autour d'un point, ceci entraîne la transformation du problème continu initial d'équations aux dérivées partielles en un problème algébrique discret équivalent moyennant une erreur de discrétisation.

### C.5.2 Analyse par éléments finis

L'analyse par éléments finis implique la division du système en de nombreux petits éléments et le calcul de variables comme la contrainte, déformation, température et pression. Un ensemble d'équations algébriques, différentielles, et intégrales sont résolues par des techniques numériques sur ordinateur. Cette méthode fournit les solutions à une grande variété de problèmes complexes d'ingénierie incluant les propriétés des matériaux et phénomènes (déformation élastique et plastique, rupture, transfert de chaleur, etc.) à l'échelle des composants réels. [2]

### C.5.3 Méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo est une technique statistique qui implique l'utilisation de marcheurs discrets et aléatoires pour l'échantillonnage et du facteur de Boltzmann  $e^{\frac{-U}{k_b T}}$  pour la probabilité pour résoudre les problèmes en matériaux et dans de nombreux autres systèmes. Ici, U est l'énergie de l'état,  $k_b$  la constante de Boltzmann, T est la température. La méthode est conceptuellement simple et facile à implémenter, elle permet simplement aux atomes de faire des sauts aléatoires et sélectionne la plus faible énergie d'état. Elle peut équilibrer n'importe quel degré de liberté, et aucune dynamique n'est nécessaire car elle est basée sur la mécanique statistique. La méthode Metropolis MC simule normalement un ensemble thermodynamique et est utilisée pour la minimisation de l'énergie du système. La méthode cinétique de Monte Carlo KMC est généralement utilisée pour les processus activés comme la migration atomique. L'échelle d'utilisation de la méthode de Monte Carlo est en microns et donc peut traiter les microstructures des matériaux.

### C.5.4 Méthodes à champs de phase

L'approche à champs de phase a émergé comme une méthode de choix pour la simulation de l'évolution microstructurale durant la solidification. Aujourd'hui on peut élargir le champ d'application de la solidification à l'évolution microstructurale dans le traitement

des matériaux avec une large gamme de matériaux et de traitements, incluant l'évolution microstructurale durant la durée de vie et de service du matériau. La principale caractéristique des modèles à champs de phase est l'aspect diffus entre deux phases, qui est parfois appelée modèle à interface diffuse. Cette interface est décrite par une transition abrupte, mais continue, (dans l'espace réel  $x$ ) de la variable du champ de phase  $\phi(x,t)$  entre deux états. Cette vue d'interface diffuse remonte à van der Waals [8], qui analysa les forces entre les atomes et molécules. D'un point de vue thermodynamique il rationalisa qu'une interface diffuse entre des phases stables d'un matériau est plus naturelle qu'une interface discontinue avec une discontinuité en au moins une propriété du matériau. Une seconde caractéristique de la méthode à champs de phases est que les états hors équilibre sont traités de manière générale. Cette méthode fait la distinction entre les différents états du matériau qui peuvent être identiques dans toutes les autres variables d'état comme la température, concentration, pression etc... La variable des champs de phase étant donc une variable d'état indépendante.

Dans leur fameuse théorie de transition de phases Ginzburg and Landau [4] utilisèrent cette observation pour développer les fonctions thermodynamiques d'état, qu'ils ont nommées paramètres d'ordres « order parameter », et leur gradient. Hillert développa le premier modèle de décomposition spinodale, où le paramètre d'ordre fut utilisé comme une variable de champ (discrète) dans l'espace et le temps [5]. Cahn et Hilliard ont traité le même problème mais de façon continue et la concentration de l'alliage fut prise comme paramètre d'ordre [6,7]. Tous ces modèles considèrent l'aspect diffus de l'interface comme une propriété réelle de l'interface qui peut être prédite par la fonctionnelle thermodynamique.

### **C.5.5 Les méthodes du premier principe (méthodes ab initio)**

Les méthodes du premier principe considèrent le noyau et l'électron comme des particules de base et décrivent les événements dans un monde subatomique. Le système donc, peut-être exprimé seulement par la mécanique quantique qui implique des équations différentielles partielles relativement complexes. Ainsi, les calculs par le premier principe ne dépendent pas de paramètres externes excepté les nombres atomiques des atomes constitutifs à simuler. Dans les années 1930, seulement un simple atome comme l'hydrogène pouvait être calculé par les méthodes de mécanique quantique, mais de nos jours plusieurs milliers par l'avènement de la théorie de densité fonctionnelle (DFT). Ces

méthodes permettent de quantifier l'énergie totale et la densité d'électrons et tout ce qui est dérivable de ces quantités comme les propriétés (incluant l'élastique) structurales, propriétés vibrationnelles, magnétiques, polarisation électrique, masse effective et les propriétés électroniques peuvent être obtenues à partir de ces méthodes [9].

### C.5.6 Dynamique moléculaire DM

La dynamique moléculaire considère les atomes comme des particules de base et ne prend pas en compte les noyaux et électrons. Donc, le système peut être bien décrit classiquement par l'utilisation des équations de mouvement de Newton qui impliquent des équations différentielles relativement simples d'interaction atome-atome. Dans les années 60, seulement plusieurs centaines d'atomes pouvaient être simulés par la DM, mais le nombre d'atomes a augmenté à environ 100 milliards de nos jours. La difficulté est que l'on doit générer empiriquement le potentiel d'interaction atomique entre les atomes. Les noyaux et électrons sont exclus complètement de cette méthode. Pour cette même raison, les propriétés électroniques et magnétiques ne peuvent être obtenues. Une fois le potentiel connu et les positions et vitesses initiales données, l'évolution en temps des atomes peut être révélée d'une manière assez simple.

**C.5.7 Réseau de neurones Artificiels**

Le réseau de neurones artificiels (RNA) est appelé modèle connexionniste, réseau neuronal, processeur parallèle distribué (PPD). La motivation du RNA est de modéliser l'activité neurologique dans le système biologique humain. Toutefois, le RNA est une simplification grossière du système neurologique humain, car le système nerveux humain renferme des milliards de neurones de différents types dont la structure longueur et fonctionnalité dépend de leur emplacement dans le corps. Le RNA est composé de simples interconnexions d'éléments de calculs non linéaires appelés nœud ou neurones. Un neurone typiquement consiste en trois composants (i) un groupe de poids, (ii) une fonction de sommation, et (iii) une fonction d'activation non linéaire Figure C.2

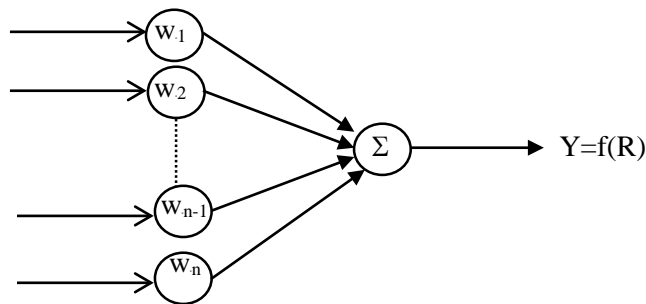


Figure C.2 Modèle de neurone

Un RNA peut contenir un nombre important de neurones. Ces neurones sont associés à des poids. Le comportement de calcul du modèle RNA est déterminé par les valeurs associées à chaque neurone. Pour calculer le comportement d'un RNA, on exécute d'habitude d'abord une phase d'apprentissage sur de données simples. Les données d'apprentissage sont normalement représentées sous la forme de matrices d'entrées, X, et les sorties correspondantes sous la forme de vecteur, Y. Le travail du RNA est d'apprendre la relation entrée-sortie intégrée dans  $X \Rightarrow Y$  à travers un processus d'apprentissage. Les opérations des unités de traitement consistent en un nombre d'étapes. Premièrement, chaque champ d'entrée est multiplié par un poids correspondant. Le produit de chaque entrée avec son poids correspondant est sommé pour produire une combinaison pondérée cumulée R, comme montré dans l'équation C.1

$$R = w_1x_1 + w_2x_2 \dots + w_nx_n = \sum_{i=1}^n w_i x_i \quad C.1$$

Afin d'ajuster le comportement des neurones une quantité  $\theta$ , appelée le biais, peut être utilisée comme seuil. Dans ce cas l'équation 5 prend la forme

$$R = w_1x_1 + w_2x_2 \dots + w_nx_n + \theta = \sum_{i=1}^n w_ix_i + \theta$$

Le résultat R, est en outre traité par fonction d'activation f (:) pour produire un signal de sortie y. On peut exprimer le résultat de y mathématiquement par

$$y = f\left(\sum_{i=1}^n w_ix_i + \theta\right) = f(R)$$

En fonction du comportement du système modélisé, la fonction f () peut prendre plusieurs formes ; linéaire, sigmoïde exponentielle (tableau C.1). Les fonctions sigmoïde, linéaire, et gaussienne sont populaires en ingénierie des matériaux ([11], [12], [13]).

**Tableau C.1** : Fonction d'activation pour réseau de neurone artificiel

Nom de fonction	Expression mathématique
Sigmoïde	$f(y) = \frac{1.0}{1.0 + e^y}$
Linéaire	$f(y) = ay + b$
Gaussienne	$f(y) = e^{-\ m+y\ ^2\alpha}$
Exponentielle	$f(y) = e^{(y+m)}$
Sigmoïde bipolaire	$f(y) = \frac{1.0 - e^y}{1.0 + e^y}$

Chaque nœud du RNA est responsable d'une petite partie de la tâche de traitement et peut effectuer cette tâche après une session d'apprentissage. La phase d'apprentissage implique la minimisation de la somme des erreurs élevées au carré entre les valeurs actuelles et celle prédites par le réseau. Le RNA capture le comportement des données d'apprentissage en ajustant continuellement et finalement en déterminant les poids connectant les neurones dans des couches adjacentes. L'algorithme d'apprentissage le plus communément utilisé est celui de la rétro propagation du gradient « back Propagation algorithm». Cet algorithme utilise la méthode du gradient conjugué dans son implémentation ([14]). Théoriquement, un nombre limité de point de données ne garantit pas que le RNA puisse généraliser un véritable comportement désiré. Afin de vérifier la généralisation des résultats une validation croisée ([15]) est utilisée. Le processus de validation croisée implique la fragmentation de données de départ en trois sous-ensembles : apprentissage, test, et validation. Le sous-ensemble d'apprentissage inclue toutes les données qui appartiennent au domaine du problème et est utilisé dans la phase d'apprentissage pour mettre à jour les poids du réseau. Le sous-ensemble de test est utilisé

dans la phase d'apprentissage pour vérifier la réponse du réseau pour les données non entraînées. Les données du sous-ensemble de test sont généralement distinctes de celles utilisées pour l'apprentissage. Selon la performance du RNA sur les données de test, l'architecture du réseau peut être modifiée et/ou plus de cycles d'apprentissage peuvent être ajoutés. La troisième partie des données est le sous-ensemble de vérification qui est généralement incluse des données distinctes des deux autres sous-ensembles. Ce sous-ensemble est utilisé après avoir sélectionné le meilleur réseau afin de confirmer sa justesse avant de l'utiliser sur un système réel. Il n'y a pas de règles pour déterminer la taille requise des différents sous-ensembles ; toutefois une règle générale est d'utiliser un ratio de 60 :20 :20 pour sectionner la base de donnée parent en trois sous-ensembles d'apprentissage, test et validation.

Le RNA avec une couche cachée s'est révélé être efficace pour la plupart des applications pratiques en ingénierie des matériaux. Plusieurs RNA et algorithmes ont été développés et documentés dans la littérature ([11], [16], [12]).

Trois de ces architectures utilisées en génie des matériaux incluent : (i) perceptron multicouche (MLP), (ii) réseau de fonction à base radiale (RBN), et le réseau de neurones récurrent (RNN). La structure et l'algorithme des architectures de ces RNA sont discutés brièvement dans les sections qui suivent.

### **C.5.7.1. Perceptron multicouche (MLP)**

Le perceptron multicouche « multi layer perceptron » (MLP) est peut-être le RNA le plus populaire en génie des matériaux. Ceci est probablement dû à sa simplicité et à la disponibilité des logiciels l'implémentant. Il a été décrit comme un approximateur universel ([17]) de par sa robustesse à approximer des données du monde réel. La structure d'un MLP typique est montrée en figure C.3. Le réseau MLP basique consiste en des neurones arrangés en couches. Les connexions sont établies entre deux couches successives seulement et à partir d'un neurone d'une couche précédente vers un neurone d'une couche qui la suit seulement. Les connexions sont associées à des poids et leurs opérations restent les mêmes comme discuté précédemment. La première couche est la couche d'entrée et établit le premier point de contact avec les données. La couche de sortie est la dernière couche dans le réseau et est responsable de la présentation du résultat du RNA au monde extérieur. Il y'a au moins une couche, appelée couche cachée, entre la couche d'entrée et celle de sortie. Dans une formation analogue à une chaîne, la sortie du

neurone dans la couche d'entrée alimente l'entrée du neurone de la couche cachée. La sortie de la dernière couche de neurones cachée alimente l'entrée de la couche de sortie. Les couches successives dans le réseau somment les entrées des couches précédentes, ajoutent le biais à la somme et appliquent la fonction d'activation pour produire leur propre sortie. La dernière couche dans l'architecture MLP possède souvent une fonction d'activation linéaire.

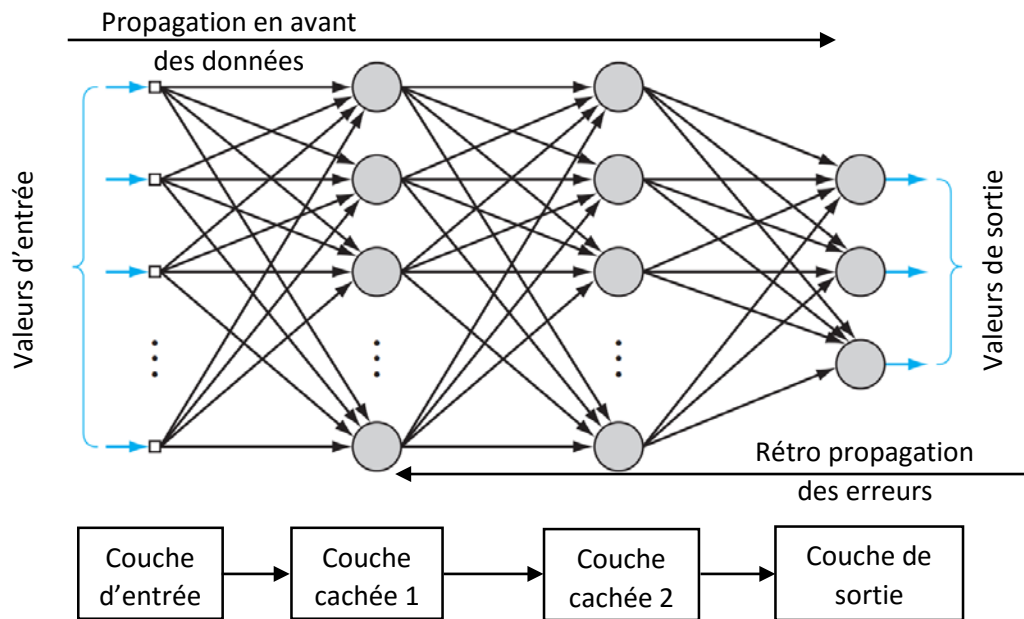


Figure C.3 Architecture perceptron multicouche

### C.5.7.2. Réseau de fonction à base radiale

Le réseau de fonction à base radiale « Radial Basis Function Network » (RBF) est un réseau à deux couches dans lequel la phase d'apprentissage est conduite en deux étapes ([18], [19], [20]). Dans la première étape, l'ensemble des données d'entrée  $X$  est utilisé pour déterminer les paramètres des fonctions de base, qui sont, les poids de la première couche. Comme seulement les données d'entrées sont utilisées, cet apprentissage est appelé non supervisé. Les poids de la première sont ensuite gardé fixe pendant que les poids de la seconde couche sont déterminés dans la seconde phase d'apprentissage. La deuxième étape est supervisée du moment que les entrées et sorties sont requises en même temps. Les paramètres d'apprentissage optimal sont atteints avec une approche classique de moindre carrés. La Figure C.4 montre une configuration d'un RBF type.

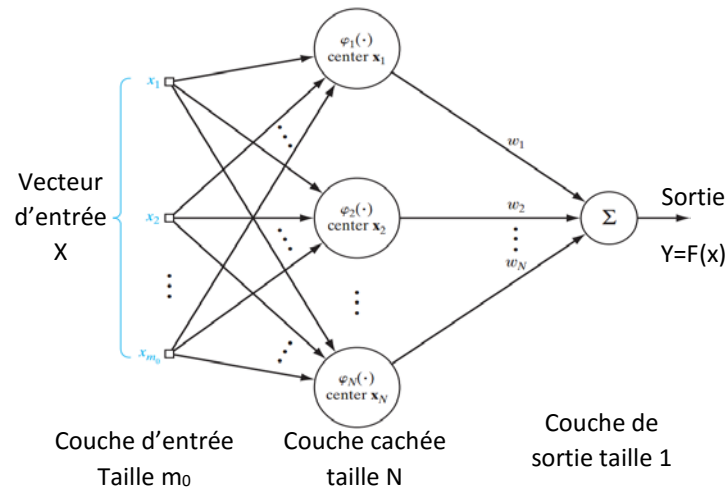


Figure C.4 Structure d'un réseau RBF type [1]

### C.5.7.3. Réseau de neurones récurrent

Le réseau de neurones récurrent « Recurrent Neural Networks » (RNN) n'est pas aussi populaire que le MLP et le RBF. Il a toutefois, été démontré que le RNN possède de puissantes capacités de calculs pour modéliser le comportement communément associé à la dynamique des matériaux. ([11], [21], [22], [23], [24], [25]). Plusieurs architectures RNN ont été proposées dans la littérature, mais trois d'entre elles sont le plus souvent utilisées en application d'ingénierie : RNN totalement connecté, Jordan, and Elman ([25], [16], [24]). L'aspect important des RNN est, contrairement au MLP et au RBF, il permet aux neurones des couches successives à être connectés aux couches précédentes. Le processus d'apprentissage comprend les neurones d'entrée, les neurones de traitement, propagation en avant et connections récurrentes. Quelques neurones de traitement sont assignés en tant que neurones de sortie. La sortie d'un neurone de traitement peut être connectée à tous les neurones de traitement du modèle. Par exemple, dans un réseau récurrent totalement connecté, chaque neurone de traitement est connecté à tous les neurones de traitement lui-même inclus. L'apprentissage et l'opération du RNN est dynamique dans la mesure où il dépend du pas de temps. La sortie d'un neurone de traitement à un pas de temps donné dépend du signal d'entrée, du signal propagé dans le pas précédent.

### C.5.7.4. Application de la technique des réseaux de neurones

L'application des RNA en génie des matériaux augmente en popularité [49], d'environ seulement 3 publications en 1995 à plus de 20 publications se rapportant à l'application des RNA en 2007. Dans la plupart des publications examinées [49], le processus de développement d'un modèle basé sur les RNA consiste aux étapes suivantes ([26], [27]) :

- Génération des données d'apprentissage
- Sélection du type de réseau
- Sélection des entrées et sorties du réseau
- Conception d'une configuration de réseau adéquat
- Sélection d'une stratégie d'apprentissage adaptée
- Apprentissage et validation du réseau résultant

Les RNA ont été appliqués aux domaines de la prédiction [62], modélisation, contrôle, identification, conception et optimisation en ingénierie des matériaux. Près de la moitié des applications passées en revue traitent de la prédiction des propriétés. Suivi de près, le tiers environ, concernant la modélisation des propriétés des matériaux. Le reste se répartissant de façon décroissante entre l'optimisation des propriétés (5%), la conception, identification de modèles et le contrôle des processus de matériaux. La plupart des publications utilisent les paramètres illustrés sur le tableau C.2 pour la description des modèles. La majorité des travaux passés en revue utilisent le logiciel Matlab pour l'implémentation de leurs modèles. Quelques travaux ([28], [29]) utilisent l'architecture du RNA avec plus de deux couches cachées. L'aspect pratique de ce type de modèle en génie des matériaux est difficile à justifier en terme économiques pour l'outil de calcul car il est bien connu qu'un RNA avec une seule couche cachée produit de très bons résultats. Dans la plupart des travaux passés en revue, les RNA ont toutefois montré une meilleure prédiction que la régression linéaire classique ([26], [30]). Une des raisons fréquemment citée pour justifier l'utilisation des RNA en génie des matériaux est sa capacité à reconnaître et à apprendre les relations non linéaires qui peuvent exister entre les entrées et sorties, sans nécessiter la construction d'un modèle mathématique explicite.

**Tableau C.2** : les plus importantes Variable de description du RNA

<b>Paramètre</b>	<b>Type de donnée</b>
Nombre de couches	Entier
Nombre de neurones de la couche d'entrée	Entier
Nombre de neurones dans chaque couche cachée	Entier
Nombre couches cachées	Entier
Nombre de neurones de la couche de sortie	Entier
Taux du moment	Réel
Taux d'apprentissage	Réel
Erreur après apprentissage	Réel
Cycles d'apprentissage ou époques	Réel

C'est pourquoi la technique des RNA est considérée comme libre de modèle « model-free » et utile pour la modélisation des relations entrées-sorties complexes. Aussi les RNA sont tolérants aux données contenant du bruit et des erreurs de mesures. Les RNA conventionnels ont de larges limitations qui doivent être pris en compte en l'appliquant à l'ingénierie des matériaux. Premièrement il y'a la nécessité de gérer un nombre important de paramètres utilisés pour contrôler les variables pour un modèle RNA. Ce processus n'est pas systématique mais intuitif. L'incapacité de gérer de façon appropriée les paramètres du modèle RNA explique la difficulté d'obtention des solutions stables et présente un danger de sur-apprentissage ou sur-ajustement résultant en une incapacité de généralisation. En outre, les RNA ne sont expressif dans la mesure où ils ne peuvent pas expliquer, d'une manière compréhensible, le processus sous-jacent de leurs résultats. Les RNA, donc, résultent en un modèle « boîte-noire » qui n'est pas très utile quand il est important de comprendre l'opération du système, comme dans la conception de matériaux destinés à un usage où la sécurité du système est critique.

### C.5.8 Logique Floue

Zadeh ([31], [32]) a jeté les bases pour les applications d'ingénierie de la logique floue (LF). La LF a été appliquée à divers domaines comme le contrôle des systèmes, reconnaissance de formes, prévision, fiabilité en ingénierie, traitement de signal, surveillance, et diagnostic médical ([33], [34], [35], [36], [37], [12]).

La logique floue, sur qui les modèles flous sont basées, est une généralisation de la logique binaire. Cependant, à la différence de la logique binaire, les valeurs de vérité dans l'intervalle (0 ; 1) sont assignées à des variables. L'appartenance d'un élément dans la théorie classique des ensembles est binaire, c'est qu'un élément doit appartenir à un ensemble S ou non. D'autre part, pour les ensembles flous une classe admet la possibilité d'appartenance partielle à elle-même. Par exemple si  $X = \{x\}$  désigne un espace d'objets, l'ensemble flou A sur X est un ensemble de couples  $A = \{x ; \mu_{A(x)}\}$ , où  $A(x)$  est le degré d'appartenance de x à A. Si la fonction  $\mu_{A(x)}$  renvoie la valeur 0:0 x ne fait pas du tout partie de A. Si la valeur retournée est 1:0 alors x est totalement membre de A. L'appartenance partielle d'un élément x à A est modélisée par des nombres compris entre 0 :0 et 1 :0. Plus  $\mu_{A(x)}$  est proche de 1 :0 plus x appartient à A. Par exemple, une valeur de 0.5 pour  $\mu_{A(x)}$  indique que x est membre de A à 50%.

Les ensembles flous, fournissent donc, un puissant paradigme de calcul pour étendre la capacité de la logique binaire dans un sens qui lui permet une meilleure représentation de la connaissance dans l'ingénierie des matériaux. Ceci est dû au fait que la logique floue facilite l'expression du continu par l'attribution d'un degré numérique à la fonction d'appartenance. L'attribut multi-valeur de la logique floue permet de définir des valeurs intermédiaires entre les points binaires conventionnels, tel que le degré de présence ou d'absence d'un matériau constituant dans un composite. Ceci facilite l'affectation intuitive des valeurs numériques pour l'obtention de solutions plus ou moins exactes même si des concepts vagues ou imprécis sont utilisés pour décrire les propriétés des matériaux.

Lors de la conception d'un outil de réparation de matériel informatique destiné à un usage spécifique, Le tableau C.3 dresse une partie des spécifications générées sur la base d'interaction avec des techniciens du domaine. Comme on peut le voir sur ce tableau, toutes les variables sont exprimées sans indication de valeur numérique spécifique, mais plutôt avec leurs degrés de force. Dans ([38]) la comparaison de propriétés de matériaux pour quelques fibres et matrices dans des structures aérospatiales sont décrites comme ayant une propriété de ratio résistance/poids et rigidité/poids élevé Tableau C.4 et C.5.

**Tableau C.3 Spécification de vis [49]**

Une vis d'assemblage des composants de matériel informatique, doit être faite d'acier à *haute* teneur en carbone, l'acier est utilisé à cause de son *haut* module d'élasticité ; le module mesure la résistance du matériau à la déformation élastique et à la flexion, Les matériaux de vis doivent également avoir une *haute* ténacité pour l'empêcher de se casser lorsqu'il est tordu. De plus, il doit avoir une *faible* tendance à la rouille dans un environnement humide....

**Tableau C.4** Comparaison des propriétés de matériaux pour différentes fibres [38]

	<b>E-glass</b>	<b>S-Glass</b>	<b>Carbon / graphite (H.M.)</b>	<b>Carbon / graphite (H.S.)</b>
résistance spécifique à la traction	Faible	Modéré	Modéré	Elevé
module d'élasticité spécifique	Faible	Faible	Très élevé	Elevé
résistance à la compression	-	Faible	Modéré	Elevé
résistance au cisaillement	-	bonne	Assez bon	Bonne
résistance aux chocs	juste	juste	pauvre	pauvre
Limite élastique	Modéré	Modéré	Faible	Modéré
Coût de la fibre	Très-faible	Très-faible	élevé	Modéré

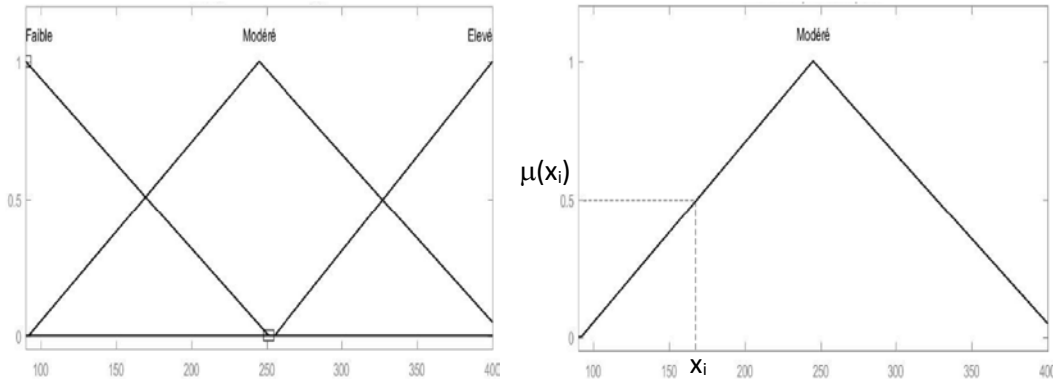
**Tableau C.5** Comparaison de de propriétés de matériaux pour différentes matrices [38]

	<b>Epoxy</b>	<b>Polyétheréthercétone</b>	<b>Polyamide</b>
Température de service	Faible	Modérée	Elevée
absorption d'eau	Juste	Excellente	-
Propriétés électriques	Excellentes	Bonne	Excellentes
Dilatation thermique	Excellentes	Excellentes	

La technique de logique floue facilite le développement d'une puissante méthode pour la modélisation de ce type de connaissance vague et imprécise. Les valeurs floues sont différentes de valeurs probabilistes. Par exemple si on dit qu'un matériau avec une contrainte de 210 :00 MPa a une valeur floue de  $\mu(x = 210: 00) = 0: 95$  n'entraîne pas que la contrainte a 95% d'être catégorisée comme élevée. Ce que cela implique c'est que sur une échelle de 0 :0 à 1 :0 une contrainte de 210 MPa est de 0 :95 compatible avec la description linguistique élevée. Ceci est similaire à la classification d'un étudiant qui obtient 95% à un examen comme parmi les meilleurs de sa classe. La valeur 0 :95 n'est, donc, pas l'expression de la probabilité de l'occurrence mais une valeur de confiance qui nous permet de représenter la compatibilité entre un label linguistique est une valeur numérique.

Pour développer un modèle basé sur la logique floue, il est nécessaire d'abord de concevoir les fonctions d'appartenance « membership functions » (MF). Les MF convertissent les entrées discrètes en termes linguistique. Les fonctions d'appartenances peuvent prendre différentes formes en fonction de la stratégie de conception du modèle et de la description du comportement du matériau. Des fonctions trapézoïdales, triangulaires, gaussiennes, et sigmoïdes sont les plus souvent utilisées en génie des matériaux. Dans quelques situations les fonctions d'appartenances sont déterminées automatiquement en utilisant une récapitulation de données ou des techniques d'optimisation [39]. Les variables linguistiques sont l'élément central de la notion de description en logique floue. Formellement, une variable linguistique, définie à travers un univers continu de discours «universe of discourse» (UoD), peut être caractérisé par cinq attributs et formellement définie par 5-tuples ;  $\langle x, T(x), U, G, M \rangle$  ; ou x est le nom de la variable,

$T(x)$  est l'ensemble des termes de x, qui est, l'ensemble des valeurs linguistiques de x avec chaque valeur étant un nombre flou sur U ; G est la règle syntaxique d'association des noms de valeurs de x, et M est la règle sémantique pour associer à chaque valeur sa signification.



(a) Illustration des fonctions d'appartenances d'appartenance

(b) Exemple de fonction d'appartenance

Figure C.5 Illustration des fonctions d'appartenances floues

Par exemple, si  $x$  est la résistance à la traction comme représentée sur le tableau C.5 alors le terme linguistique faible, modéré et élevé, forment l'ensemble des termes,  $T(x)$ . Par conséquent,  $T(x) = \{ \text{faible, modéré et élevé} \}$ . Si  $T(x)$  est caractérisé par un UoD floue avec des valeurs numériques dans la gamme  $U = [90.00 ; 400.00] \text{ g/mm}^2$  donc des fonctions d'appartenance peuvent être définis à travers l'UoD avec chaque variable linguistique occupant des proportions de l'UoD. Une fonction d'appartenance triangulaire définie à travers cet UoD est montrée sur la figure C.5(a). La résistance à la traction avec des valeurs de  $120.50 \text{ g/mm}^2$  est calculée comme  $\mu(120.5) = 0.5$  dans la classe modérée comme montré sur la figure C.5(b).

Les fonctions d'appartenances peuvent se chevaucher. Habituellement, l'UoD est normalisé dans l'intervalle  $[0;0; 1;0]$  pour des raisons de commodité et de facilité de dérivation des fonctions d'appartenance. Comme la propriété de résistance à la traction est un concept vague qui est difficile à représenter par une mesure numérique, spécialement pour de hautes températures ([40]), l'utilisation d'une telle description linguistique peut être très utile. Les fonctions d'appartenances les plus populairement utilisées en ingénierie des matériaux sont présentées sur le tableau C.6. Une description d'un modèle basé sur la LF est montrée sur la figure C.6. Le modèle comprend quatre principaux composants : un processus de fuzzification, base de connaissance floue, logique de prise de décision et unité de défuzzification.

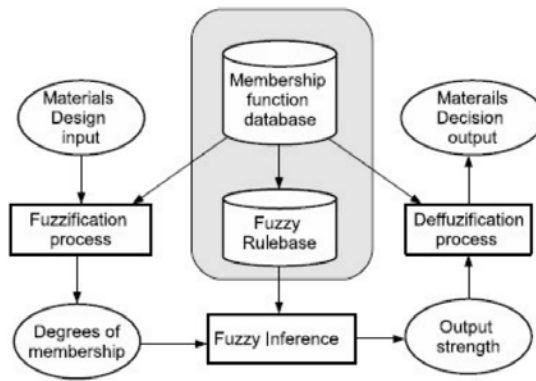


Figure C.6 Modèle logique floue [11]

Les données discrètes sous la forme de valeurs numériques sont souvent les entrées et sorties de systèmes basés sur la logique floue.

Tableau.C.6 Fonctions d'appartenance floue [11]

Nom de la Fonction	Expression mathématique
Triangulaire	$f(x, a, b, c) = \max \left\{ \min \left\{ \frac{x-a}{b-a}, \frac{c-x}{c-b}, 0.0 \right\} \right\}$
Trapézoïdale	$f(x, a, b, c, d) = \max \left\{ \min \left\{ \frac{x-a}{b-a}, 1.0, \frac{d-x}{d-c}, 0.0 \right\} \right\}$
Fonction cloche	$f(x, a, b, c) = \frac{1.0}{1.0 + \left  \frac{x-c}{a} \right ^{2b}}$
Gaussienne	$f(x, \alpha, c) = e^{-\frac{(x-c)^2}{2\alpha^2}}$
Sigmoïde	$f(x, a, b, c) = \frac{1.0}{1.0 + e^{-a(x-c)}}$

**C.5.8.1. Processus de fuzzification des entrées**

Le processus de fuzzification effectue une correspondance d'échelle qui transforme la gamme de valeurs d'entrée numériques ou précises en valeurs linguistiques en utilisant les fonctions d'appartenances. Les fonctions d'appartenance convertissent actuellement les valeurs numériques en valeurs convenables associées à quelques termes linguistiques. Le processus de fuzzification utilise des fonctions d'appartenance prédéfinies pour adapter l'entrée en terme linguistique. Spécifiquement, le processus de fuzzification permet une liaison de prendre place entre les termes linguistiques et les fonctions d'appartenances, les adaptant au calcul flou.

**C.5.8.2. Processus d'inférence**

Le processus d'inférence utilise une base de connaissance floue « fuzzy knowledge base » (FKB) pour calculer les sorties correspondantes aux entrées floues. Le FKB comprend une

base de connaissance pour le domaine d'application sous la forme de base de données de fonctions d'appartenance floues « fuzzy membership function » (FMF) et de règles linguistiques. La base des FMF fournit les définitions nécessaires qui doivent être utilisées par les règles linguistiques pour générer la décision. Les règles floues caractérisent les objectifs de la décision, souvent, spécifiées par un expert du domaine. Un ensemble de règles prédéfinies est appliqué à la sortie du processus de fuzzification. Ces règles sont sous la forme de déclaration « Si...Donc... ». Une règle contient une ou plusieurs conditions, appelées prémisses. La partie « Donc... » contient une ou plusieurs implication appelées conclusion. Le processus d'inférence évalue les règles en calculant le degré dans lequel chacune des règles doit être activée pour former la sortie. La partie « Donc... » d'une règle floue peut être une fonction mathématique qui calcule la valeur précise comme pour les modèles de Takagi et Sugeno, [34]. Le choix des variables d'état du processus, de la partition floue de l'espace des valeurs d'entrée et le choix des fonctions d'appartenance dans ce cas est effectué par une approche d'essais-erreurs. Le processus de prise de décision flou est effectué à l'aide de calculs sur les termes linguistiques. Chaque règle dans le FKB est considérée et sa sortie activée en concordance avec le degré de confiance dans sa prémisse. Pour inférer la sortie du système flou, la sortie la sortie de chaque règle est combinée dans un processus appelé agrégation.

### C.5.8.3. Processus de défuzzification

La sortie du processus d'inférence est dans une forme linguistique. Pour être utile, cette sortie doit être convertie en une forme précise ou non floue. Le processus de défuzzification calcule les sorties en mappant les forces des règles calculées par les règles prédéfinies ([41]) aux valeurs numériques réelles. Les formules de la moyenne des maxima « Mean of Maximum » (MOM) et du centre de gravité Center Of Gravity (COG) sont souvent utilisées dans le processus de défuzzification en ingénierie des matériaux. Pour illustrer le COG, en supposant un ensemble flou discret  $A_f = (\mu(x_1), \mu(x_2), \dots, \mu(x_n))$ , donné et que la fonction C.2 soit utilisée pour pondérer ses fonctions d'appartenance

$$K(\bar{x}) = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \mu(x_i) \quad C.2$$

Si on considère l'équation C.2 comme une fonction de cout, on peut donc la minimiser en annulant sa première dérivée comme suit :

$$\frac{dK(\bar{x})}{d\bar{x}} = 2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \mu(x_i) = 0.0 \quad C.3$$

On posant  $\bar{x}$ , inconnue de l'équation 9 on a :

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \mu(x_i)}{\mu(x_i)} \quad \text{C.4}$$

L'équation C.4 est la formule de défuzzification par la méthode du centre de gravité. Cette formule a été étendue pour obtenir méthode de défuzzification par fonction pondérée COG « weighting function COG » (WFCOG), qui peut représenter une attitude subjective de décision de conception. Une expansion de la méthode COG utilisant une méthode de défuzzification paramétrée avec une fonction pondérée du maximum d'entropie a été proposée par Liu [42].

#### **C.5.8.4. Application de la logique floue en ingénierie des matériaux**

L'application de la logique floue en ingénierie des matériaux est en augmentation mais pas aussi populaire que les RNA. Il y a 3 articles en 1995 qui augmentent à 9 publications en 2008 se rapportant aux applications de la logique floue. La logique floue a été appliquée dans les domaines de modélisation de propriétés des matériaux, sélection, prédiction, évaluation, conception, optimisation, contrôle, monitoring et identification de modèles. La majorité des publications suit la procédure décrite précédemment pour la génération des fonctions d'appartenance et la conception du module de défuzzification. La technique de logique floue est plus appliquée en modélisation des propriétés et sélection (21 %) des articles passés en revue. Suivi de près par la prédiction des propriétés de matériaux (13%) et l'application à l'optimisation des propriétés des matériaux (8%). Quelques publications se rapportent à l'évaluation des propriétés (2%).

L'utilisation de la logique floue, d'après la synthèse des publications, particulièrement en modélisation et prédiction des propriétés des matériaux, semble motivée par le fait qu'elle rend le processus de développement de matériaux plus expressif et sa solution plus facile à interpréter. La modélisation floue rend certains problèmes plus faciles à manipuler et donne souvent plus d'information que les RNA.

Dans quelque travaux, ([43], [44], [45]), le nombre des variables d'entrées est important, rendant difficile la justification de l'application du modèle de logique floue. La nature confusionnelle de l'interaction, quand leurs nombre est grand, rend difficile l'analyse l'effet de l'entrée sur la sortie obtenue par le modèle. Quand le nombre des entrées est important le plus judicieux serait de modulariser le modèle.

Mis à part des limitations mentionnées précédemment, la technique logique floue présente quelques limitations qui doivent être pris en compte pour l'application en génie des matériaux. Premièrement, le processus de génération des fonctions d'appartenance est dépendant du contexte et peut être influencé par plusieurs préférences de conception adoptées par l'ingénieur. Ceci n'est pas un assez bon processus car il est préférable pour des applications pratiques aux matériaux d'utiliser une technique systématique qui a une structure bien établie. Deuxièmement, la conception du processus de défuzzification dépend de l'expérience et est souvent par une approche essai-erreurs ([46], [47]).

Il est bien connu que le processus de défuzzification peut produire des résultats contre intuitifs même s'ils ont été soigneusement conçus [48].

Bien que la logique floue fournisse un outil effectif pour la représentation et la manipulation linguistique du savoir qui est transparent, une méthode efficace, définitive et systématique pour capturer ce savoir dans des systèmes pratiques est encore à développer. Ajoutons à cela, le nombre de règles de base peut rapidement croître et devenir complexe à manager si le nombre d'entrées ou d'ensembles flous définis pour les entrées est grand. Ces situations rendent difficile la garantie que certaines ingénieries fondamentales des propriétés de matériaux aient des performances consistantes. Pour cette fin, la technique de logique floue doit être utilisée en gardant à l'esprit qu'elle ne fournit seulement qu'un paradigme pour gérer une sorte de flou observé dans la cognition humaine.

Son application à l'ingénierie des matériaux doit, donc, ne pas être interprétée comme définitive en conception et absolue en pratique.

### **C.5.9 Algorithmes génétiques**

Le principe des algorithmes génétiques « Genetic Algorithms » (GA) et du cadre mathématique sous-jacent furent développés dans la fin des années 1960 [50], [51], [52]. GA est généralement discuté dans le contexte de l'algorithmique évolutionniste « Evolutionary Computing » (EC). Les méthodologies de base de l'EC sont les algorithmes génétiques GA, la programmation évolutionniste « Evolutionary Programming » (EP), Stratégies d'évolutions « Evolution Strategies » (ES) et la programmation génétique « Genetic Programming » (GP) [53]. Dans la GA, une tentative de modélisation du processus sous-jacent à la théorie de génétique de population en utilisant une recherche aléatoire. Le GA utilise le survivant de la première stratégie, ou les individus les plus forts ont le plus de chance de création de progéniture. Pour cela,

l'entrée courante (population) est utilisée pour créer une meilleure population sous des contraintes spécifiques. Les entrées sont normalement représentées en chaînes et modélisent le chromosome de la génétique humaine. En ingénierie des matériaux, par exemple, les entrées représenteront quelques propriétés d'intérêt du matériau.

Le succès des GA par l'application dans l'ingénierie des matériaux dépend du codage des variables qui décrivent les attributs du matériau sous la forme de chaînes. Le nombre et les types de variables à encoder dépendent de la résolution des données et de l'échelle du problème. Chaque variable d'entrée peut être vue comme un gène dans le chromosome qui représente l'espace des entrées.

Il semble plus intuitif de représenter des gènes comme des nombres réels ; cette représentation étant proche de l'utilisation d'une variable en ingénierie. Dans ce cas un chromosome serait un vecteur de nombres à virgule flottante et la longueur du chromosome serait la taille du vecteur solution du problème. Dans plusieurs applications de la GA incluant celles de l'ingénierie des matériaux, les valeurs d'entrées sont codées comme entier ou chaînes binaires. L'encodage de multiples variables continues à valeurs réelles consiste à convertir les nombres en entiers et à les concaténer. Les valeurs entières résultantes deviennent donc les variables d'entrée du processus de la GA. Après que le processus de la GA soit terminé les chaînes sont décodées en utilisant un processus complémentaire de conversion.

### **C.5.9.1. Applications des algorithmes génétiques en Ingénierie des matériaux**

L'application des algorithmes génétiques en ingénierie des matériaux est en croissance mais pas plus populaire que la logique floue. De 4 publications en 2004 à 20 en 2008 [49] la majorité des articles apparaissent en issue spéciale de « Computational Materials Science Journal ». Les techniques de GA ont été appliquées dans les domaines de modélisation des propriétés des matériaux, optimisation, identification prédiction et conception.

Des publications passées en revues [49], il ressort que les GA(s) se sont avérées efficaces dans l'optimisation des propriétés de matériaux et dans des domaines qui nécessitent l'apprentissage de paramètres comme fonction d'optimisation, traitement des matériaux, et identification de systèmes [50],[54], [55]. Puisque le processus de GA procède de plusieurs points, la méthode a une meilleure probabilité de localiser un minimum en

opposition des modèles RNA et FL qui procèdent d'un point à un autre. Aussi les GA travaillent un codage des variables de conception plutôt que les variables elles-mêmes, qui permet une extension de ces algorithmes à concevoir des espaces consistant en un mélange de variables continues, discrètes et entières [57]. L'application des GA en ingénierie des matériaux est en croissance bien que moins populaire que celles des RNA et FL. Deux raisons expliquent les limitations de l'application des GA en ingénierie des matériaux. La première est l'utilisation de l'aléatoire pour l'obtention de la solution optimale. D'un point de vue d'engineering, la notion de hasard est difficile à expliquer et à justifier dans des applications de vie réelle, particulièrement pour des systèmes à sécurité critique. La seconde limitation de rapporte à l'intuitivité de la théorie d'évolution dans la résolution du problème. Les RNA et FL paraissent intuitives comme modèle pour l'apprentissage humain et comme connaissance linguistique utilisée pour la résolution de problèmes de la vie réelle. Comment la théorie de la génétique humaine affecte la résolution de problème humains n'est pas très claire.

### **C.5.10 Modèles Hybrides**

Les techniques de calcul informatisés, discuté plus haut, sont plutôt complémentaires que concurrentiels [59]. Ceci implique qu'un mode hybride employant une combinaison de réseaux de neurones artificiels, logique floue, et ou algorithme génétique peut produire de meilleurs résultats. Les nombreuses combinaisons de ces approches se sont avérées utiles dans le développement des systèmes robustes d'intelligence artificielle [59]. Par exemple, la technique basée sur la logique floue peut être combinée avec les réseaux de neurones pour former un modèle neuro-flou. Il y a au moins quatre modèles hybrides qui peuvent être créé à partir de ces systèmes de calcul informatisés.

1. Neuro-flou
2. Génétique-flou
3. Neuro-génétique
4. Neuro-flou-génétique

**Tableau C.7** Constituants des calculs informatisés

<b>Méthodologie</b>	<b>Force</b>
Réseau de neurones artificiels	Apprentissage et approximation
Systèmes Flous	Raisonnement approximatif
Les algorithmes évolutionnaires systématique	Recherche aléatoire/optimisation

**Tableau C.8** Comparaison de caractéristiques des méthodes de calculs informatisés

Méthodes	Capacité d'apprentissage	Capacité de représentation des connaissances	Fonctionnalité d'opération temps/réel	Capacité d'optimisation	Données requises	Expertise requise
RNA	TE	E	E	M	TE	TB
FL	M	TE	M	TE	M	TE
GA	M	M	E	TE	M	M
FL-RNA	M	E	M	B	M	TB
FL-GA	M	M	M	B	M	M
RNA-GA	M	M	E	M	M	TB
FL-RNA-GA	M	M	M	B	M	TB

TB = très bas ; B= bas ; M=Moyen ; E=Elevé ; TE=très Elevé

La force de chaque système de calcul est présentée sur le tableau C.7, le tableau C.8 résume une affectation subjective des capacités des systèmes hybrides. Ces systèmes sont résumés brièvement dans les sections suivantes.

**C.5.10.1. Modèle Neuro-floue (Neurofuzzy)**

Le modèle neuro-floue, qui implique l'intégration du RNA et les techniques FL est peut-être le plus populaire technique utilisée en ingénierie des matériaux. Les modèles neuro-floues sont capables des prendre l'avantage des capacités du mécanisme d'inférence floue de la logique floue et les capacités d'apprentissage des réseaux de neurones. La technique du RNA est usuellement utilisée comme algorithme d'apprentissage pour le processus de défuzzification dans les modèles basées sur la logique floue. Les modèles neuro-floues sont considérés comme des modèles boîte noire qui fournissent peu de visibilité aidant à comprendre le processus sous-jacent. La figure C.7 a) illustre une configuration simple de modèle neuro-floue.

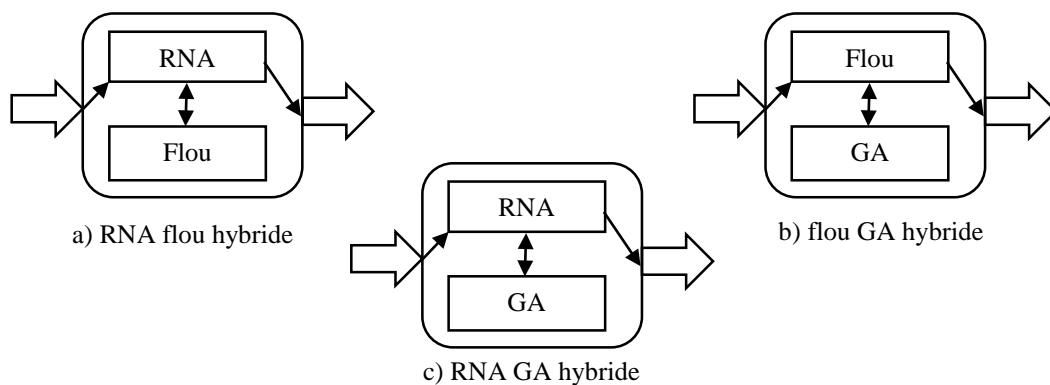


Figure C.7 Modèles hybrides de calculs informatisés

### C.5.10.2. Modèle Floue-Génétique

Quand la logique floue et les algorithmes génétiques sont combinés pour développer une solution, résulte un modèle floue-génétique. Le but ici est d'exploiter la capacité de la logique floue dans la description de la connaissance et la capacité d'optimisation de l'algorithme génétique. Habituellement, les processus de défuzzification dans les modèles basés sur la logique floue sont développés en utilisant une sélection optimale d'éléments d'un ensemble floue. A part les GA, les techniques utilisant les concepts d'interaction, variabilité, et techniques de vote sont aussi utilisées pour optimiser la défuzzification et le processus de génération d'appartenance. La figure C.7.b illustre une simple configuration d'algorithme de modèle flou-génétique.

### C.5.10.3. Modèle Neuro-génétique

Quand le RNA et la GA sont combinés pour développer une solution, le résultat donne un modèle neuro-génétique. Le but ici est de prendre l'avantage de la capacité d'apprentissage du RNA et de la capacité d'optimisation de l'algorithme génétique. La figure C.7.c) illustre une configuration simple de l'algorithme d'un modèle neuro-génétique. Pas d'application de modèle neuro-génétique n'a été recensée dans la littérature passée en revue.

### C.5.10.4. Modèle Neuro-floue-génétique

Quand les trois techniques susmentionnées sont combinées pour développer une solution, cela résulte en un modèle neuro-floue-génétique. Habituellement, l'approche GA est utilisée pour optimiser la performance d'un système neuro-floue. Le développement de cette approche est habituellement guidé par une approche heuristique, basée sur l'expérience d'expert en ingénierie des matériaux. Dans Huang [60] l'architecture présentée en figure C.8 est proposée pour le développement d'un modèle neuro-floue-génétique pour prédire la perméabilité des réservoirs de pétrole. Les vecteurs  $X_c$  et la matrice  $Z_c$  sont le modèle de formation et  $Y_c$  la sortie cible. Les heuristiques suivantes sont proposées pour sa réalisation :

- Sélection d'un ensemble de données bien approprié
- Génération de règles floues par réseaux de neurones
- Génération de l'hyper-surface des fonctions d'appartenance par algorithme génétique
- Optimisation des opérateurs de défuzzification par algorithmes génétiques

- Interpolation des règles floues pour fournir des estimations

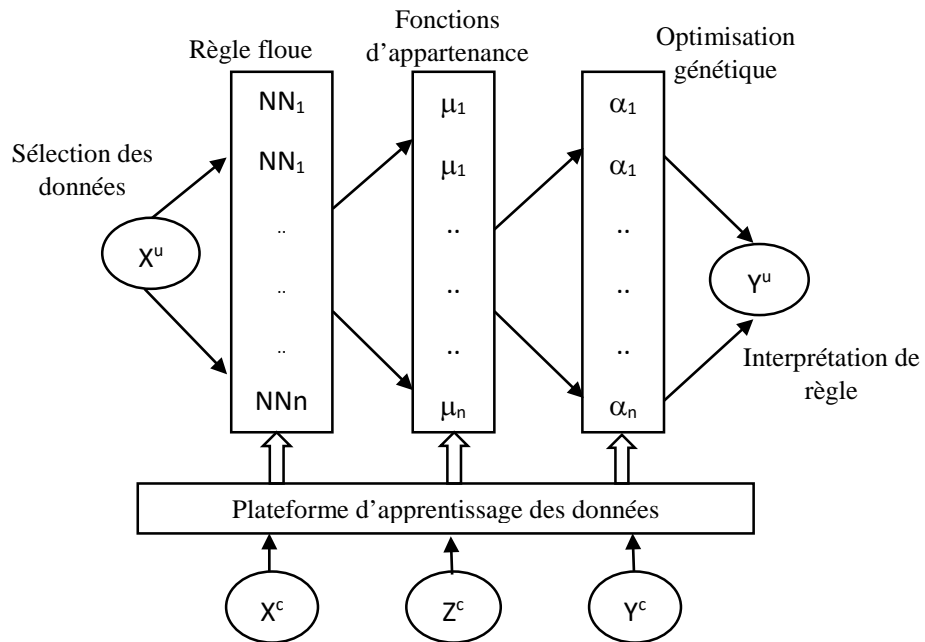


Figure C.8 Modèle neuro-flou-génétique

#### C.5.10.5. Applications des méthodes hybrides en ingénierie des matériaux

Les applications de techniques hybrides en ingénierie de matériaux entre 2004 et 2009 sont en augmentation mais pas comme celles des RNA et de la logique floue [49]. Les modèles hybrides sont utilisés en modélisation de propriétés, optimisation, identification, prédiction et design. Le modèle hybride neuro-floue est le plus populaire vu qu'il représente plus de la moitié des articles passés en revue [49]. Ma raison de cela n'est pas plus loin que le but de la plupart des applications d'ingénierie est de produire un système expressif facile à comprendre et à mettre à jour. Le modèle neuro-floue facilite cet objectif. Bien que les modèles hybrides en ingénierie des matériaux ont montré de bonne aptitude à produire de meilleurs résultats [61] le processus sous-jacent le développement et l'implémentation de ces types de modèles est très complexe. Il n'y a pas de véritable méthode qui garantisse toujours la bonne performance des méthodes. D'autres systèmes intelligents de techniques d'ingénieries appliqués en ingénierie des matériaux incluant les arbres de décision ([61],[63]) , les systèmes experts ([64],[65],[66],[67],[68]) et des modèles de prise de décision sur la base de probabilité tel que modèle de Monte Carlo [69] .

- [1] **Richard LESAR** Computational material science Fundamentals to applications, Material Research Society Cambridge University Press 2013
- [2] **M.Rappaz M.Bellet M.Deville** Modélisation numérique en Science et génie des matériaux 1998 Presses polytechnique et universitaires romandes
- [3] **Rowlinson J S** Translation of J D van der Waals 'The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density' 1979 J. Stat. Phys. 20 197–200
- [4] **Landau L D and Khalatikow I M** the Selected Works of L.D. Landau (Engl. transl.) 1963 (Oxford: Pergamon)
- [5] **Hillert M** A theory of nucleation for solid solutions D.Sc Thesis 1956 (Cambridge, MA: MIT Press)
- [6] **Cahn J E and Hilliard J E** Free energy of a nonuniform system: I. Interfacial free energy 1958 J. Chem. Phys. 28 258–67
- [7] **Cahn J E and Hilliard J E** Free energy of a nonuniform system: III. Nucleation in a two-component incompressible fluid 1959 J. Chem. Phys. 31 688–99
- [8] **Steinbach, Ingo** "Phase-field models in materials science". Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering (2009). 17 (7)
- [9] **June Gunn Lee**, Computational Material Science An introduction, CRC Press Taylor and Francis Group 2012
- [10] European Commission Consultation report Material Modelling: one-day consultation meeting 27th February 2014 Brussels, Belgium doi: 10.2777/72001 ISBN 978-92-79-37267-4
- [11] **Haykin.S** Neural network: a comprehensive foundation 3rd Ed 2009 New York Pearson Prentice Hall
- [12] **Mellit A, Kalogirou SA** (2008). Artificial intelligence techniques for photovoltaic applications: A review. Prog. in Energy and Combustion Sci. 34: 74-632.
- [13] **Tsai K-M, Wang P-J** (2001). Comparisons of neural network models on material removal rate in electrical discharges machining. J. Mater.Process. Technol. 117: 111-124.
- [14] **Anaraki MT, Sanjari M, Akbarzadeh A** (2008). Modeling of high temperature rheological behavior of AZ61 Mg-alloy using inverse method and ANN. Materials & Design 29: 1701-1706.

- [15] **Jeffreys S** (1988). Finite element analysis doing away with prototypes. *Ind. Comput.* 34-36.
- [16] **Cheroutre-Vialette M, Lebert A** (2000). Modelling the growth of *Listeria monocytogenes* in dynamic conditions. *Int. J. Food. Microbiol.* 55:201-207.
- [17] **Hornik K, Stinchcombe M, White H** (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks* 2: 359-366.
- [18] **Lippmann R** (1989). Pattern classification using neural networks. *IEEE Commun. Mag.* 11: 47-64.
- [19] **Schalkoff RJ** (1997). *Artificial neural networks*. New York: McGraw-Hill.
- [20] **Wang JP** (1997). Color-image processing for the evaluation of streamlines in plane extrusion by fuzzy set theory. *J. Mater. Process. Technol.* 71:322-328.
- [21] **Elman J** (1990). Finding structure in time. *Cognitive Sci.* 14:179-211.
- [22] **Draye J, Pavisic D, Libert G** (1996). Dynamic recurrent neural networks: a dynamical analysis. *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.* (26) 5:692-706.
- [23] **Parlos A, Chong K, Atiya A** (1994). Application of the recurrent multilayer perceptron in modelling complex process dynamics. *IEEE Transaction on Neural Networks* (5)2:255-266.
- [24] **Seker S, Ayaz E, Turkcan E** (2003). Elman's recurrent neural network applications to condition monitoring in nuclear power plant and rotating machinery. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 16 (7-8): 647-656.
- [25] **Giles CL, Horne BG, LIN T** (1995). Learning a class of large finite state machines with a recurrent neural network. *Neural Networks* (8)9:1359-1365.
- [26] **Rao HS, Mukherjee A** (1996). Artificial neural networks for predicting the macromechanical behaviour of ceramic-matrix composites. *Comput. Mater. Sci.* 5: 307-322.
- [27] **Basheer IA, Hajmeer M** (2000). Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *J. Microbiol. Methods* 43: 3-21.
- [28] **Guessasma S, Montavon G, Gougeon P, Coddet C** (2003). Designing expert system using neural computation in view of the control of plasma spray processes. *Materials & Design* 24: 497-502.
- [29] **Guler MO, Artir R** (2007). Modular neural network modeling of compressive strength of high-alumina bricks by using tangent function. *Mater. Des.* 28:112-118.
- [30] **Cai A-H, Chen H, An W-K, Li X-S, Zhou Y** (2008). Optimization of composition and technology for phosphate graphite mold. *Mater. Des.* 29:1835-1839.
- [31] **Zadeh LA** (1965). Fuzzy set. *Information & Control* 8: 338-358.
- [32] **Zadeh LA** (1973). Outline of a new approach to the analysis of complex systems and decision processes. *IEEE Trans. On Syst. Man Cybernetic* 1: 28-44.

- [33] **Zimmermann HJ** (1996). Fuzzy set theory and its applications. Boston,USA: Kluwer.
- [34] **Takagi T, Sugeno M** (1985). Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. IEEE Trans. on Systems, Man & Cybernetic, SMC-15:116-132.
- [35] **Bezdek JC** (1993). Fuzzy models-what are they, and why? IEEE Trans.Fuzzy Sys. 1(1): 1-6.
- [36] **Perzyk M, Meftah OK** (1998). Selection of manufacturing process in mechanical design. J. Mater. Process. Technol. 76:198-202.
- [37] **Karray FO, Silva CD** (2004). Soft comput. intell. Syst. Des. Theory,tools and application. England, UK: Addison Wesley.
- [38] **Chen JL, Sun SH, Hwang WC** (1995). An intelligent data system for composite material selection in structural design. Eng. Fract. Mech. (50) 5/6: 935-946.
- [39] **Mohamed K, Mohammed R, Mustapha T, Driss Z** (2004). Determination of fuzzy logic membership functions using genetic algorithms: application to structure odor modeling. J. Mol. Model. (10) 5-6: 335-341.
- [40] **Tien T-L** (2005). The indirect measurement of tensile strength of material by the grey prediction model *GMC* (1; *n*). Meas. Sci. Technol. (16)6:1322-1328.
- [41] **D'Errico GE** (2001). Fuzzy control systems with application to machining processes. J. Mater. Process. Technol. 109: 38-43.
- [42] **Liu X** (2007). Parameterized defuzzification with maximum entropy weighting function another view of the weighting function expectation method. Math. Comput, Model. 45: 177-188.
- [43] **Wong SV, Hamouda AMS, Baradie MAE** (1999). Generalized fuzzy model for metal cutting data selection. J. Mater. Process. Technol. 89-90: 310-317.
- [44] **Wong SV, Hamouda AMS** (2002). A fuzzy logic based expert system for machinability data-on-demand on the internet. J. Mater. Process.Technol. 124: 57-66.
- [45] **Zhu HT, Jiang ZY, Tieu A, Wang GD** (2003). A fuzzy algorithm for flatness control in hot strip mill. J. Mater. Process. Technol. 140: 123-128.
- [46] **Bortolan, G., and Pedrycz W** (1997). Reconstruction problem and information granularity. IEEE trans. Fuzzy. Syst. 5: 234-248
- [47] **Roychowdhury S, Pedrycz W** (2001). A survey of defuzzification strategies. Int. J. Intell. Syst.16: 679-695.
- [48] **Wang P** (1996). The interpretation of fuzziness. IEEE Trans. On Systems man, and Cybernetics: Part B. (26) 2: 321-331.
- [49] **Odetunji.A Odejobi, Lasisi.EE, Umoru** Application of soft computing techniques in material engineering: A review African journal of mathematics and computer science research Vol. 2(7), 2009

- [50] **Holland JH** (1962). Outline for a logical theory of adaptive systems. *J.ACM.* 3: 486-493.
- [51] **Kristinson K, Dumont G** (1992). System identification and control using genetic algorithms. *IEEE Trans. on Syst. Man & Cybernetics* (22) 5:1033-1046.
- [52] **Koppen M, Franke F, Vicente-Garcia R** (2006). Tiny gas for image processing applications. *IEEE Comput. Intell.* (1)(2): 17-26.
- [53] **Oduguwa V, Tiwari A, Roy R** (2005). Evolutionary computing in manufacturing industry:an overview of recent applications. *Appl. Soft Comput.* 5:281-299.
- [54] **Goldberg DE** (1989). Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning. New York, USA: Addison-Wesley.
- [55] **Michalewicz Z** (1996). Genetic algorithms + data structures=evolution programs. New York, USA: Springer.
- [56] **Genel K** (2003). Use of artificial neural network for prediction of ion nitrided case depth in FeCr alloys. *Materials & Design* 24: 203-207.
- [57] **Tarnng YS, Nian CY, Kao JY** (1997). Automatic synthesis of membership functions for the force control of turning operations. *J. Mater. Process. Technol.* 65: 80-87.
- [58] **Zadeh LA** (1994). Fuzzy logic, neural network and soft computing. *Communication of the ACM* (37) 3:77-84.
- [59] **Zadeh LA** (2001). Applied soft computing- foreword. *Appl. Soft Comput.*1: 1-2.
- [60] **Huang Y, Gedeon TD, Wong PM** (2001). An integrated neural-fuzzy-genetic-algorithm using hyper-surface membership functions to predict permeability in petroleum reservoir. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 14: 15-21.
- [61] **Ermolaeva NA, Kaveline KG, Spoomaker JL** (2004). Fuzzy rule selection by multi-objective genetic local search algorithms and rule evaluation measures in data mining. *Fuzzy. Sets. Syst.*141: 59-88.
- [62] **Georgilakis PS, Gioulekas AT, Souaris AT** (2007). A decision tree method for the selection of winding material in power transformers. *J.Mater. Process Technol.* 181: 281-285.
- [63] **Shao X, Zhang G, Li P, Chen Y** (2001). Application of ID3 algorithm in knowledge acquisition for tolerance design. *J. Mater. Process. Technol.* 117:66-74.
- [64] **Long H, Mynors DJ, Holland P, Standring P.** (2004). Knowledge-based process selection for rotationally symmetric and rotationally non-symmetric components in cold forming.*J.Mater.Process.Technol.* 117:338-345.
- [65] **Buggy M, Conlon C** (2004). Material selection in the design of electrical connectors. *J. Mater. Process. Technol.* 153-154: 213-218.

- [66] **Faura F, Sebastian MA, Zamora R** (2001). A decision support system for sheet metal blanking process parameters selection. *J. Mater. Process. Technol.* 118: 371-376.
- [67] **Alitavoli, McGeough JA** (1998). An expert process planning system for meat cutting by high pressure water-jet. *J. Mater. Process. Technol.* 84, 130-135.
- [68] **Vitanov VI, Harrison DK, Mincoff NH, Vladimirova TV** (1995). An expert system shell for the selection of metal-cutting parameters. *J. Mater. Process. Technol.* 55: 111-116.
- [69] **Lin C-Y, Huang W-H, Jeng M-C, Doong, J-L** (1997). Study of an assembly tolerance allocation model based on Monte Carlo simulation. *J. Mater. Process. Technol.* 70: 9-16.

## **Chapitre II**

# **Modélisation par réseau de neurones**

## 2.1. Généralités [6]

Les réseaux de neurones artificiels ou formels sont des modèles inspirés par de petites unités de traitement que l'on trouve dans le cerveau humain. Ces unités sont des cellules cérébrales appelées neurones. Ces réseaux sont, à l'origine, une tentative de modélisation mathématique du cerveau humain. Ils sont considérés comme un système d'intelligence artificielle fondé sur le fonctionnement des neurones du système nerveux ; leur but est de simuler la façon dont un cerveau apprend, traite et retient l'information.

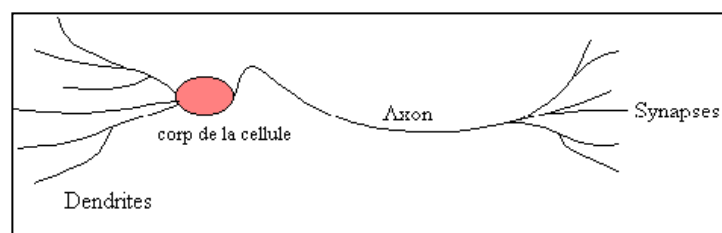
Les premiers travaux datent de 1943 et sont l'œuvre de MM. *Mac Culloch* et *Pitts*. Ils présentent un modèle assez simple pour les neurones et explorent les possibilités de ce modèle. Nous allons commencer cette section par la définition d'un neurone biologique et d'un neurone formel. Par la suite nous exposerons le fonctionnement des neurones formels et des réseaux de neurones artificiels

## 2.2. Le neurone biologique :

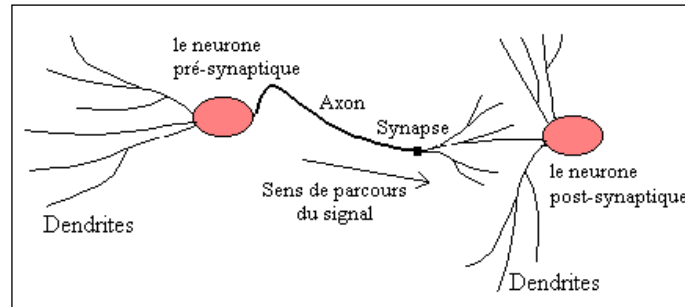
La neurologie nous dit que le cerveau humain est formé d'un nombre incalculable de cellules spécialisées appelées neurones. Il y a différents types de neurones, mais tous peuvent être ramenés à l'exemple de la figure 2.1 et à la description qui suit :

Le neurone est une cellule composée d'un corps cellulaire et d'un noyau. Le corps cellulaire se ramifie pour former ce que l'on nomme les dendrites.

Le corps principal de la cellule reçoit des signaux des autres neurones à travers les dendrites. Le neurone accumule les signaux et quand il atteint un certain seuil, il se déclenche en déchargeant un signal le long d'une connexion appelée axone vers d'autres cellules à travers des jonctions appelées synapses. Ces synapses sont à leurs tours reliées aux dendrites d'autres cellules. Une synapse, est ainsi, considérée comme la jonction entre deux neurones.



**Figure 2.1** Schéma simplifié d'un neurone biologique [6].

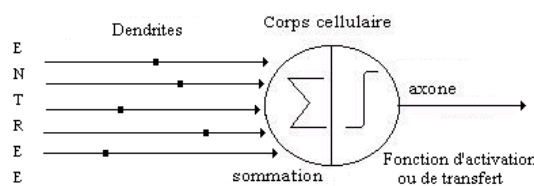


**Figure 2.2** Neurone pré-synaptique et neurone post-synaptique [6].

Dans le cerveau humain, les neurones sont connectés en un réseau très complexe avec d'innombrables interconnexions. Schématiquement, les dendrites représentent les entrées du neurone et son axone sa sortie. Lorsqu'il y a échange d'information entre deux neurones, il y a un neurone qui émet un signal et un autre qui reçoit ce signal. Le neurone émetteur est appelé neurone pré-synaptique, et le neurone récepteur est appelé neurone post-synaptique.

### 2.3. Le neurone formel (artificiel) :

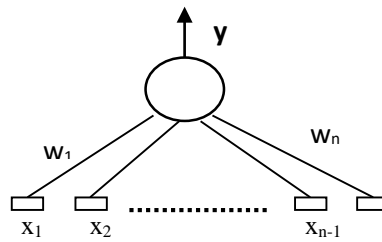
Le neurone formel est une représentation formelle ou une modélisation d'un neurone biologique. On peut définir un neurone artificiel comme un processeur élémentaire qui reçoit un nombre variable d'entrées en provenance d'autres neurones. A chacune de ces entrées est associé un poids  $w$  qui représente la force de la connexion.



**Figure 2.3** Modélisation d'un neurone artificiel [6].

On peut aussi définir, mathématiquement, un neurone formel comme une fonction algébrique non linéaire et bornée, dont la valeur dépend de paramètres appelés coefficients ou poids. Les variables de cette fonction sont habituellement appelées entrées du neurone, et la valeur de la fonction est appelée sa sortie.

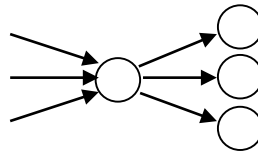
Un neurone est, dans ce cas, considéré comme un opérateur mathématique, dont on peut calculer la valeur numérique. Il est souvent représenté graphiquement comme l'illustre la figure 2.4.



**Figure 2.4** Représentation mathématique d'un neurone formel.

$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n; w_1, w_2, \dots, w_n)$  est une fonction linéaire ou non linéaire, bornée. Les  $x_i$  sont les variables et les  $w_i$  sont les poids.

En théorie, chaque processeur élémentaire est doté d'une seule sortie. Mais en pratique, lorsqu'on a besoin de relier plusieurs neurones entre elles, l'axone n'est pas représenté dans les réseaux artificiels. Ainsi, un neurone artificiel peut être connecté directement à plusieurs autres neurones.



**Figure 2.5** Modélisation de liaison entre plusieurs neurones artificiels

Le modèle biologique fait intervenir une notion temporelle qui est difficile à intégrer dans un modèle simple. Cette notion est, alors, remplacée par une simple sommation des signaux arrivant au neurone (les entrées du neurone). Cette sommation est passée à une fonction d'activation ou de transfert qui est utilisée pour déterminer la sortie du neurone. Au vu de cette définition d'un neurone formel, on peut concevoir un réseau de neurone artificiel comme un système interconnecté d'éléments de traitement, chacun possédant un nombre limité d'entrées et une sortie. Ces éléments simples de traitement communiquent entre eux en s'envoyant des signaux à travers un très grand nombre de connexions pondérées par des poids. Ces derniers sont capables "d'apprendre" à partir d'entrées calibrées susceptibles de produire, avec des ajustements, du temps et des répétitions, des sorties appropriées. Les réseaux de neurone sont utilisés dans des domaines tels que la reconnaissance de formes, la corrélation d'événements ...etc.

L'idée principale des réseaux de neurones "modernes" est la suivante :

On se donne un neurone formel, appelé aussi perceptron, qui est capable de réaliser quelques calculs élémentaires. On relie ensuite entre eux un nombre important de ces neurones et il est important de noter que ces neurones manipulent des données numériques et non pas symboliques.

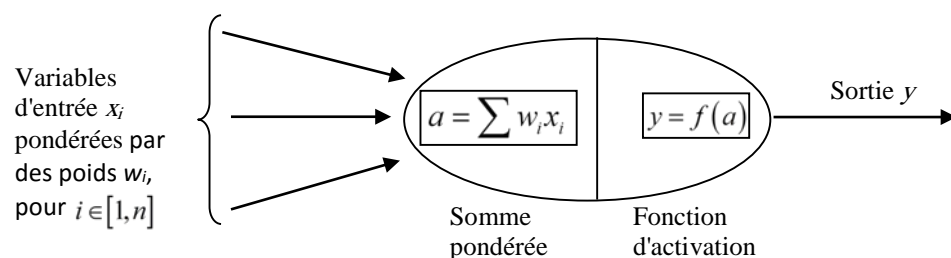
Deux visions s'affrontent donc, d'un côté les tenants de la modélisation biologique qui veulent respecter un certain nombre de contraintes liées à la nature du cerveau, de l'autre les tenants de la puissance de calcul qui s'intéressent au modèle en lui-même, sans aucun lien avec la réalité biologique. Chaque réseau doit passer par une phase d'apprentissage pour lui donner une expérience qui lui sera utile lors de son exécution.

#### 2.4. Fonctionnement d'un réseau de neurones artificiels :

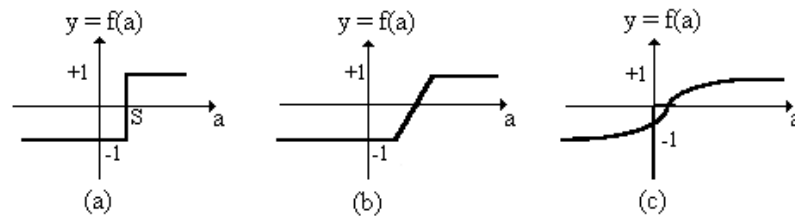
Nous avons vu dans la section précédente, qu'un réseau de neurones artificiels est un ensemble de neurones qui sont interconnectés. Le comportement d'un réseau est donc défini par le comportement collectif des neurones qui le composent. Avant d'aborder ce comportement collectif, nous allons exposer le comportement d'un seul neurone.

Un neurone formel utilise des entrées qui sont des grandeurs réelles  $x_i$  pour produire une sortie  $y$ , à l'aide d'une fonction de transfert. On peut distinguer dans ce processus deux phases :

- 1- On calcule la somme pondérée des entrées selon l'expression  $a = \sum w_i x_i$
- 2- On utilise une fonction de transfert pour calculer la valeur de l'état du neurone qui sera transmise aux neurones en aval.



**Figure 2.6** Représentation du fonctionnement d'un neurone artificiel



**Figure 2.7** Différents types de fonctions de transfert pour un neurone artificiel.

(a) fonction à seuil (b) fonction linéaire par morceaux (c) fonction sigmoïde.

Il existe plusieurs formes possibles pour la fonction de transfert. Parmi les fonctions les plus couramment utilisées on peut citer :

- la fonction à seuil est illustrée par le cas (a) de la figure 2.7. Dans ce cas la sortie  $y$  du neurone est définie par :

$$y = f(a) = \begin{cases} +1 & \text{si } a > S \\ -1 & \text{si } a \leq S \end{cases}$$

- la fonction linéaire par morceau est illustrée par le cas (b) de la figure 2.7. Dans ce cas la sortie  $y$  du neurone est définie par :

$$y = f(a) = \begin{cases} +1 & \text{si } a > S_2 \\ k \cdot a & \text{si } a \in [S_1, S_2] \\ -1 & \text{si } a \leq S_1 \end{cases}$$

- la fonction sigmoïde est illustrée par le cas (c) de la figure 2.7. Dans ce cas la sortie  $y$  du neurone est définie par :

$$y = f(a) = \frac{1}{1 + e^{-(a-S)}}$$

Si on "relie" un neurone au monde extérieur par l'intermédiaire de capteurs, il peut réaliser une simple analyse de ce qu'il "perçoit". Si on représente les valeurs observées par le neurone sous forme d'un vecteur, le neurone réalise alors un découpage de son espace d'entrée (l'espace vectoriel auquel appartient le vecteur d'observation) en deux zones :

- la zone *d'activité* dont les vecteurs donnent une sortie égale à 1 que l'on peut définir

par : 
$$Z_{activité} = \{(x_1, \dots, x_n) \in R^n / y = f(x_1, \dots, x_n) = 1\}$$

- et la zone d'inactivité dont les vecteurs donnent une sortie égale à -1 que l'on peut

définir par : 
$$Z_{inactivité} = \{(x_1, \dots, x_n) \in R^n / y = f(x_1, \dots, x_n) = -1\}$$

Un neurone formel ne réalise donc rien d'autre qu'une somme pondérée suivie d'une transformation qui peut être linéaire ou non-linéaire. Ce qui fait la force d'un réseau de neurones artificiels, c'est l'association de très grand nombre de neurones pour réaliser des fonctions plus compliquées et qui peuvent être utiles pour des applications diverses.

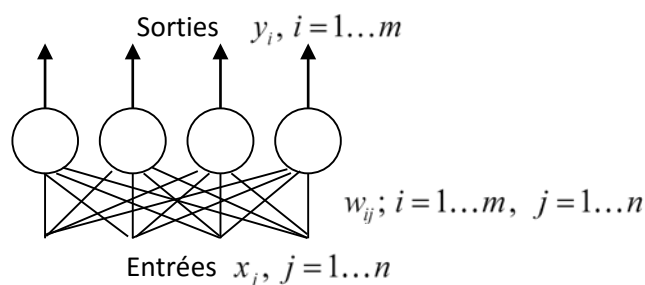
Un perceptron est une autre appellation pour un neurone simulé dans un programme informatique. Les neurones artificiels peuvent être organisés en réseau de plusieurs manières. On peut avoir un réseau à une seule couche (perceptrons en couche unique) ou un réseau à couches multiple (perceptrons en multicouche)

### 2.4.1. Le réseau à couche unique :

Un réseau de neurones à perceptrons en couche unique est formé de neurones artificiels qui ne sont pas interconnectés mais qui reçoivent tous le même vecteur d'entrées pondérées par des poids différents et qui produisent chacun une sortie unique.

Ainsi dans un tel réseau, si  $m$  représente le nombre de neurones et  $n$  le nombre d'entrées, on a :

- les entrées qui sont notées  $x_1, x_2, \dots, x_n$
- les poids qui sont notés  $w_{11}, \dots, w_{1n}, w_{21}, \dots, w_{2n}, \dots, w_{m1}, w_{mn}$
- les sorties qui sont notées  $y_1, y_2, \dots, y_m$



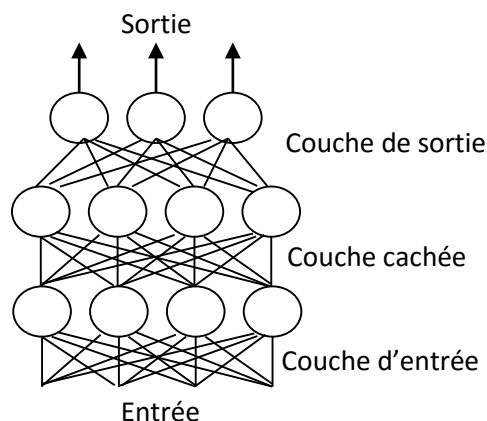
**Figure 2.8** Représentation d'un réseau à perceptrons en couche unique

### 2.4.2. Les réseaux multicouches :

Le réseau à perceptrons en multicouches (noté *MLP* pour **M**ulti **L**ayer **P**erceptrons en anglais) découle de l'idée qui consiste à grouper des neurones dans une couche. On place ensuite bout à bout plusieurs couches et on connecte complètement les neurones de deux couches adjacentes ainsi qu'il est illustré dans la figure 2.9. Les entrées des neurones de la deuxième couche sont donc en fait les sorties des neurones de la première couche. Les neurones de la première couche sont reliés au monde extérieur et reçoivent tous le même vecteur d'entrée (c'est en fait l'entrée du réseau). Ils calculent alors leur sorties qui sont transmises aux neurones de la deuxième couche, etc. Les sorties des neurones de la dernière couche forment la sortie du réseau.

Généralement, un réseau est constitué de trois couches (il est rare où on aura besoin de plus), appelées couche d'entrée (input layer), couche cachée (hidden layer) et couche de sortie (output layer). L'input à tout le réseau est présenté à la couche d'entrée, puis il est transmis aux couches supérieures. La couche de sortie nous fournit l'output du réseau.

Au terme de ces définitions on peut remarquer que lorsqu' une connexion existe entre deux neurones, elle possède un poids. Ce poids indique si la liaison est forte ou faible. D'autre part il faut remarquer que l'information qui est contenue dans le réseau, est représentée par les différents poids des connexions entre les nœuds.



**Figure 2.9** Représentation d'un réseau multicouche.

## 2.5. Utilisation des réseaux de neurones artificiels :

Lorsqu'on développe un réseau de neurones artificiels on passe par deux étapes. La première étape, qui est une phase d'apprentissage, consiste à entraîner le réseau à reconnaître un certain nombre de motifs de base. La deuxième étape, qui est la phase d'exploitation, consiste à utiliser le réseau pour reconnaître ou classer de nouveaux motifs.

### 2.5.1. Phase d'apprentissage :

L'apprentissage est une phase de développement d'un réseau de neurones durant laquelle le comportement du réseau est modifié jusqu'à l'obtention du comportement désiré. Comme dans toute phase d'apprentissage, on fait appel à des exemples de comportement qui sont constitués, dans ce cas, par des motifs de base. L'apprentissage consiste à faire coïncider les sorties effectives du réseau avec des sorties désirées.

Dans le cas des réseaux de neurones artificiels, en plus de la description du modèle, on spécifie souvent le type d'algorithme d'apprentissage. Dans la majorité des algorithmes actuels :

- Les variables modifiées pendant l'apprentissage sont les poids des connexions.
- L'apprentissage s'effectue à travers la modification des poids du réseau dans l'optique d'accorder la réponse du réseau aux exemples de base et à l'expérience.
- Il est souvent impossible de décider à priori des valeurs des poids des connexions d'un réseau par une application donnée.

Au niveau des algorithmes d'apprentissage, on peut distinguer deux grandes classes

- L'apprentissage supervisé : Dans ce cas les exemples d'apprentissage se présentent sous forme de couples de valeurs formés d'une entrée et d'une sortie associée. Ceci veut dire qu'à chaque fois qu'on présente au réseau un motif de base on lui donne le signal de sortie associé à ce motif.
- L'apprentissage non supervisé : Dans ce cas, on ne dispose que de valeurs d'entrée. Ceci veut dire qu'on fournit au réseau un motif de base sans lui donner la sortie qui correspond à ce motif (généralement on ne connaît pas cette sortie). Le réseau

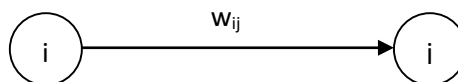
décide de lui-même sur la manière à organiser les motifs d'entrée en des classes qui correspondent chacune à un espace de sortie. Cela suppose bien sûr que les exemples ayant les mêmes caractéristiques provoquent la même sortie.

La plupart des réseaux de neurones sont entraînés en utilisant une méthode d'apprentissage supervisée.

Dans la phase d'apprentissage on est amené à choisir une règle d'apprentissage. Il existe actuellement une multitude de règles, on cite parmi celle-ci :

- **Règle de correction d'erreurs** : Cette règle s'inscrit dans le paradigme d'apprentissage supervisé, c'est-à-dire dans le cas où l'on fournit au réseau une entrée et la sortie correspondante. Si  $y$  est la sortie calculée par le réseau, et  $d$  la sortie désirée, le principe de cette règle est d'utiliser l'erreur  $(d - y)$ , afin de modifier les connexions et de diminuer ainsi l'erreur globale du système. Le réseau va donc s'adapter jusqu'à ce qu'il soit égal ou presque égal à  $d$ . Ce Principe est notamment utilisé dans le cas du réseau multicouches.
- **Règles de Hebb** : Cette règle d'apprentissage est la plus ancienne (1949). Elle est basée sur le comportement des neurones biologiques. Cette règle modélise le fait que si deux neurones, de part et d'autre d'une synapse, sont activés de façon synchrone et répétée, la force de la connexion synaptique va être croissante. Il est à noter ici que l'apprentissage est localisé, c'est-à-dire que la modification d'un poids synaptique  $w_{ij}$  ne dépend que de l'activation d'un neurone  $i$  et d'un autre neurone  $j$  auquel il est connecté.

Cette règle s'applique aux connexions entre neurones, comme le représente le schéma suivant :



Où :

$i$  : le neurone en amont

$j$  : le neurone en aval

$w_{ij}$  : Le poids de la connexion

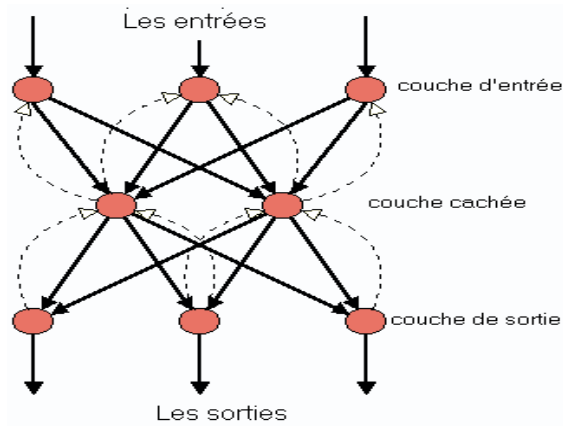
## Chapitre II : Modélisation par réseau de neurones

La modification de poids dépend de la co-activation des neurones pré-synaptiques et post synaptique, ainsi que montre le tableau 2.1.  $x_i$  et  $x_j$  sont respectivement les valeurs d'activation des neurones  $i$  et  $j$ ,  $\partial w_{ij}$  (dérivée partielle du poids) correspond à la modification de poids réalisée.

**Tableau 2.1** Loi de Hebb

$x_i$	$x_j$	$\partial w_{ij}$
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	+

**-la rétro-propagation du gradient de l'erreur :** cet algorithme est utilisé dans les réseaux de type multicouche, formé d'une couche d'entrée, d'une couche de sortie, et au moins une couche cachée. Le réseau ne doit pas contenir de récursivité dans les connexions, et il ne doit pas avoir de connexions entre neurones d'une même couche. Le principe de la rétro-propagation consiste à présenter au réseau un vecteur d'entrées, de procéder au calcul de la sortie par propagation à travers les couches, de la couche d'entrée vers la couche de sortie en passant par les couches cachées. Cette sortie obtenue est comparée à la sortie désirée, une erreur est alors obtenue. A partir de cette erreur, est calculé le gradient de l'erreur qui est à son tour propagé de la couche de sortie vers la couche d'entrée, d'où le terme de rétro-propagation. Cela permet la modification des poids du réseau et donc l'apprentissage. L'opération est répétée pour chaque vecteur d'entrée et cela jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit vérifié. La figure 2.10 donne une illustration de cette règle. Les lignes en pointillés représentent le parcours de l'erreur de la couche de sortie vers la couche d'entrée.



**Figure 2.10** Illustration de la rétro-propagation.

- **Règle d'apprentissage par compétitions** : La particularité de cette règle, c'est qu'ici l'apprentissage ne concerne qu'un seul neurone. Le principe de cet apprentissage est de regrouper les données en catégories. Les motifs similaires vont donc être rangés dans une même classe, en se basant sur les corrélations des données, et seront représentés par un seul neurone. Dans un réseau à compétition simple, chaque neurone de sortie est connecté aux neurones de la couche d'entrée, aux autres cellules de la couche de sortie (connexions inhibitrices) et à elle-même (connexion excitatrice). La sortie va donc dépendre de la compétition entre les connexions inhibitrices et excitatrices.

### 2.5.2. Phase de test : [7]

La phase de test réalisée en testant le réseau conçu par des exemples autre que ceux utilisés lors de la phase d'apprentissage, la validation se fait par test sur un certain nombre des variables (inputs), dont on connaît la sortie (outputs) que l'on a écartés de l'échantillon d'apprentissage et réservées à cet effet.

A noter que l'échantillon de test est sélectionné d'une manière aléatoire ce qui fait que chaque échantillon dans un réseau de neurone ne ressemble à aucun autre, néanmoins le nombre de ces échantillons peut être contrôlé. Ce qui explique le changement des résultats au sein d'un même réseau répété deux fois successivement.

## 2.6.Exemples d'apprentissage :

Comme exemple d'apprentissage La loi de Hebb peut être modélisée par les équations suivantes

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \delta w_{ij}(t)$$

Où  $w_{ij}(t+1)$  est le nouveau poids

$w_{ij}(t)$  est l'ancien poids

$\partial w_{ij}(t) = x_i x_j$  (La co-activation étant le produit des deux valeurs d'activation)

L'algorithme d'apprentissage modifie de façon itérative (par petit pas) les poids pour adapter la réponse obtenue à la réponse désirée. Il s'agit en fait de modifier les poids lorsqu'il y a erreur seulement (réponse obtenue différente de la réponse désirée). On peut décrire un tel algorithme par :

- 1) Initialisation des poids et du seuil  $s$  à des (petites) valeurs choisies au hasard
- 2) Présentation d'une entrée  $E = (e_1, e_2, \dots, e_n)$  de base d'apprentissage.
- 3) Calcul de la sortie obtenue  $y$  pour cette entrée :

$$y = \text{signe}(a) \text{ (Si } a > 0 \text{ alors } y = +1 \text{ sinon alors } y = -1)$$

Où  $a = \sum (w_i \cdot e_i) - s$  (La valeur du seuil  $s$  est introduite ici dans le calcul de la somme pondérée)

- 4) Si la sortie  $y$  est différente de la sortie désirée  $d_1$  pour cet exemple d'entrée  $E_1$  alors la modification des poids est :

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \mu e_i e_j$$

( $\mu$  est une constante positive, qui spécifie le pas de modification des poids)

- 5) Tant que tous les exemples de la base d'apprentissage ne sont pas traités correctement (i.e. modification des poids), on retourne à l'étape 2.

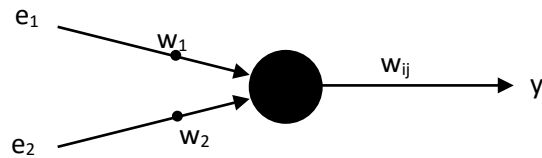
Exemple de fonctionnement de l'algorithme d'apprentissage du perceptron :

**Tableau 2.2** Base d'exemples d'apprentissage

$e_1$	$e_2$	$d$	
1	1	1	(1)
-1	1	-1	(2)
-1	-1	-1	(3)
1	-1	-1	(4)

Exemple d'application de l'Algorithme d'apprentissage de Hebb :

Choisissons pour les neurones un comportement binaire les entrées  $e_1$  et  $e_2$  sont considérées comme des neurones (figure 2.11).



**Figure 2.11** Réseau de 3 neurones (Les 2 entrées sont considérées comme deux neurones)

Nous allons réaliser l'apprentissage de ce réseau sur un problème très simple. La base d'apprentissage est décrite par le tableau 2.3 :

**Tableau 2.3** Base d'exemples d'apprentissage pour la loi de Hebb

$e_1$	$e_2$	d	
1	1	1	(1)
1	-1	1	(2)
-1	1	-1	(3)
-1	-1	-1	(4)

Conditions initiales :  $\mu = +1$  : les poids et le seuil sont nuls

Cas (1) Calculons la valeur de  $y$  pour ce cas

- 1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 0,0 \cdot 1 + 0,0 \cdot 1 - 0,0 = 0$ . Donc  $y = -1$
- 2) La sortie,  $y$ , du neurone ne correspond pas à la sortie désirée  $d$ , il faut donc modifier les poids en appliquant :

$$w_1 = w_1 + e_1 \cdot e_2 = 0,0 + 1 \cdot 1 = 1$$

$$w_2 = w_2 + e_2 \cdot e_2 = 0,0 + 1 \cdot 1 = 1$$

Cas (2) Calculons la valeur de  $y$  pour ce cas avec les poids  $w_1$  et  $w_2$  obtenus dans l'étape précédente

1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 1 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) - 0,0 = 0$ . Donc  $y = -1$

2) La sortie,  $y$ , du neurone ne correspond pas à la sortie désirée  $d$ , il faut donc modifier les poids en appliquant :

$$w_1 = w_1 + e_1 \cdot e_2 = 1,0 + 1 \cdot 1 = 2$$

$$w_2 = w_2 + e_2 \cdot e_2 = 1,0 + 1 \cdot (-1) = 0$$

Cas (3)

1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 2,0 \cdot (-1) + 0,0 \cdot (1) - 0,0 = -2,0$ . Donc  $y = -1$

2) La sortie,  $y$ , du neurone correspond à la sortie désirée  $d$ . Les poids dans ce cas restent inchangés.

Cas (4)

1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 2,0 \cdot (-1) + 0,0 \cdot (-1) - 0,0 = -2,0$ . Donc  $y = -1$

2) La sortie,  $y$ , du neurone correspond à la sortie désirée  $d$ . Les poids dans ce cas restent inchangés.

On revient alors au début de la base d'apprentissage :

On reprend les mêmes opérations sur les 4 cas de la base d'apprentissage en utilisant les derniers poids calculés à savoir  $w_1 = 2$  et  $w_2 = 0$ .

Cas (1)

1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 2,0 \cdot 1 + 0,0 \cdot 1 - 0,0 = 2$ . Donc  $y = 1$

2) La sortie,  $y$ , du neurone correspond à la sortie désirée  $d$ . Les poids dans ce cas restent inchangés

Cas (2)

1)  $a = w_1 e_1 + w_2 e_2 - s = 2 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) - 0,0 = 2$ . Donc  $y = 1$

2) La sortie,  $y$ , du neurone correspond à la sortie désirée  $d$ . Les poids dans ce cas restent inchangés

Etant donné que les poids n'ont subi aucun changement, les cas (3) et (4) ne vont engendrer aucun changement. En d'autre terme la base d'apprentissage a été passée en revue sans modification des poids. Par conséquent, l'algorithme d'apprentissage est terminé.

## 2.7. Applications

Notre travail consiste à mettre en œuvre un modèle de réseau de neurones artificiel capable de prédire les épaisseurs de couches de borures à partir des conditions de boruration.

Le tableau 2.4 dresse toutes les données utilisées pour la réalisation des différentes expérimentations de calcul. Il représente les résultats obtenus pour les trois bains de boruration (Borax-B<sub>4</sub>C, Borax-Al, Borax-SiC), pour chacun des bains on note les temps de maintien (2h, 4h, et 6h) les températures entre 800 et 1050 (°C) avec un pas de 50 (°C) selon le bain, les épaisseurs de borures en µm et enfin en surbrillances les moyennes arithmétiques des épaisseurs pour chaque température.

Tableau 2.4 Données expérimentales utilisées pour la modélisation

Borax B4C 800°C						Borax-Al 850°C					Borax-Sic 900°C							
Temps (h)	Epaisseur de couche (µm)					moy	Epaisseur de couche (µm)					moy	Epaisseur de couche (µm)					moy
2	22	23	21	16	20	25	22	23	18	15	20	25	5	7	8	10	8	15
	26	28	29	35	30		29	28	31	34	30		25	22	27	18	20	
4	36	45	45	48	37	50	37	47	44	48	39	55	20	18	22	25	30	35
	68	57	55	59	53		76	60	72	62	65		50	45	42	46	52	
6	70	62	57	69	71	75	68	55	52	72	62	80	30	35	38	42	40	50
	87	85	81	89	79		96	92	98	105	100		70	65	62	60	58	
Borax B4C 850°C						Borax-Al 900°C					Borax-Sic 950°C							
2	32	36	34	42	31	45	28	36	34	40	33	45	18	21	22	20	23	30
	55	52	60	51	57		62	55	52	53	57		40	42	39	38	37	
4	60	52	56	63	52	70	70	65	60	66	62	85	55	50	54	48	55	65
	88	85	92	77	75		110	105	97	100	115		85	75	80	70	78	
6	80	78	85	75	91	95	92	84	92	95	88	110	80	75	82	85	78	100
	113	125	105	100	98		130	136	128	125	132		125	120	122	115	118	
Borax B4C 900°C						Borax-Al 950°C					Borax-Sic 1000°C							
2	65	48	55	62	53	70	55	45	54	52	50	65	33	30	32	30	28	45
	90	86	87	78	76		88	80	81	75	70		60	65	62	58	52	
4	96	102	85	100	99	110	97	102	88	100	95	120	80	78	82	75	82	105
	129	137	125	110	117		140	144	134	148	152		136	134	132	120	128	
6	126	135	105	100	132	145	137	135	120	130	140	170	118	125	120	125	124	160
	185	175	155	172	165		208	205	215	195	215		198	200	205	195	190	
Borax B4C 950°C						Borax-Al 1000°C					Borax-Sic 1050°C							
2	92	82	78	95	92	105	88	82	90	76	92	100	58	62	60	56	57	80
	130	110	120	125	128		120	125	115	112	100		112	110	95	100	90	
4	120	142	135	118	145	170	135	140	148	130	150	180	112	120	128	135	125	160
	210	200	205	212	213		222	215	205	225	230		205	200	188	202	185	
6	168	155	150	175	172	200	187	178	165	195	190	245	175	172	180	185	192	245
	220	225	248	242	245		290	300	315	305	325		292	302	312	310	330	

Un premier test de modélisation avec seulement les valeurs moyennes n'a pas donné de bon résultats, vu que les méthodes de RNA nécessitent un nombre d'entrées important pour faire l'apprentissage, ceci nous a obligé à utiliser toutes les valeurs et à les comparer avec les valeurs moyennes.

Il existe une formule empirique permettant d'exprimer le nombre de neurone de la couche cachée nécessaire en fonction des nombre des valeurs d'entrée et de sortie du réseau de neurones, elle est donnée par :

$$m = \sqrt{n - l} + \alpha \dots \dots \dots (2.2)$$

$m$  : désigne le nombre de neurone de la couche cachée.

$n$  : est le nombre de neurone dans la couche d'entrée.

$l$  : est le nombre de neurone dans la couche de sortie

$\alpha$  : Constante de régulation prend les valeurs entières entre 1 et 10.

### 2.7.1. Implémentation de réseaux de neurones :

Pendant tous les calculs, le logiciel MatLab 7.9.0(R2011b) comme support d'implémentation des réseaux de neurones, une interface graphique facilite la tâche de programmation, le réseau qui donne le meilleur résultat sera enregistré et il pourra servir comme simulateur pour un éventuel travail expérimental. Nous avons adopté plusieurs types de réseaux pour optimiser les modèles notamment le réseau Feed-forward back propagation dans lequel les informations se déplacent dans une direction vers l'avant à partir des nœuds d'entrée à travers les nœuds cachés. Le réseau utilisant la fonction d'apprentissage trainbr de Matlab a aussi été utilisé. Trainbr est une fonction d'apprentissage qui met à jour les poids et biais suivant l'optimisation de Levenberg-Marquardt. Qui minimise une combinaison d'erreurs quadratiques et de poids, et détermine la combinaison correcte améliorant la généralisation du réseau. Ce processus est appelé régulation bayésienne. Ce dernier a donné les meilleurs résultats pour les différents bains ; de ce fait on ne présentera que les résultats de ce réseau.

2.7.2. Bain Borax-B<sub>4</sub>C

Le bain de borure utilisé dans cette expérience est le **Borax-B<sub>4</sub>C** avec quatre températures de service : 800, 850, 900 et 950°C chaque température à trois temps de maintien 2, 4, et 6 heures. Les valeurs pour 3 et 5 heures ainsi que celles pour 825, 875 et 925°C sont des valeurs calculées à partir du modèle obtenu.

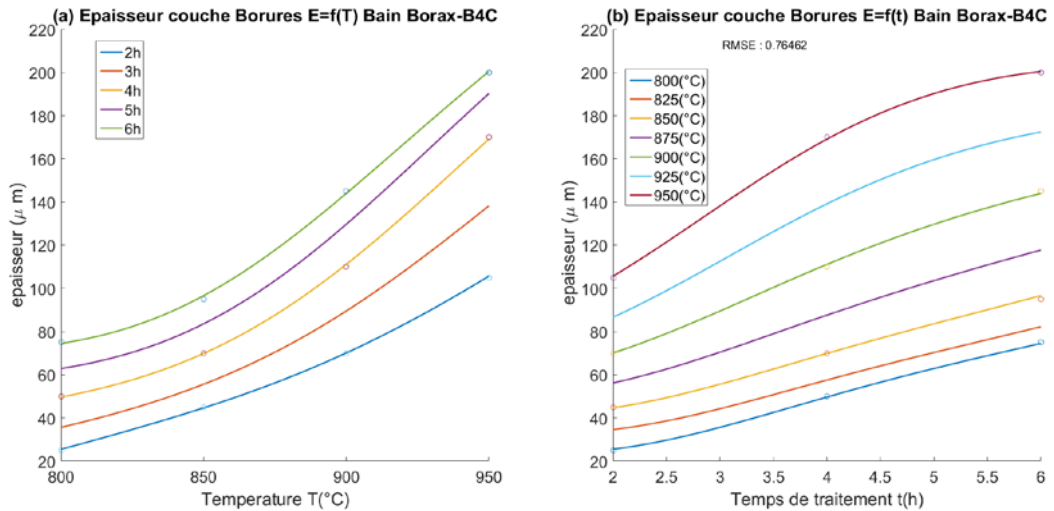


Figure 2.12 Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-B<sub>4</sub>C

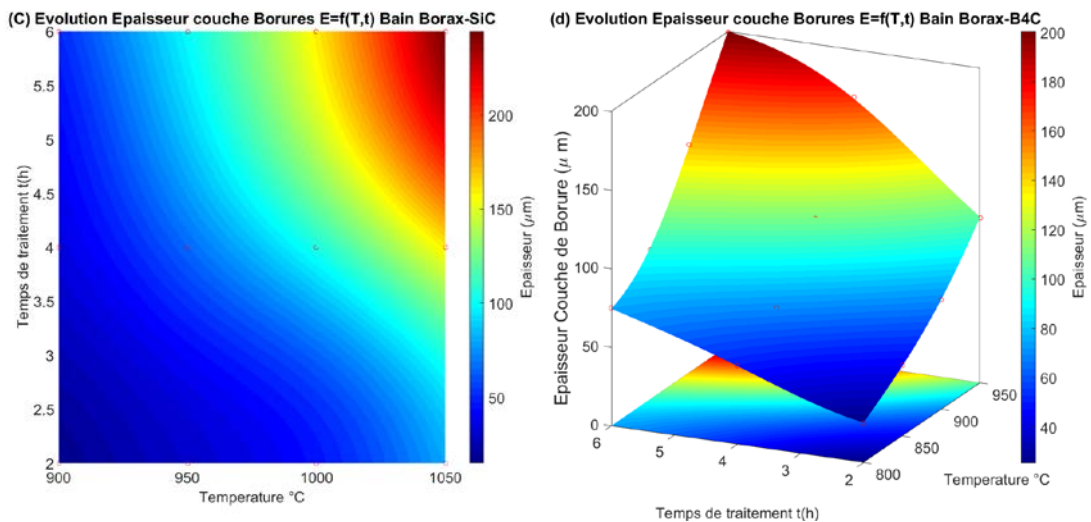


Figure 2.13 Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-B<sub>4</sub>C

2.7.3. Bain Borax-Al

Le bain de borure utilisé dans cette expérience est le **Borax-Al** avec les quatre températures de service : 850, 900, 950 et 1000°C chaque température à toujours trois temps de maintien : 2, 4, et 6 heures.

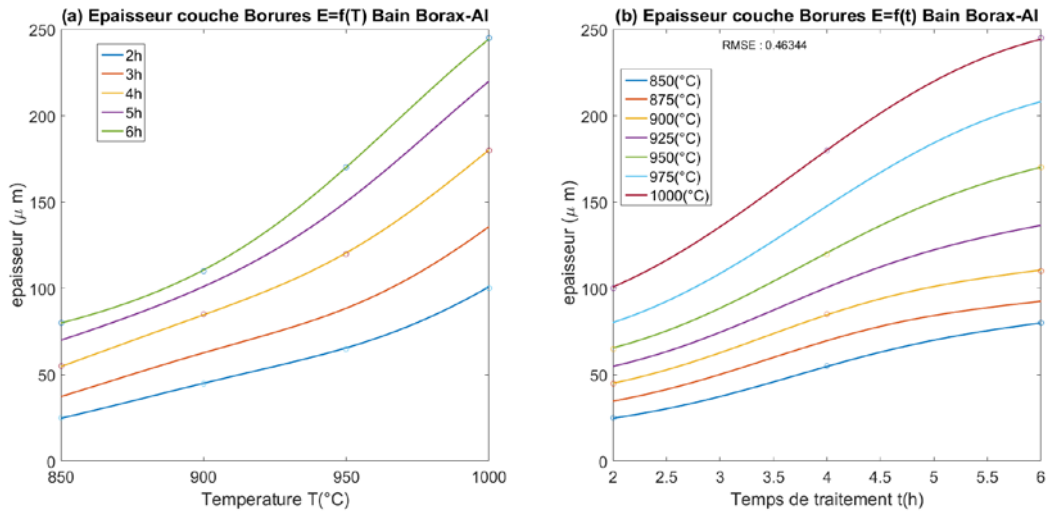


Figure 2.14 Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-Al

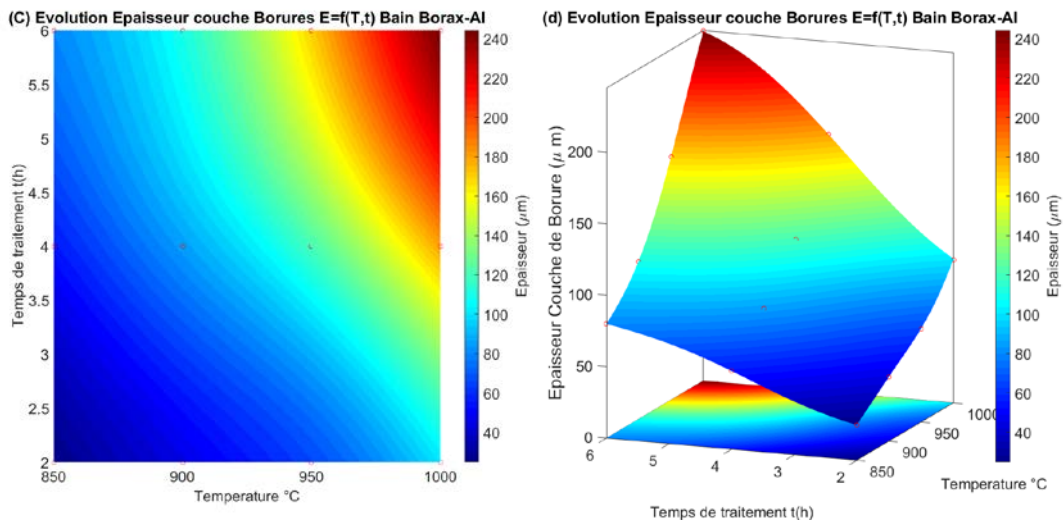


Figure 2.15 Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-Al

2.7.4. Bain Borax-SiC

Le bain de borure utilisé dans cette dernière expérience est le **Borax-SiC** avec quatre températures de service : 900, 950 ,1000 et 1050°C chaque température à trois temps de maintien : 2, 4, et 6 heures.

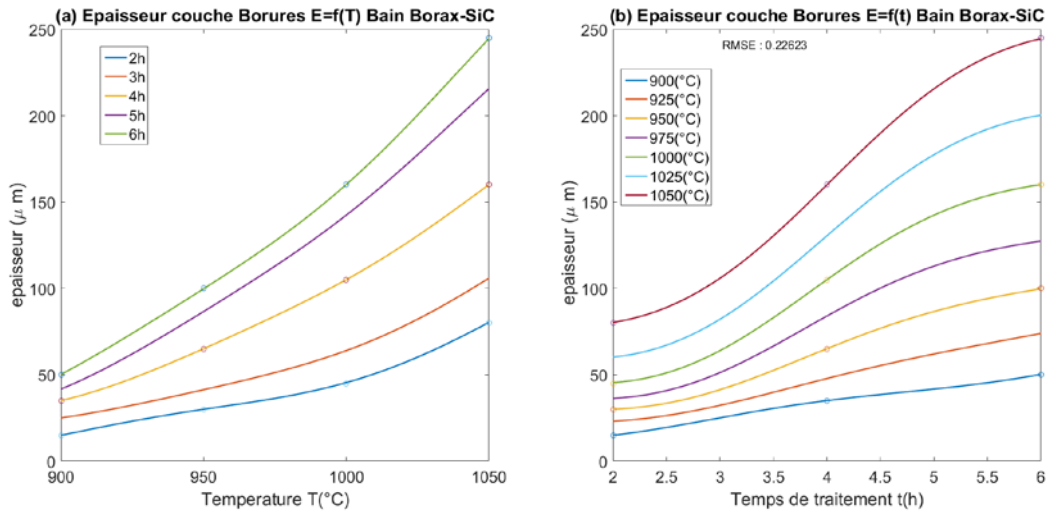


Figure 2.16 Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle RNA pour Borax-SiC

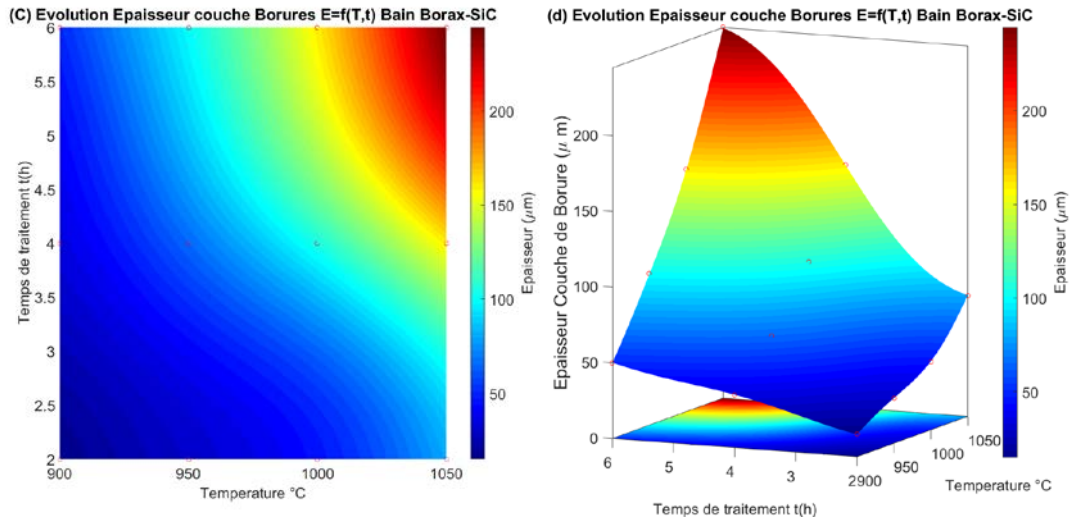


Figure 2.17 Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle RNA pour Borax-SiC

## 2.8. Conclusion :

D'après les résultats obtenus par les réseaux de neurones on peut ainsi conclure que le nombre des variables d'entrées (les inputs) jouent un rôle primordial dans la précision des résultats.

La prédiction des couches de borures par les réseaux de neurones donnent des résultats satisfaisants pourvu que le nombre des variables d'entrée (inputs) soit important plus de (10).

Les réseaux de neurones à rétro propagation utilisant la fonction de régulation bayésienne a donné les meilleurs résultats dans tous les cas.

Le tableau 2.5 dresse les erreurs quadratiques moyennes RMSE. Ces erreurs sont calculées par rapport aux moyennes arithmétiques des épaisseurs expérimentales pour les différents bains.

Tableau 2.5 Erreurs quadratiques moyennes

	Borax-B <sub>4</sub> C	Borax-AL	Borax-SiC
RMSE	0.76462	0.46344	0.22623

Bien que, dans chaque cas, l'on n'a pas présenté au réseau de neurone aucune des moyennes mesurées pour l'épaisseur, la simulation du réseau au niveau des points de mesures semble converger plus ou moins exactement vers la moyenne arithmétique de ces épaisseurs. Ce résultat est très prometteur, du moment qu'il conforte ce que les ingénieurs ont l'habitude de prendre comme épaisseur apparente à savoir la moyenne arithmétique des mesures d'épaisseurs effectuées.

## 2.9. Références bibliographiques

[1] YuXi Liu and ZhiFeng Zhang Software College Zhengzhou University of Light Industry Zhengzhou, China

[2] Introduction to material science & engineering. Mark Robert de Guirerev

[3] P.M.Wood Adams Diffusion in solids Concordia University

[4] Dr Nandita Dasgupta Theory of diffusion continuing education Indian Institute of Technology

[5] Le courrier technique d'OTUA N°11. B.Millet

[6] Hachani Med Modélisation de la diffusion par réseaux de neurones thèse magistère université de Laghouat 2013

[7] R.Ramesh and R.Gnanamoorthy Artificial Neural Network Prediction of Fretting Wear Behavior of Structural Steel, En 24 Against Bearing Steel, En 31

[8] Marrakchi Olfa, Elghali Amira Influence des paramètres texturaux sur les performances des réseaux de neurones pour la classification d'images de télédétection .

[9] Kunst H., Schaaber O., Beobachtungen beim Oberftachenborieren von Stachl III-Boriervverfahren, Harterei-Technische Mitteilungen, 1967, 22 1-25.

## **Chapitre III**

### **Modélisation par logique Floue**

### 3.1. Introduction

Les technologies d'intelligence artificielle, incluant les réseaux de neurones, sont couramment utilisés dans le domaine de l'ingénierie des surfaces, spécialement dans le domaine de nitruration carbonitruration et boruration [1, 2,3].

Les réseaux de neurones artificiels (RNA) et les systèmes flous (SF) sont deux méthodes différentes permettant de traiter l'incertitude due à la fluctuation des variables mesurées dans un processus. Ceci peut être vu dans des systèmes complexes linéaires ou non linéaires [4] [5]. D'une part, les RNA approximent la représentation du modèle en utilisant des entrées et des sorties précises pour l'apprentissage d'un modèle générique. Ce modèle a suffisamment de degrés de libertés qui forment une bonne approximation de la relation complexe entre les variables [6].

D'autre part, dans le SF, les variables d'entrées et sorties sont codées dans une représentation floue, tandis que leurs relations sont gouvernées par des règles « Si...Donc... ». Zadeh [7] le pionnier des SF observa que les deux valeurs dans la logique binaire ne sont pas représentatives de plusieurs cas dans le monde réel.

Pour la représentation de plusieurs divisions entre la valeur VRAIE et la valeur FAUX, Zadeh développa l'idée d'ensembles flous, l'élément peut avoir une infinité de degrés de propriété entre une valeur à l'autre, au lieu d'appartenir à 100% à l'une d'entre elles.

Le SF élimine l'imprécision en donnant une valeur spécifique dans une subdivision infinie entre la valeur VRAI et FAUX. Même si cela semble contradictoire, le SF est une méthode très précise pour donner des résultats fiables et prendre des décisions claires [4] [7].

Le SF est basé sur la façon dont un être humain quantifie une variable. Une variable peut se situer dans une certaine plage, au lieu d'avoir une valeur spécifique. Ceci permet au SF d'obtenir une transition atténuée entre une valeur et une autre.

L'étude qui suit évalue la cinétique de croissance des couches de borures, formés dans un acier ayant subi un traitement de boruration selon différents procédés, en utilisant la technique de logique floue, avec les méthodes Mamdani et Sugeno.

## 3.2. Modèles Logiques Floues

### 3.2.1. Méthode de Mamdani

Durant la première étape de cette méthode, « fuzzification », les valeurs d'un système deviennent des valeurs floues. Par exemple dans le procédé de boruration, les valeurs d'entrées nettes de 6 h de traitement deviennent *temps élevé*, dans sa forme floue. Pour cela, les fonctions d'appartenance,  $\mu_s$ , doivent être définies pour les entrées. Ces fonctions d'appartenance sont établies comme suit :

$$\mu_s \longrightarrow [0,1]$$

$$\mu_s(x) = 1, x \in S$$

$$\mu_s(x) = 0, x \notin S$$

$$0 < \mu_s(x) < 1, x \in \text{partielement à } S$$

Les degrés de propriété, variant de 0 à 1, dépendent des valeurs nettes d'entrées. Ces valeurs sont projetées vers les fonctions d'appartenance durant le processus de fuzzification. C'est pourquoi les degrés de propriétés représentent une quantification de la mesure dans laquelle une valeur nette est partie d'une fonction d'appartenance.

Dans une deuxième étape, les règles linguistiques « Si ... Donc ... », sont déterminées. Ces règles définissent le comportement du système. Finalement, dans la dernière étape, « défuzzification », les valeurs nettes, sont obtenues par la méthode de composition Min/Max ; celle-ci évalue chacune des règles, en prenant la valeur minimale des antécédents. Puis reprend la valeur maximale des conséquences de la même règle. La conséquence qui a la plus grande valeur vraie est celle qui domine la valeur de sortie.

$$\text{Sortie Réelle} = \frac{\sum_{x=a}^b \mu(x)x}{\sum_{x=a}^b \mu(x)} \quad (3.1)$$

Où  $\mu(x)$  est le degré de propriété et  $x$  sa valeur dans la plage des fonctions d'appartenance affectées. Des fonctions d'appartenance de plusieurs types ; triangulaires, gaussiennes, ... etc., peuvent être utilisées pour les entrées et sorties de la méthode de Mamdani. La figure 3.1 représente le diagramme de Mamdani pour le processus de boruration.

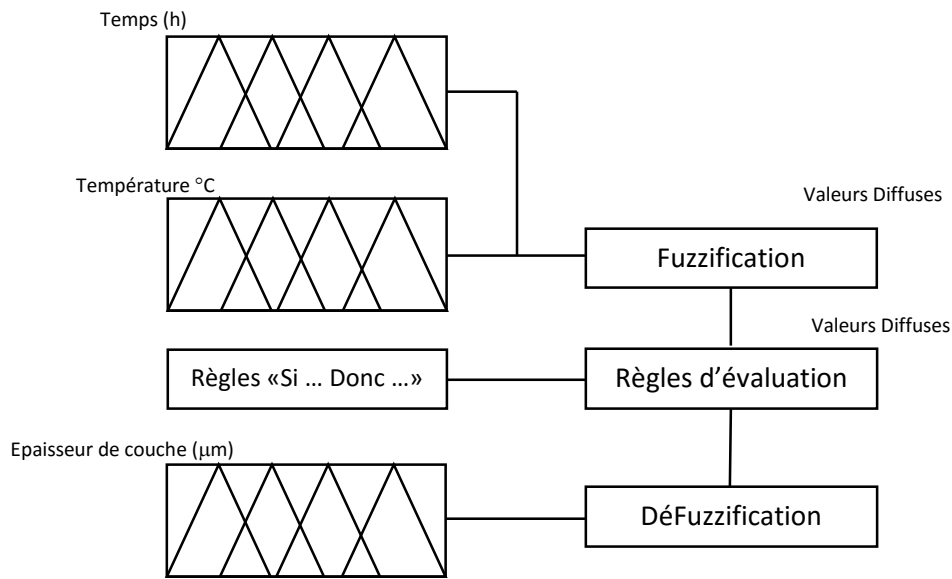


Figure 3.1 Diagramme de Mamdani pour le processus de Boruration

### 3.2.2. Méthode de Takagi-Sugeno

Dans cette section, on aborde la formulation du modèle de Sugeno qui est implémenté dans le système flou-neuronal (neural fuzzy). Le modèle de Sugeno proposé par Takagi-Sugeno et Kang dans un effort de formaliser l'approche systémique de génération des règles d'entrée sorties des séries de données [8]. Une règle typique dans un modèle flou de Sugeno se présente sous la forme

$$\text{Si } x \text{ est } A \text{ ET } y \text{ est } B \text{ ALORS } z=f(x,y)$$

Ou A et B sont des ensembles flous des antécédents ;  $Z=f(x,y)$  est une fonction discrète en conséquence. Habituellement  $f(x,y)$  est polynomiale en ses variables x et y .

La variation qui existe entre la méthode de Mamdani et la méthode de Takagi-Sugeno réside dans la sortie. Ceci peut être observé directement dans l'évaluation de la règle : si A est N et B est M alors  $C=X1+X2$ . Donc, au lieu de prendre une valeur définie dans une fonction d'apparence de sortie, une équation est évaluée pour certaines valeurs afin d'obtenir les valeurs nettes de sortie en utilisant :

$$\text{Sortie Réelle} = \frac{\sum |y=y^i| y^i}{\sum |y=y^i|} \quad (3.2)$$

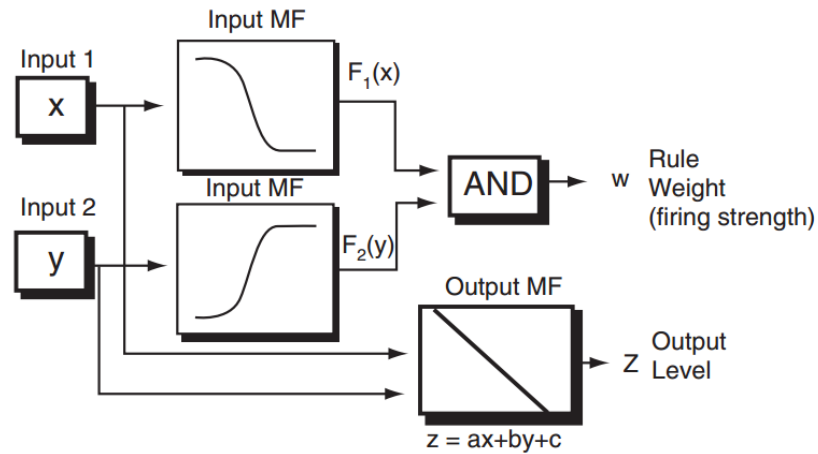


Figure 3.2 Règle de Sugeno [8]

Où  $y = y^i$  est le degré d'apparence de l'antécédent minimal de chaque règle activée, et  $y^i$  est le résultat de l'évaluation de l'équation polynomiale de chaque règle activée. Egalement, la technique du centre de gravité est utilisée pour obtenir la solution. La Figure 3.3 montre le diagramme de Takagi-Sugeno utilisé dans cette étude.

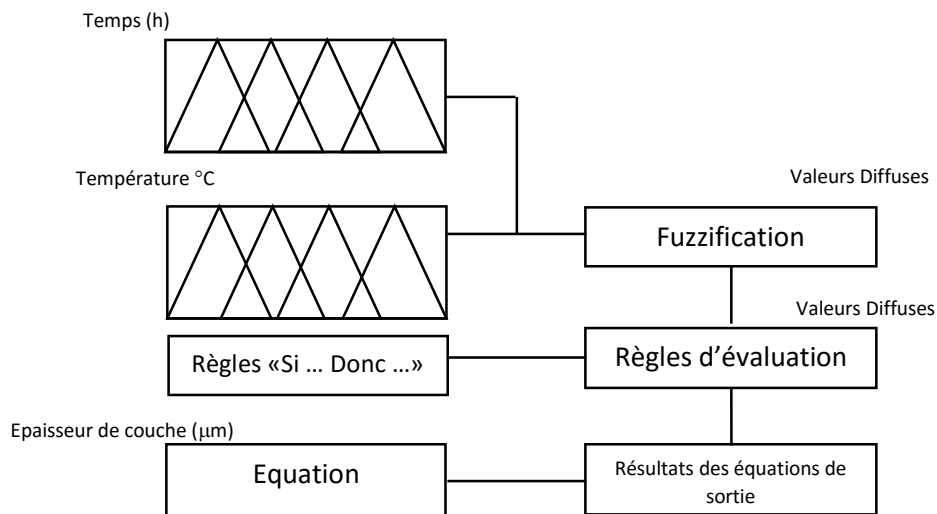


Figure 3.3 Diagramme de Takagi-Sugeno pour le processus de Boruration

### 3.3. Application

Les deux méthodes décrites précédemment ; la méthode de Mamdani et celle de Sugeno sont appliquée aux résultats obtenus lors du traitement de boruration pour modéliser l'évolution de l'épaisseur de couches de borures obtenus pour trois différents types de bain de sels fondus à savoir le bain Borax- $B_4C$  ; Borax-SiC et enfin le bain Borax-Al en fonction des paramètres d'expérimentation qui sont la température de traitement et le temps de maintien variant entre 2 et 6 h dans tous les cas.

L'outil d'analyse de logique floue de Matlab a été utilisé pour tous les calculs présentés dans ce chapitre ; pour les deux méthodes citées précédemment et dans chaque cas on a utilisé deux types de fonctions d'appartenances en entrée triangulaires et gaussienne pour voir quel impact cela peut avoir sur le résultat obtenu. Dans le dernier cas celui du bain Borax-SiC on a ajouté une variante supplémentaire à savoir l'utilisation de fonction d'appartenance de type gaussienne pour la variable de sortie.

Pour la méthode de Sugeno on a gardé comme fonctions d'appartenance d'entrées pour la température et le temps les mêmes fonctions gaussiennes utilisées en chaque cas, le modèle floue de Sugeno d'ordre zéro a été retenu qui correspond à des valeurs constantes pour les fonctions d'appartenances de sorties ; ces valeurs ne sont bien sur autres que les valeurs d'épaisseurs obtenues expérimentalement pour les différents sels fondus.

### 3.3.1. Bain Borax-B<sub>4</sub>C

Les deux méthodes décrites précédemment sont appliquée aux résultats du traitement de boruration pour modéliser l'évolution de l'épaisseur de couches de borures obtenues dans le cas du bain Borax-B<sub>4</sub>C en fonction des paramètres d'expérimentation à savoir la température de traitement qui dans ce cas varie entre 800(°C) et 950(°C) avec un le temps de maintien variant entre 2 et 6h.

Les données utilisées dans ce cas sont représentées sur le tableau 3.1

Tableau 3.1 Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-B<sub>4</sub>C : épaisseur de couche en fonction du temps et de la température de traitement

	2(h)	4(h)	6(h)
800(°C)	25 μm	50 μm	75 μm
850(°C)	45 μm	70 μm	95 μm
900(°C)	70 μm	110 μm	145 μm
950(°C)	105 μm	170 μm	200 μm

#### 3.3.1.1. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

La figure 3.4 schématise l'application de la méthode de Mamdani aux résultats de diffusion obtenues par bain de Borax-B<sub>4</sub>C les deux ensembles d'entrées sont la température (°C) et la durée de traitement (h) l'ensemble de sortie étant l'épaisseur de couche obtenue (μm).

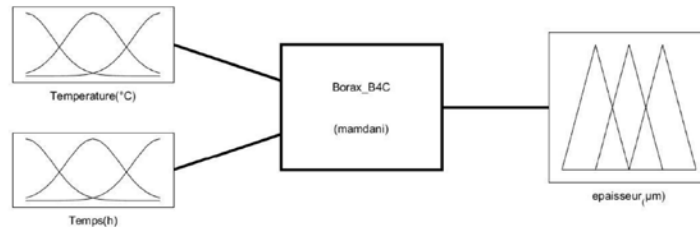


Figure 3.4 Schématisation de la Méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

3.3.1.1.1. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C avec fonctions d'appartenance triangulaires.

En premier lieu des fonctions triangulaires, sont utilisées pour décrire les fonctions d'appartenance des ensembles d'entrées comme représentées sur les deux figures 3.5 et 3.6

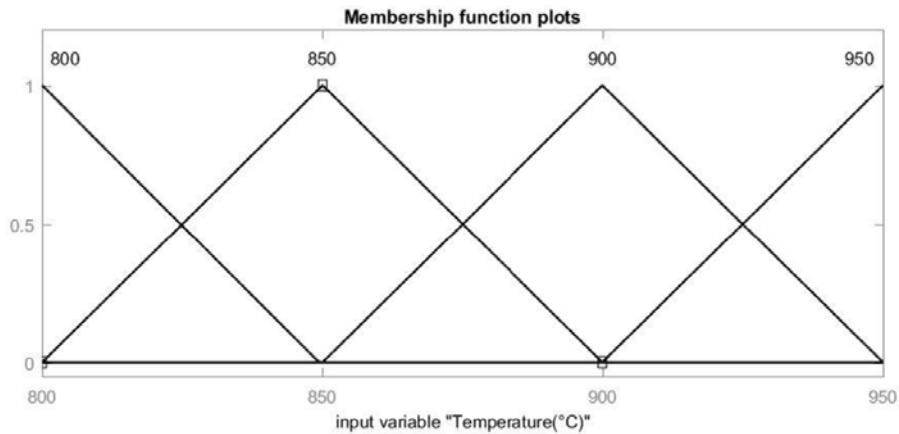


Figure 3.5 Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée : Température (°C)

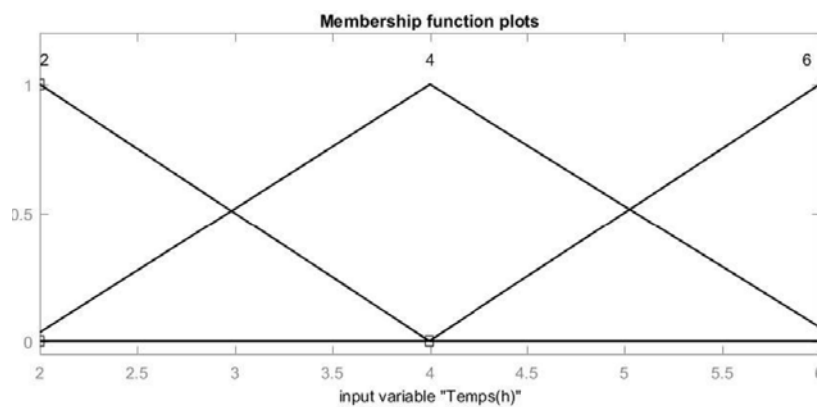


Figure 3.6 Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée : Temps (h)

Les fonctions d'appartenances pour l'ensemble de sortie sont aussi représentées par des fonctions triangulaires comme montrées sur la figure 3.7

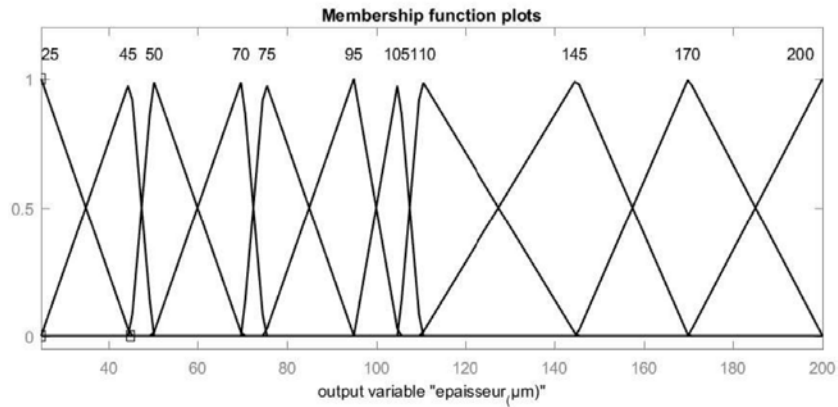


Figure 3.7 Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie : épaisseur ( $\mu\text{m}$ )

Le tableau 3.2 décrit les règles utilisées pour le cas du bain de bain Borax- $\text{B}_4\text{C}$

Tableau 3.2 Description de règles pour le bain Borax- $\text{B}_4\text{C}$

N°	Description de règle
1	<b>SI</b> (Température est 800) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 25
2	<b>SI</b> (Température est 800) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 50
3	<b>SI</b> (Température est 800) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 75
4	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 45
5	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 70
6	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 95
7	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 70
8	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 110
9	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 145
10	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 105
11	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 170
12	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 200

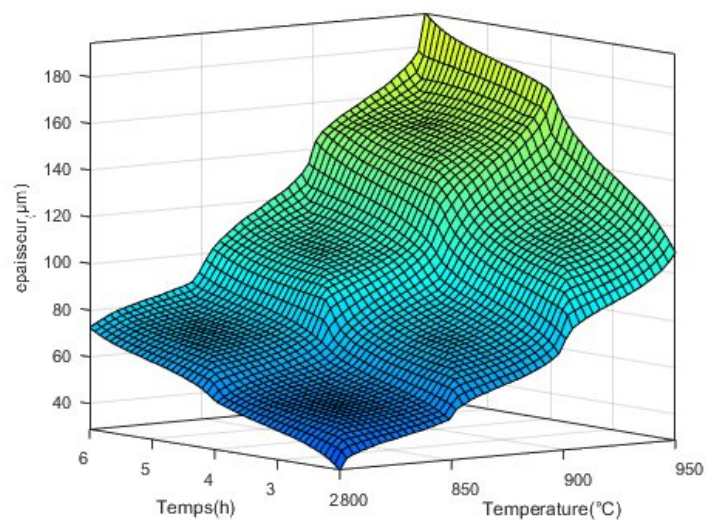


Figure 3.8 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Mamdani entrées triangulaires pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

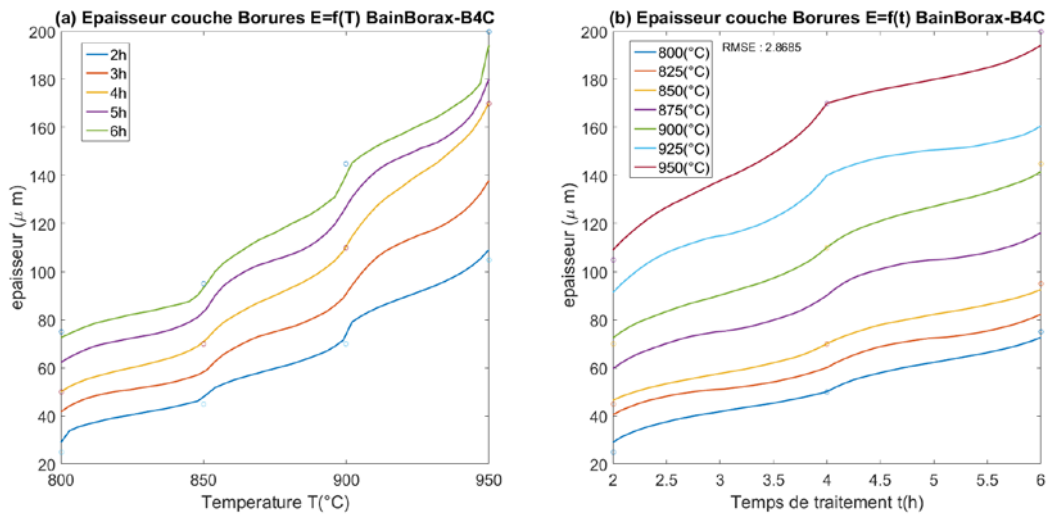


Figure 3.9 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani avec entrées triangulaire pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

### 3.3.1.1.2. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C avec fonctions d'appartenance Gaussiennes

En second lieux nous avons utilisé des fonctions de gauss pour décrire les fonctions d'appartenance des ensembles d'entrées qui sont la température de traitement et le temps de maintien.

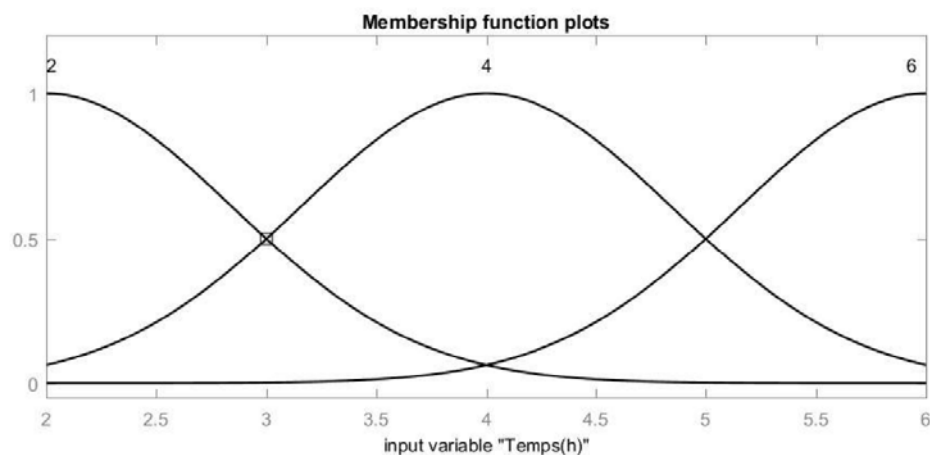


Figure 3.10 Fonctions d'appartenances gaussiennes d'entrée : Temps (h)

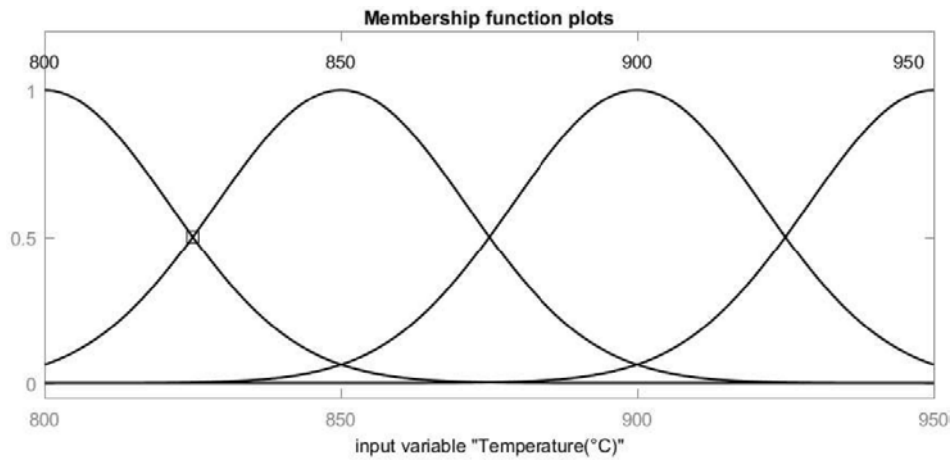


Figure 3.11 Fonctions d'appartenance gaussiennes d'entrée : Température (°C)

En utilisant la même fonction d'appartenance pour l'ensemble de sortie à savoir des fonctions triangulaires et les mêmes règles décrites au tableau 3.2 on trouve la représentation figure 3.12 qui donne l'évolution de l'épaisseur de couche ( $\mu\text{m}$ ) en fonction des entrées Température de traitement (°C) et temps de traitement (h).

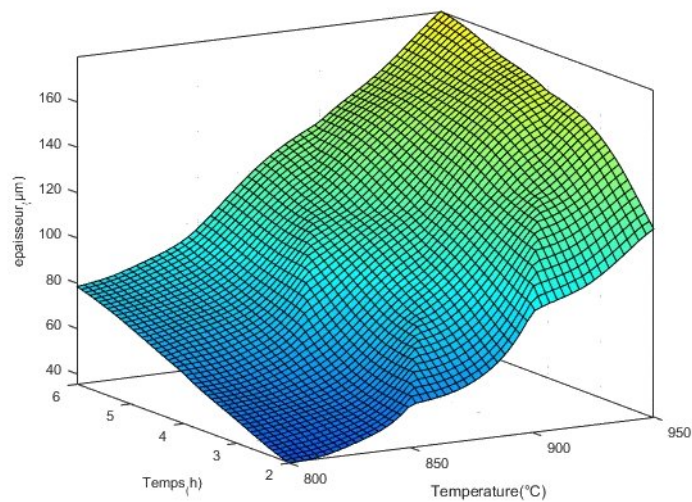


Figure 3.12 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Mamdani entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

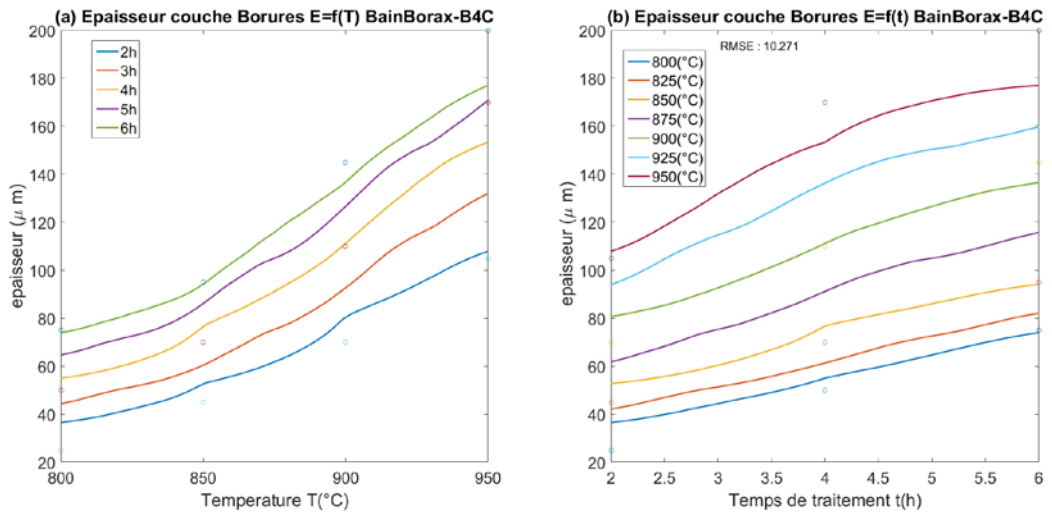


Figure 3.13 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

### 3.3.1.1.3. Méthode de Sugeno pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

Pour l'application de la méthode de Sugeno les fonctions d'appartenance d'entrées de température et de temps retenues sont les fonctions gaussiennes utilisées en 3.3.1.1.2.

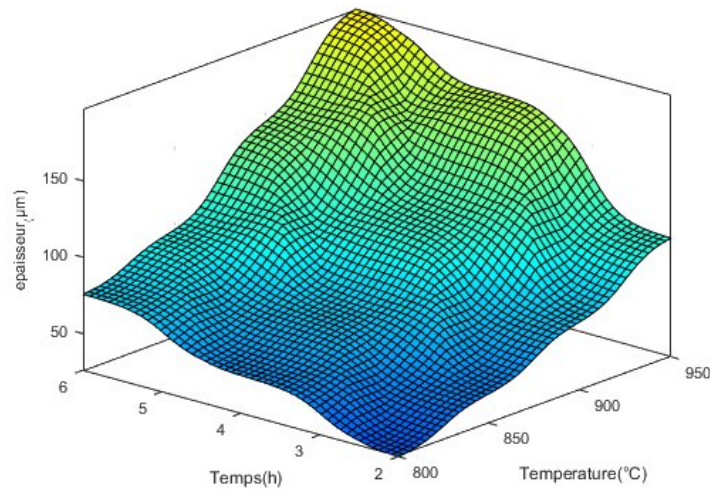


Figure 3.14 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Sugeno, entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

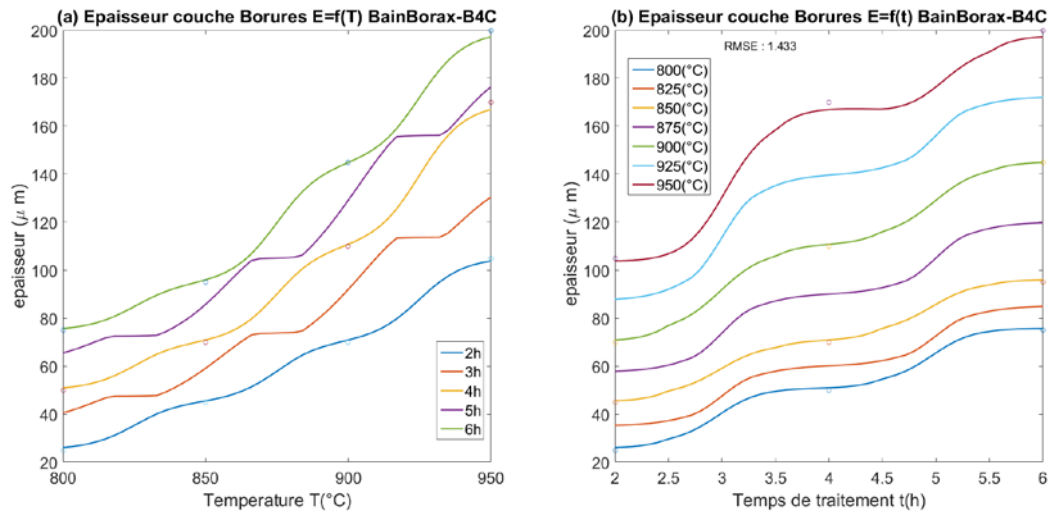


Figure 3.15 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Sugeno, entrées gaussiennes pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

### 3.3.2. Bain Borax-Al

Les deux méthodes Mamdani et Sugeno sont appliquées aux résultats expérimentaux pour modéliser l'évolution de l'épaisseur de couches de borures obtenue dans le cas du Borax-Al en fonction des paramètres d'expérimentation ; la température de traitement (de 850(°C) à 1000(°C)) et le temps de maintien (de 2 et 6h). Les données utilisées dans ce cas sont représentées sur le tableau 3.3 :

Tableau 3.3 Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-Al : épaisseur de couche en fonction du temps et de la température

	2(h)	4(h)	6(h)
850(°C)	25 μm	55 μm	80 μm
900(°C)	45 μm	85 μm	110 μm
950(°C)	65 μm	120 μm	170 μm
1000(°C)	100 μm	180 μm	245 μm

#### 3.3.2.1. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-Al

La figure 3.16 schématise l'application de la méthode de Mamdani aux résultats de diffusions obtenues par bain de Borax-Al, les deux ensembles d'entrées sont la

température (°C) et la durée de traitement (h) l'ensemble de sortie étant l'épaisseur de couche obtenue (µm).

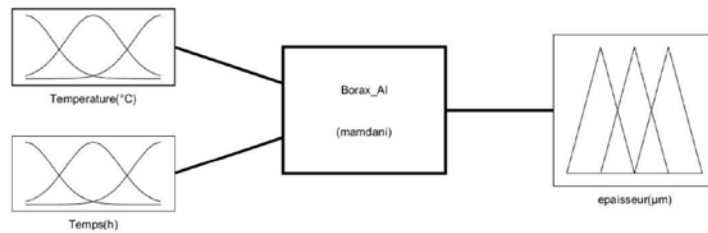


Figure 3.16 Schématisation de la Méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-Al

### 3.3.2.1.1. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-Al avec fonctions d'appartenance triangulaires.

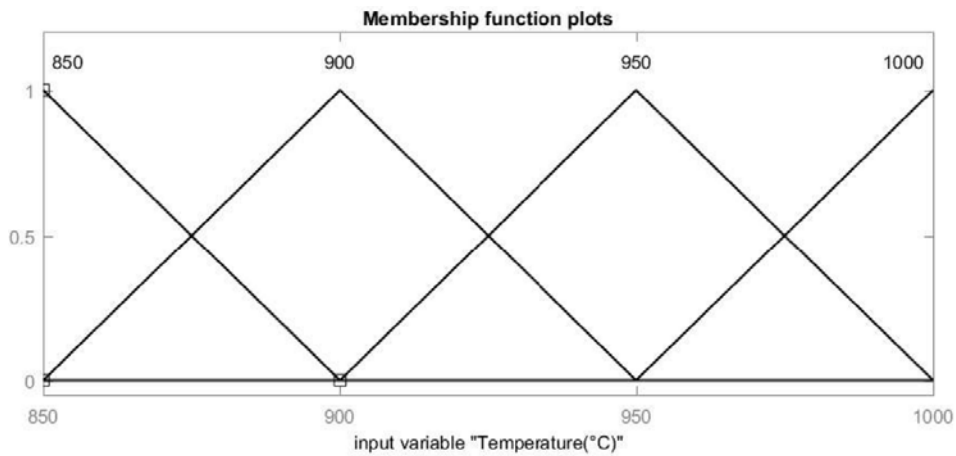


Figure 3.17 Fonction d'appartenance triangulaires d'entrée : Température (°C)

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les mêmes que les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans la section 3.3.1.1.1 c.à.d. des fonctions triangulaires pour un temps variant entre 2 et 6h

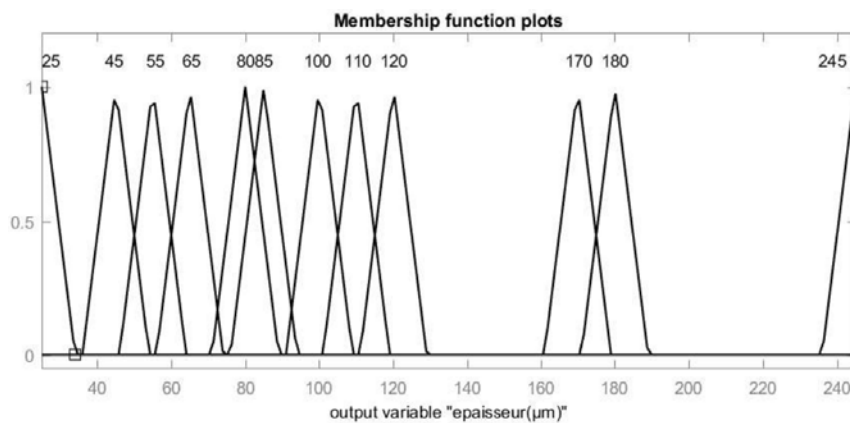


Figure 3.18 Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie : épaisseur (µm)

Tableau 3.4 Description de règles Si... Donc ... pour le bain Borax-Al

N°	Description de règle
1	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 25
2	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 55
3	<b>SI</b> (Température est 850) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 80
4	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 45
5	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 85
6	<b>SI</b> (Température est 900) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 110
7	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 65
8	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 120
9	<b>SI</b> (Température est 950) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 170
10	<b>SI</b> (Température est 1000) <b>ET</b> (Temps est 2) <b>DONC</b> épaisseur est 100
11	<b>SI</b> (Température est 1000) <b>ET</b> (Temps est 4) <b>DONC</b> épaisseur est 180
12	<b>SI</b> (Température est 1000) <b>ET</b> (Temps est 6) <b>DONC</b> épaisseur est 245

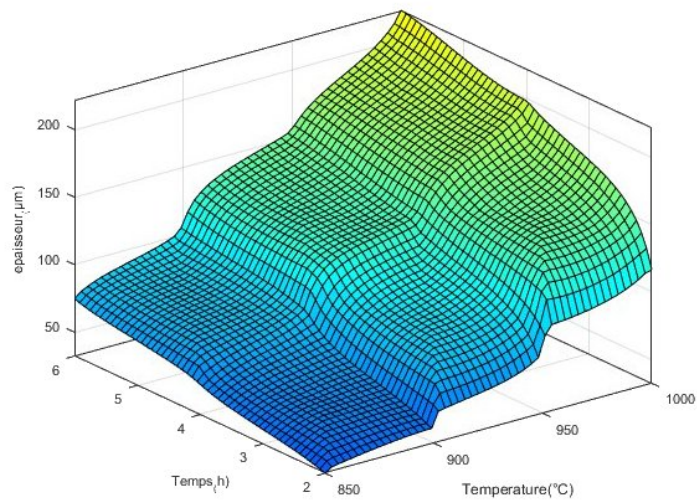


Figure 3.19 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps de traitement  
Méthode Mamdani avec entrées triangulaires pour le bain Borax-Al

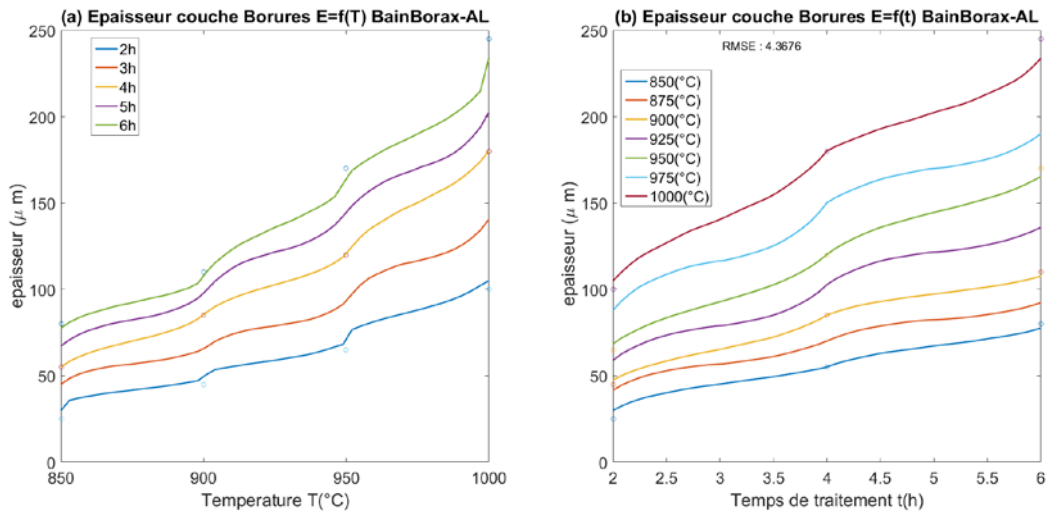


Figure 3.20 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani avec entrées triangulaires pour le bain Borax-Al

### 3.3.2.1.2. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-Al avec fonctions d'appartenances gaussiennes

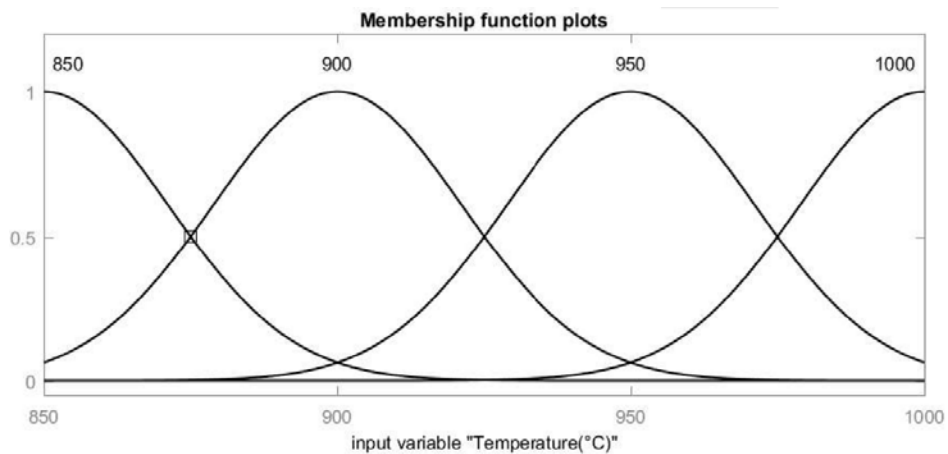


Figure 3.21 Fonctions d'appartenances gaussienne d'entrée : Température (°C)

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les mêmes que celle de la section 3.3.1.1.2. C.à.d. des fonctions gaussiennes pour un temps variant entre 2 et 6h

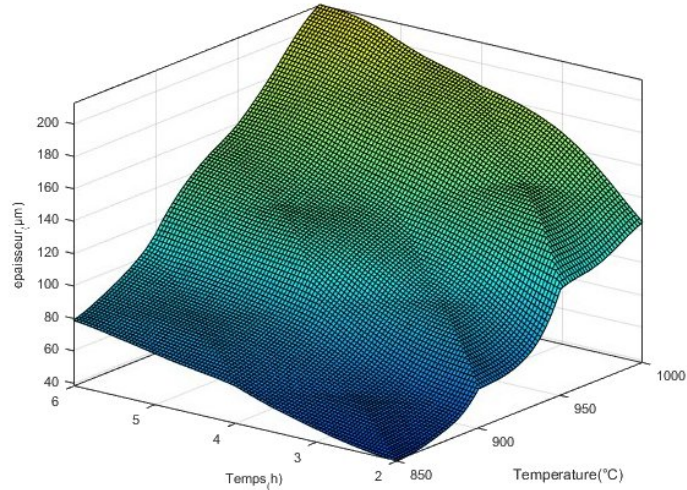


Figure 3.22 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement

Méthode Mamdani avec entrées gaussiennes pour le bain Borax-Al

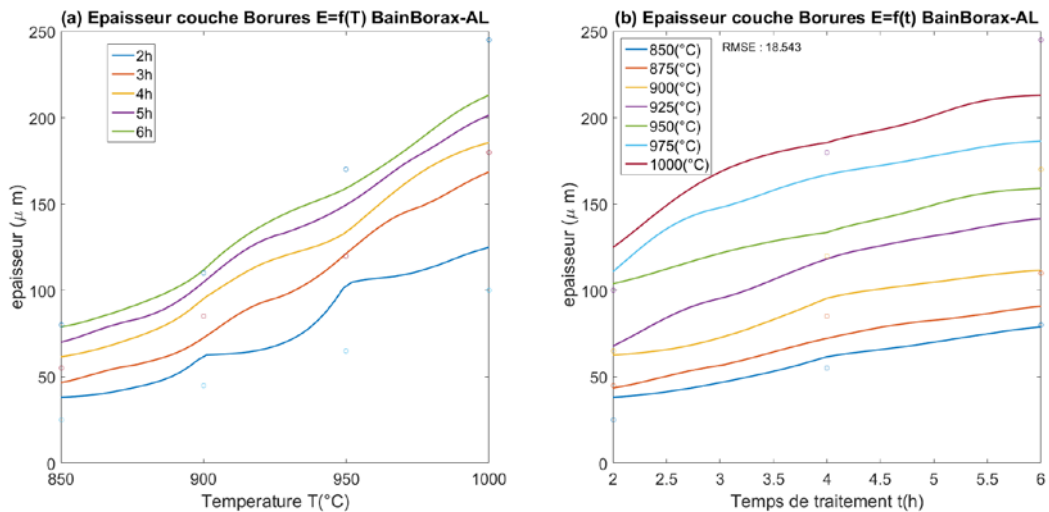


Fig3.23 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement

(b) Méthode Mamdani avec entrées Gaussiennes pour le bain Borax-AL

### 3.3.2.1.3. Méthode de Sugeno pour le bain Borax-Al

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les mêmes que celle de la section 3.3.2.1.2 c.à.d. des fonctions gaussiennes pour un temps variant entre 2 et 6h, et une température variant entre 850(°C) et 1000 (°C).

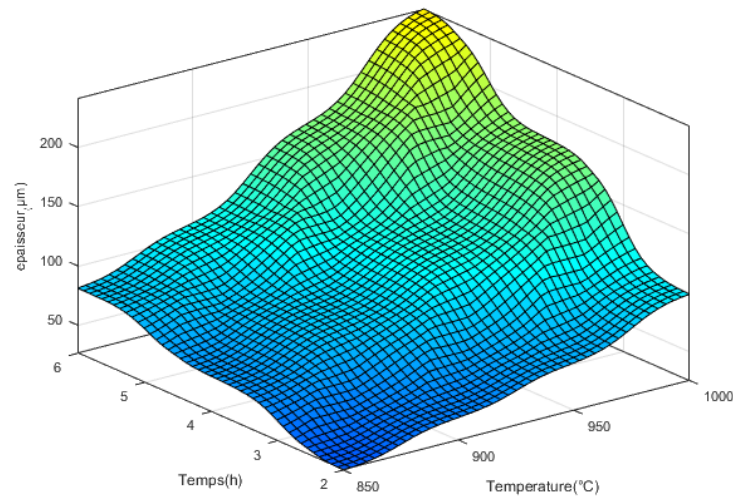


Figure 3.24 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement Méthode Sugeno avec entrées gaussiennes pour le bain Borax-Al

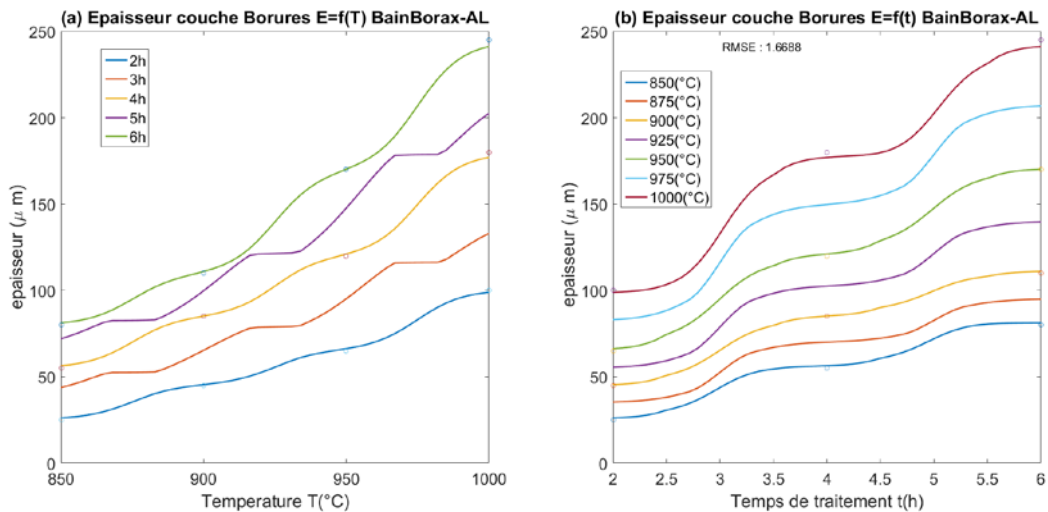


Figure 3.25 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Sugeno avec entrées Gaussiennes pour le bain Borax-AL

### 3.3.3. Bain Borax-SiC

Comme pour les deux cas précédents ; les deux méthodes Mamdani et Sugeno sont appliquée aux résultats obtenues lors du traitement de boruration pour modéliser l'évolution de l'épaisseur de couches de borures obtenu dans le cas du Borax-SiC en fonction des paramètres d'expérimentation à savoir la température de traitement qui dans ce cas varient entre 900(°C) et 1050(°C) et le temps de maintien entre 2 et 6h. Les données utilisées dans ce cas sont représentés sur le tableau 3.5

**Tableau 3.5** Données expérimentales utilisées pour le cas du bain Borax-SiC : épaisseur de couche en fonction du temps et de la température

	900°C	950°C	1000°C	1050°C
2(h)	15	30	45	80
4(h)	35	65	105	160
6(h)	50	100	160	245

3.3.3.1. Méthode de Mamdani pour Borax-SiC

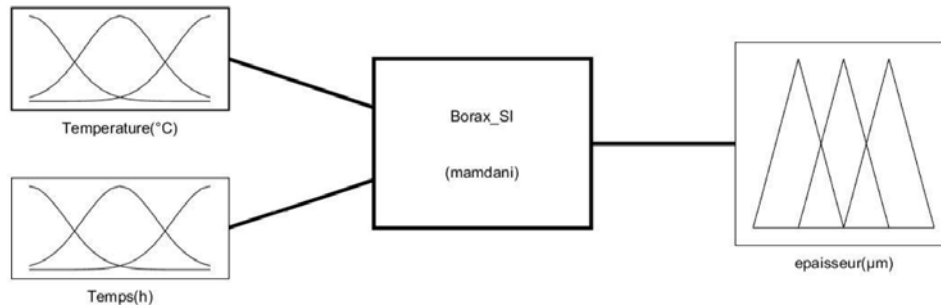


Figure 3.26 Schématisation de la méthode de Mamdani appliquée pour le bain Borax-SiC

3.3.3.1.1. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-SiC avec fonctions d'appartenance triangulaires

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas les fonctions triangulaires utilisées dans la section 3.3.1.1.1 pour un temps variant entre 2 et 6h

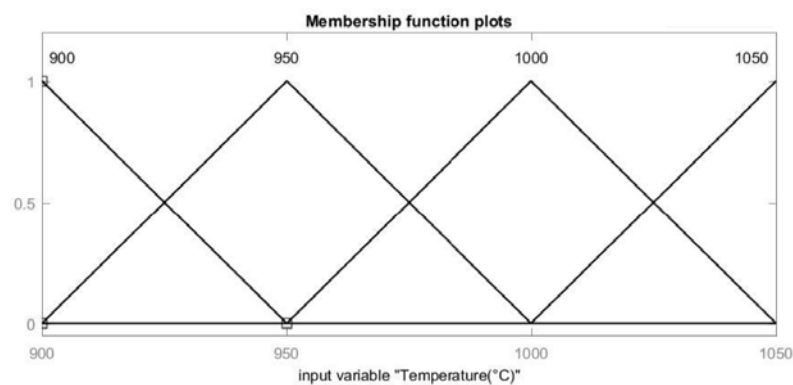


Figure 3.27 Fonctions d'appartenances triangulaires d'entrée : Température (°C)

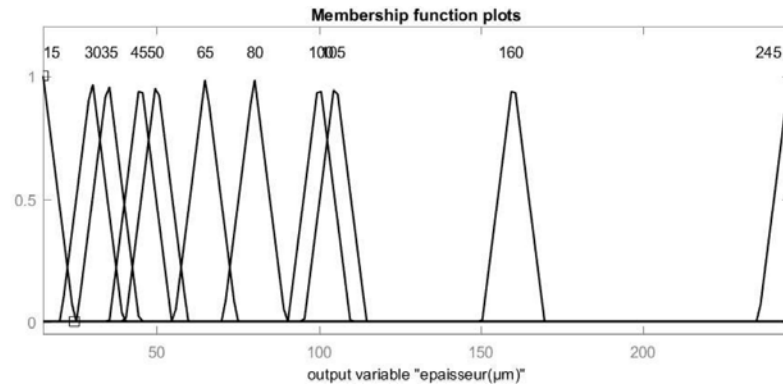


Figure 3.28 Fonctions d'appartenances triangulaires de sortie : épaisseur (μm)

Tableau 3.6 Description de règles pour le bain Borax SiC

N°	Description de règle		
1	SI (Température est 900)	ET (Temps est 2)	DONC épaisseur est 15
2	SI (Température est 900)	ET (Temps est 4)	DONC épaisseur est 35
3	SI (Température est 900)	ET (Temps est 6)	DONC épaisseur est 50
4	SI (Température est 950)	ET (Temps est 2)	DONC épaisseur est 30
5	SI (Température est 950)	ET (Temps est 4)	DONC épaisseur est 65
6	SI (Température est 950)	ET (Temps est 6)	DONC épaisseur est 100
7	SI (Température est 1000)	ET (Temps est 2)	DONC épaisseur est 45
8	SI (Température est 1000)	ET (Temps est 4)	DONC épaisseur est 105
9	SI (Température est 1000)	ET (Temps est 6)	DONC épaisseur est 160
10	SI (Température est 1050)	ET (Temps est 2)	DONC épaisseur est 80
11	SI (Température est 1050)	ET (Temps est 4)	DONC épaisseur est 160
12	SI (Température est 1050)	ET (Temps est 6)	DONC épaisseur est 245

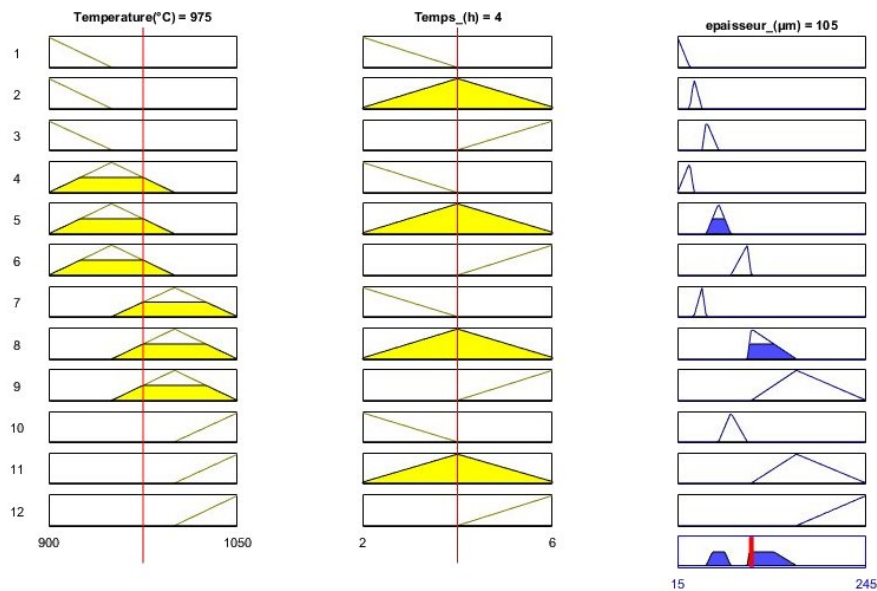


Figure 3.29 Représentation graphique des Règles avec résultats pour le bain Borax-SiC

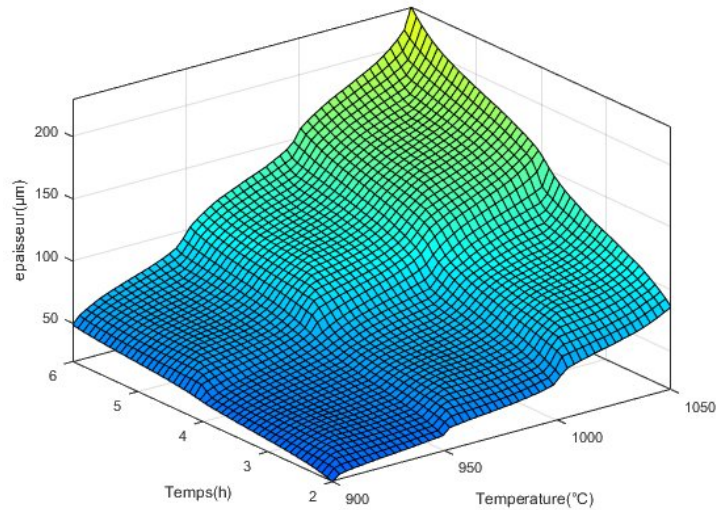


Figure 3.30 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance triangulaires pour le bain Borax-SiC

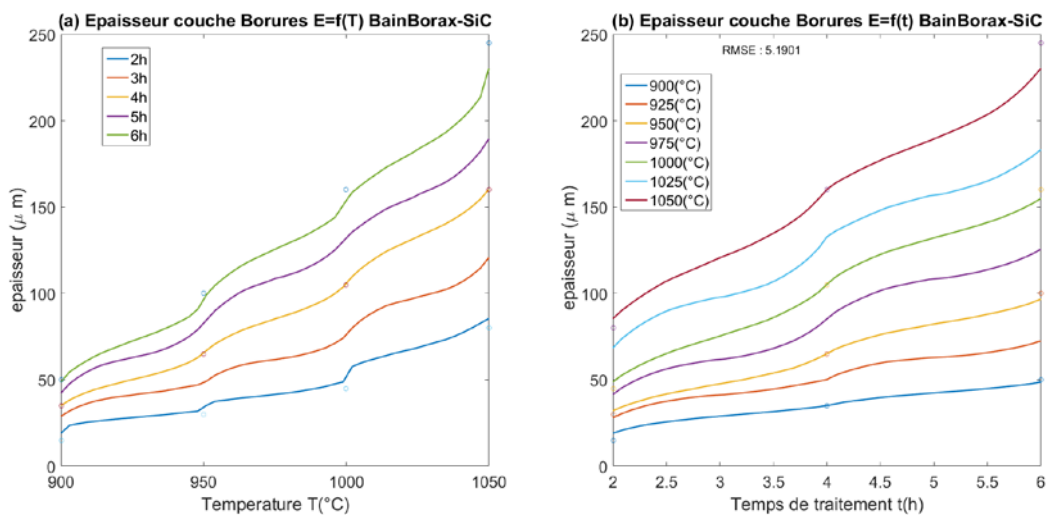


Figure 3.31 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance triangulaires pour le bain Borax-SiC

### 3.3.3.1.2. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-SiC avec fonctions d'appartenance gaussiennes

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les fonctions gaussiennes utilisées dans la section 3.3.1.1.2 pour un temps variant entre 2 et 6h

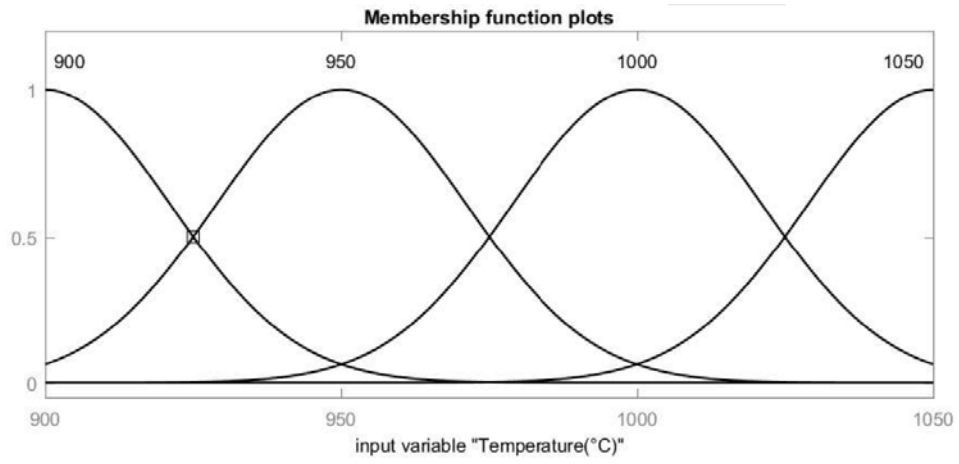


Figure 3.32 Fonctions d'appartenances gaussiennes d'entrée : Température (°C)

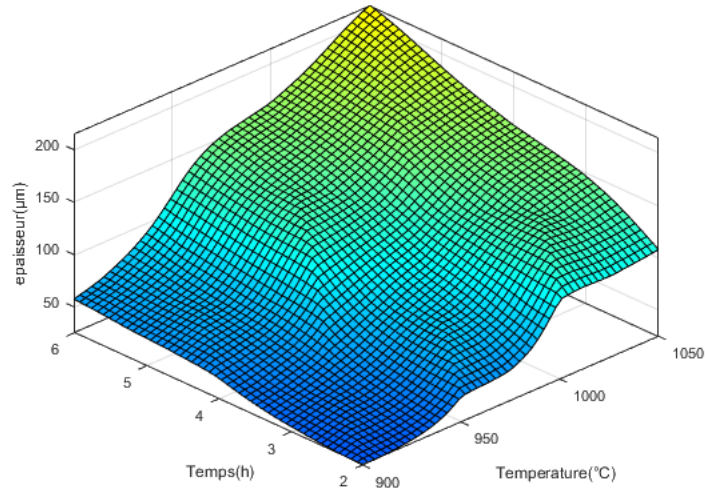


Figure 3.33 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance gaussiennes pour le bain Borax-SiC

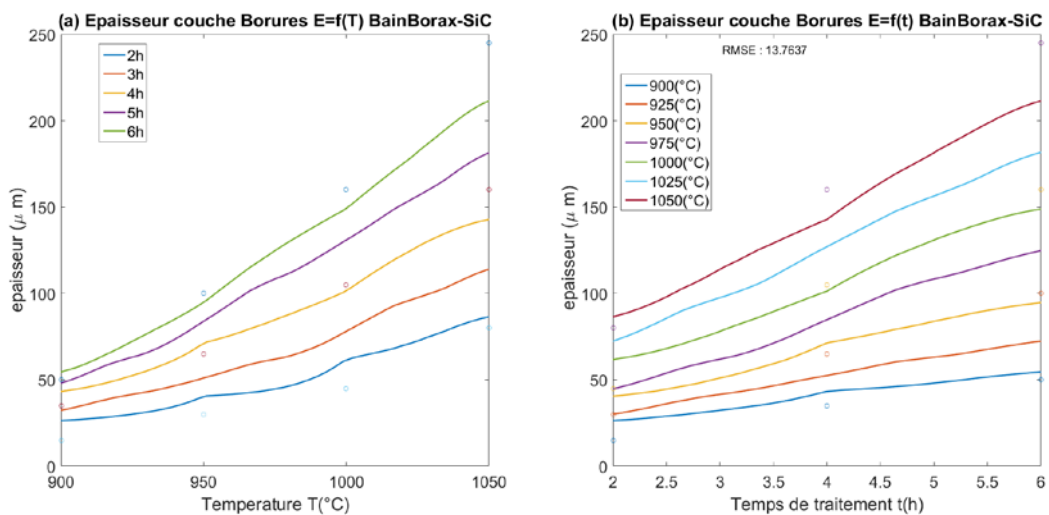


Figure 3.34 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani avec fonctions d'appartenance gaussiennes pour le bain Borax-SiC

### 3.3.3.1.3. Méthode de Mamdani pour le bain Borax-SiC avec fonctions d'appartenance en entrées/sorties gaussiennes

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les mêmes fonctions utilisées dans la section 3.3.1.1.2 pour un temps variant entre 2 et 6h.

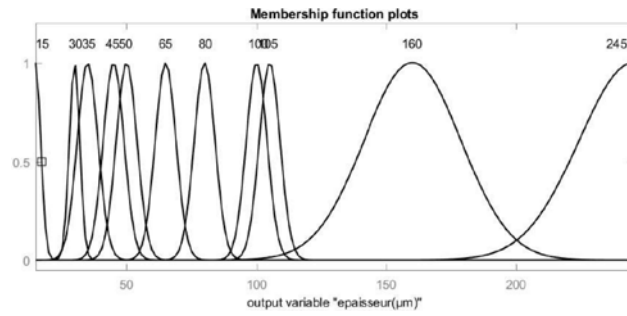


Figure 3.35 Fonctions d'appartenance gaussiennes de sortie : épaisseur ( $\mu\text{m}$ )

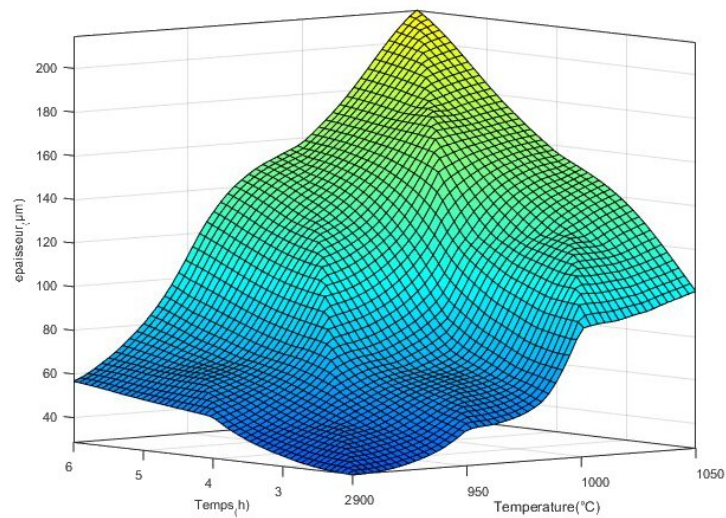


Figure 3.36 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Mamdani avec entrées sorties gaussiennes pour le bain Borax-SiC

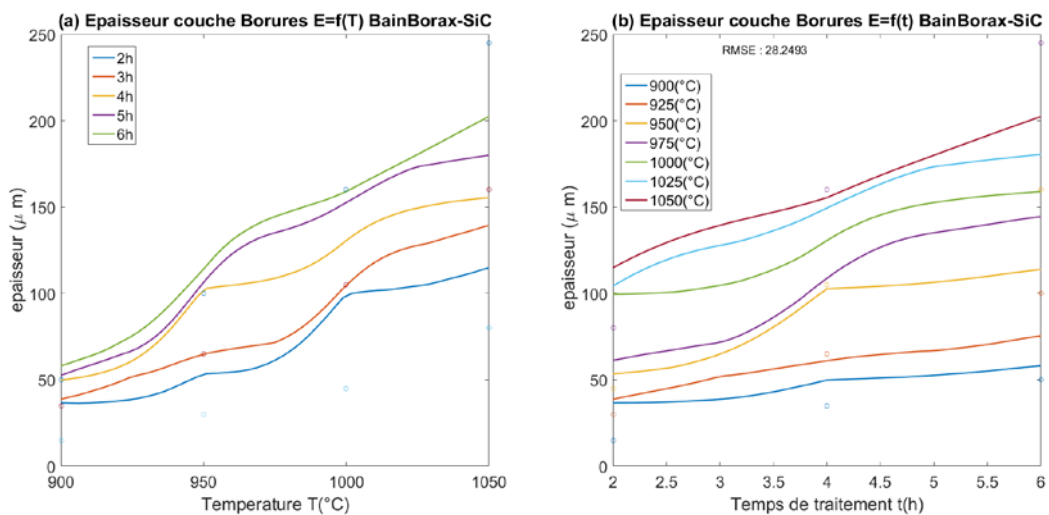


Figure 3.37 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Mamdani entrées sorties gaussiennes pour le bain Borax-SiC

3.3.3.1.4. Méthode de Sugeno pour le Bain Borax-SiC

Les fonctions d'appartenance en entrées pour le temps utilisées dans ce cas sont les mêmes que celle de la section 3.3.3.1.2. C.à.d. des fonctions gaussiennes pour un temps variant entre 2 et 6h, et une température variant entre 900 °C et 1050 °C.

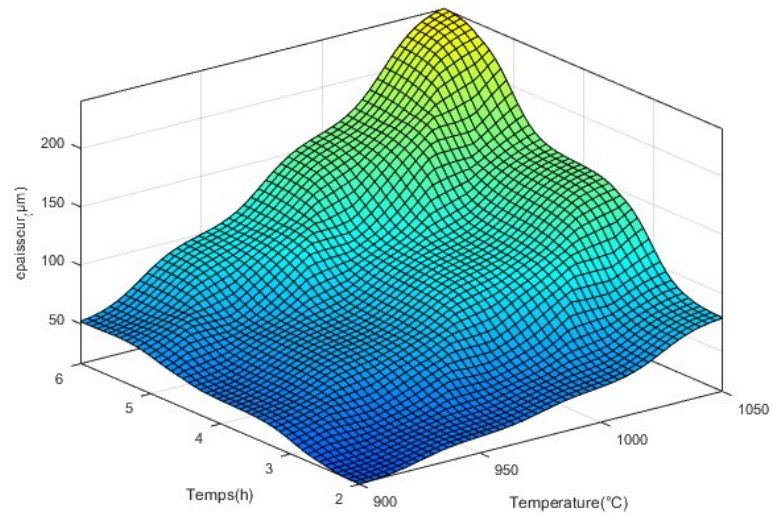


Figure 3.38 Epaisseur de couche en fonction de la température et du temps traitement  
Méthode Sugeno entrées gaussiennes pour le bain Borax-SiC

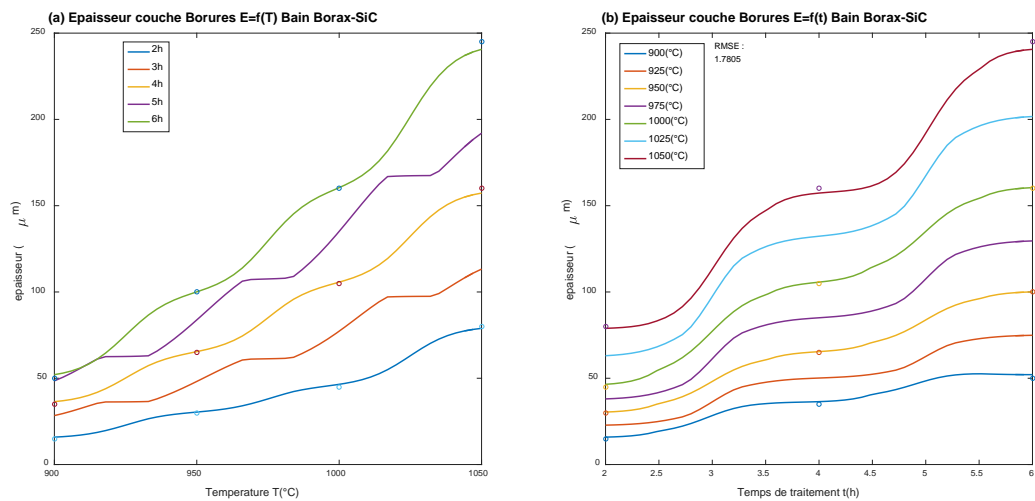


Figure 3.39 Epaisseur de couche en fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) Méthode Sugeno entrées gaussiennes pour le bain Borax-SiC

### 3.4. Conclusion

En inspectant les différentes erreurs quadratiques moyennes RMSE calculées d'après :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y - y_i)^2}$$

Où n représente le nombre de valeurs expérimentales utilisées dans chaque cas ; ce qui correspond à douze (12) pour les trois bains, y la valeur calculée et  $y_i$  la valeur expérimentale de l'épaisseur de couche utilisée comme entrée.

Pour les différents cas de bains de sels fondus les valeurs ayant les plus faibles valeurs des Erreurs quadratiques moyennes (RMSE) sont celles utilisant la méthode de Takagi-Sugeno ;

Tableau 3.7 Erreurs quadratiques moyennes en fonction de la méthode utilisée

	Bain Borax-B <sub>4</sub> C	Bain Borax-Al	Bain Borax-SiC
Mamdani-Linéaire	2.8685	4.3676	5.1901
Mamdani-Gauss	10.271	18.543	13.7637
Takagi-Sugeno	1.4333	1.6688	1.7805

L'utilisation de fonction triangulaires comme fonction d'appartenance pour les entrées et sorties donnent de meilleurs résultats que l'utilisation des fonctions de gauss. On peut conclure que les meilleurs résultats sont obtenus en utilisant la logique floue avec la méthode de Takagi-Sugeno pour la modélisation de la croissance de la couche de borure.

3.5. Références

- [1]. T.Malinova, S.Malinov, N.Pantev, Surf. Coat. Technol 135 (2001) 258.
- [2]. K.Genel, I.Ozbek, A.Kurt, C.Bindal, Surf. Coat. Technol 160 (2002) 38.
- [3]. I.Campos, M.Islas, E.Gonzalez, P.Ponce, G.Ramirez, Surf. Coat. Technol 201 (2006) 2717.
- [4]. B.Kosso Fuzzy Engineering, Prentice Hall 1997.
- [5]. L.Tsoukalas, R.Uhrig, Fuzzy and Neuronal Approaches in Engineering, John Wiley & Sons, 1997
- [6]. P.H. Winston Artificial intelligence Addison-Wesley, 1994.
- [7]. L.Zadeh, Fuzzy Sets Inform. Contr. 8 (3) (1965) 338.
- [8] S.N.Sivanandam, S.Sumathi and S.N.Deepa Introduction to Fuzzy Logic using MATLAB Springer-Verlag 2007

# **Chapitre IV**

## **Approximation au sens des éléments Finis**



Ou tout simplement

$$U(x) = \langle N \rangle \{V\}$$

Avec

$$\langle N \rangle = \langle 1, x, x^2, \dots, x^{n-1} \rangle [A]^{-1}$$

Comme  $U(x_i) = V_i$

Il découle de 3 que 
$$N_j(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

Ce type d'approximation est appelé : approximation nodale. Les paramètres  $V_i$  sont les variables nodales et les fonctions  $N_i(x)$  sont les fonctions d'interpolation nodales ou fonctions de forme.

#### 4.2. Approximation par Eléments Finis :

La fonction construite dans la section précédente est une fonction approchée  $U$  de  $V$  sur tout son domaine  $\Omega: [x_1, x_n]$ . Si on suppose maintenant que le nombre de points  $x_i$  soit très important. Cela peut aboutir à des phénomènes d'instabilité. Pour éviter cela, on construit la fonction  $U$  par morceau ; On subdivise le domaine  $\Omega$  en un nombre fini de sous domaines  $\Omega^e$  sur lequel la construction de  $U$  est simplifiée. Dans ce cas, nous faisons tout simplement une approximation par éléments finis. La méthode d'approximation par éléments finis nécessite les étapes suivantes :

- Discrétiser le domaine  $\Omega$  en un nombre fini de sous domaines ou éléments,  $\Omega^e$
- Définir une fonction approchée  $U^e(x)$  différente sur chaque élément par la méthode d'approximation nodale.

Cette approximation nodale sur chaque élément ne fait intervenir que les variables nodales attachée à des nœuds situées sur  $\Omega^e$  et sur sa frontière.

Les fonctions approchées  $U^e(x)$  sur chaque élément doivent être construites de manière à être continues sur  $\Omega^e$ , et elles doivent aussi satisfaire des conditions de continuité entre différents éléments. Une fois toutes les fonctions construites, la fonction approchée  $U(x)$  est obtenue par [5]

$$U(x) = \sum_e U^e(x) \quad (4.4)$$

**Construction des fonctions d'interpolation nodales**

Deux principes doivent être respectés lors de la construction des fonctions d'interpolation nodales :

- Principe de compatibilité Principe
- Principe de l'état complet

Ceci pour des raisons de convergence de la solution quand on augmente le nombre d'éléments et/ou on diminue la taille leurs taille (taille d'un élément tendant vers zéro)

Pour un problème plan ou le domaine  $\Omega$  est défini par un repère orthonormé ou  $\xi$  et  $\eta$  représentent les coordonnées respectives suivant les deux directions, Pour la construction de  $U(\xi, \eta)$  , on recherche une expansion polynomiale qui possède le plus grand degré de base polynomiale complète. Pour cela on utilise le triangle de pascal qui donne le nombre de monômes d'un polynôme complet de degré n en  $\xi$  et  $\eta$  (ou x et y) celui-ci est donné par :

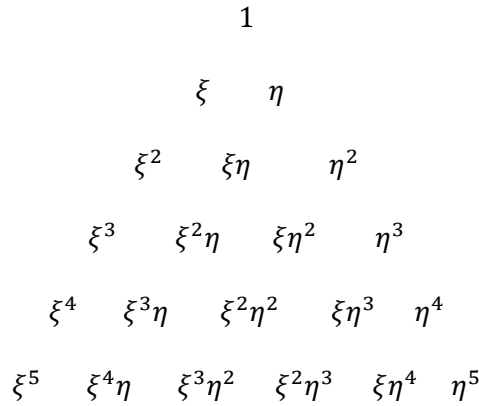


Figure 4.1 Triangle de pascal pour la construction de base polynomiale [5]

Exemple de polynômes complets de degré 1, 2 et 3 :

$$P_1(\xi, \eta) = \alpha_1 + \alpha_2\xi + \alpha_2\eta$$

$$P_2(\xi, \eta) = \alpha_1 + \alpha_2\xi + \alpha_3\eta + \alpha_4\xi\eta + \alpha_5\xi^2 + \alpha_6\eta^2$$

$$P_3(\xi, \eta) = \alpha_1 + \alpha_2\xi + \alpha_3\eta + \alpha_4\xi\eta + \alpha_5\xi^2 + \alpha_6\eta^2 + \alpha_7\xi^2\eta + \alpha_8\xi\eta^2 + \alpha_9\xi^3 + \alpha_{10}\eta^3$$

Donc, dans notre cas nous avons besoin de douze termes, nous sommes obligés d'utiliser une base polynomiale incomplète car  $P_4(\xi, \eta)$  en contient quinze.

U doit être cubique en  $\xi$  et quadratique en  $\eta$  ce qui donne :

$$U(\xi, \eta) = \alpha_1 + \alpha_2\xi + \alpha_3\eta + \alpha_4\xi\eta + \alpha_5\xi^2 + \alpha_6\xi^2\eta + \alpha_7\eta^2 + \alpha_8\xi\eta^2 + \alpha_9\xi^2\eta^2 + \alpha_{10}\xi^3 + \alpha_{11}\xi^3\eta + \alpha_{12}\xi^3\eta^2$$

Maintenant que U satisfait les critères cités précédemment on peut écrire :

$$U(\{\xi\}) = \langle P_1(\{\xi\}), P_2(\{\xi\}), \dots, P_{12}(\{\xi\}) \rangle \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{12} \end{Bmatrix}$$

$$U(\{\xi\}) = \langle P_i(\{\xi\}) \rangle \{\alpha\} \quad (4.5)$$

L'ensemble des fonctions  $P_i(\{\xi\})$  constitue la base polynomiale de l'approximation. Son nombre de termes doit être égale au nombre de variables nodales ou de degrés de liberté de l'élément.

En chaque point d'interpolation de coordonnées  $\{\xi\}_i$ , la fonction  $U(\{\xi\})$  prend la valeur  $F_i$  de la fonction exacte F qui dans notre cas est l'épaisseur de couche. Nous avons donc :

$$\begin{Bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} P_1(\{\xi\}_1) & P_1(\{\xi\}_2) & \dots & P_1(\{\xi\}_{12}) \\ P_2(\{\xi\}_1) & P_2(\{\xi\}_2) & \dots & P_2(\{\xi\}_{12}) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ P_{12}(\{\xi\}_1) & P_{12}(\{\xi\}_2) & \dots & P_{12}(\{\xi\}_{12}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{12} \end{Bmatrix} \quad (4.6)$$

Ou tout simplement  $\{F\} = [P]\{\alpha\}$

Il ne faut pas que [P] soit singulière, sinon il ne serait pas possible d'exprimer les paramètres  $\{\alpha\}$  en fonction des valeurs nodales de la manière suivante

$$\{\alpha\} = [P]^{-1}\{F\} \quad (4.7)$$

Ceci dépend du choix de la base polynomiale et des coordonnées  $\{\xi\}_i$  de l'élément choisi.

En reportant (4.7) dans (4.5) on a :

$$U(\{\xi\}) = \langle P(\{\xi\}) \rangle [P]^{-1}\{F\}$$

Qui peut être écrite sous la forme

$$U(\{\xi\}) = \langle N(\{\xi\}) \rangle \{F\} \quad (4.8)$$

Avec

$$\langle N(\{\xi\}) \rangle = \langle P(\{\xi\}) \rangle [P]^{-1} \quad (4.9)$$

### 4.3. Application

#### 4.3.1. Bain Borax-B<sub>4</sub>C

Tableau 4.1 : Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-B<sub>4</sub>C

	800°C	850°C	900°C	950°C
2(h)	25	45	70	105
4(h)	50	70	110	170
6(h)	75	95	145	200

Le modèle obtenu en appliquant l'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain de Borax-B<sub>4</sub>C est donné par l'équation 4.10 :

$$e(T, t) = 3.33e^{-6}T^3t^2 + 1.666e^{-5}T^3t - 1.333e^{-5}T^3 + 0.00847T^2t^2 - 0.040T^2t + 0.031T^2 - 7.01Tt^2 + 32.37Tt - 23.517T + 1955t^2 - 8657.5t + 5800 \quad (4.10)$$

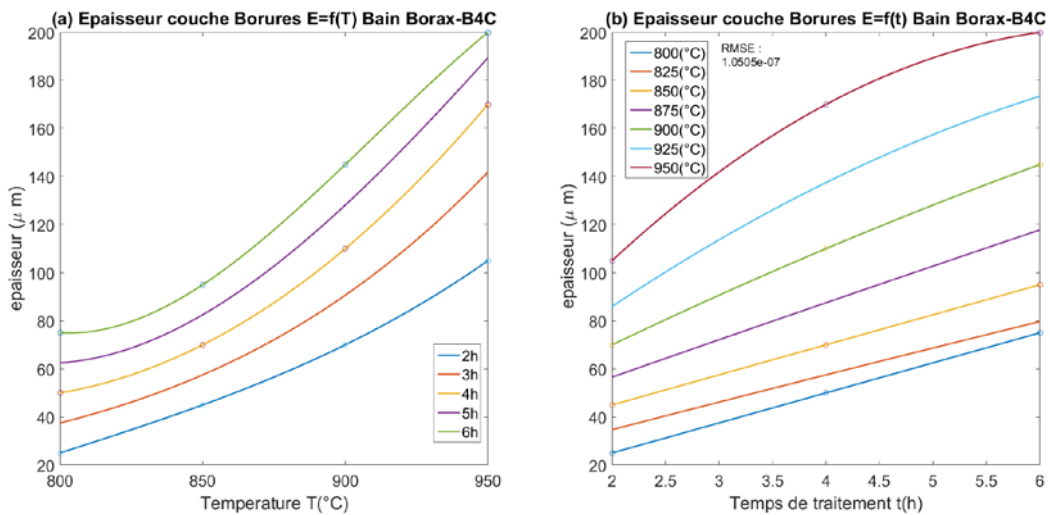


Figure 4.2 : Epaisseur de couche Fonction de la température de traitement (a) et du temps (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-B<sub>4</sub>C

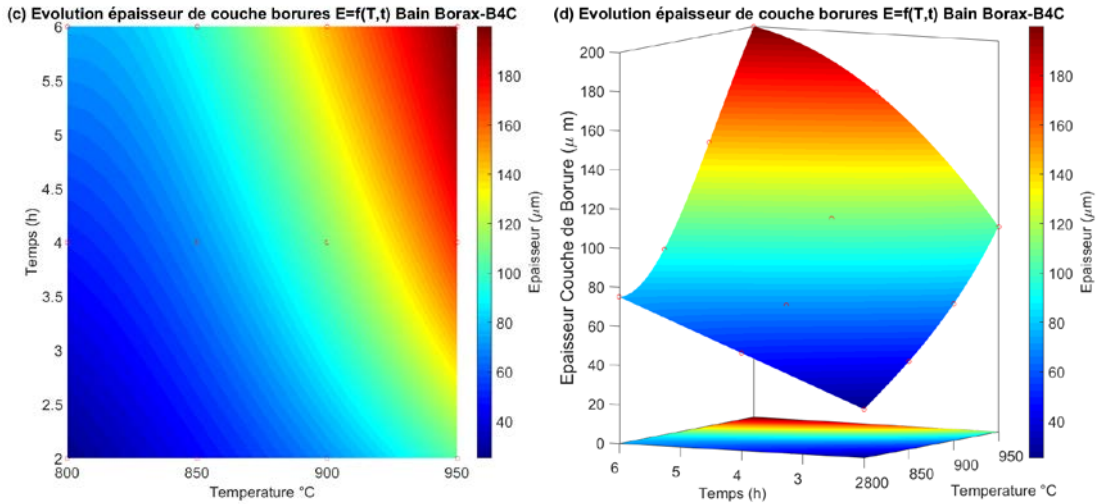


Figure 4.3 : Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-B<sub>4</sub>C

#### 4.3.2. Bain Borax-Al

Tableau 4.2 : Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-Al

	850°C	900°C	950°C	1000°C
2(h)	25	45	65	100
4(h)	55	85	120	180
6(h)	80	110	170	245

Le modèle obtenu en appliquant l'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain de Borax-Al est donné par l'équation 4.11 :

$$e(T, t) = 6.67e^{-6}T^3t^2 + 4.333e^{-5}T^3t - 4e^{-5}T^3 + 0.0185T^2t^2 - 0.012T^2t + 0.111T^2 - 17.08Tt^2 + 109.82Tt - 102.35T + 5248.125t^2 - 33598.125t + 31355 \quad (4.11)$$

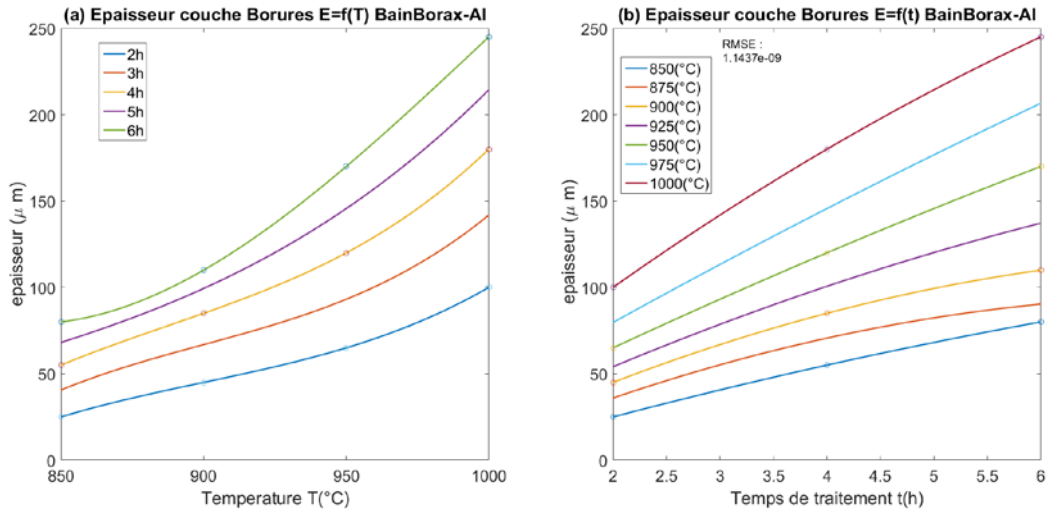


Figure 4.4 : Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-Al

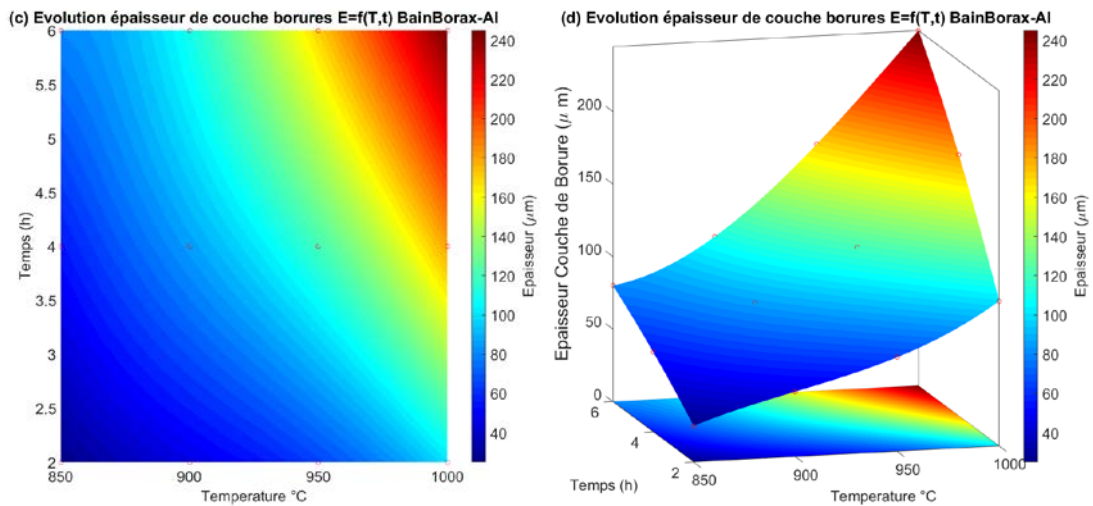


Figure 4.5 : Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-Al

### 4.3.3. Bain Borax-SiC

Tableau 4.3 : Epaisseurs expérimentales pour le bain Borax-SiC

	900°C	950°C	1000°C	1050°C
2(h)	15	30	45	80
4(h)	35	65	105	160
6(h)	50	100	160	245

Le modèle obtenu en appliquant l'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain de Borax-SiC est donne par l'équation 4.12 :

$$e(T, t) = 4.166e^{-6}T^3t^2 + 3.5e^{-5}T^3t - 8e^{-5}T^3 + 0.0121T^2t^2 - 0.102T^2t + 0.232T^2 - 11.75Tt^2 + 99.23Tt - 223.9T + 3788.125t^2 - 32008.75t + 71920 \quad (4.12)$$

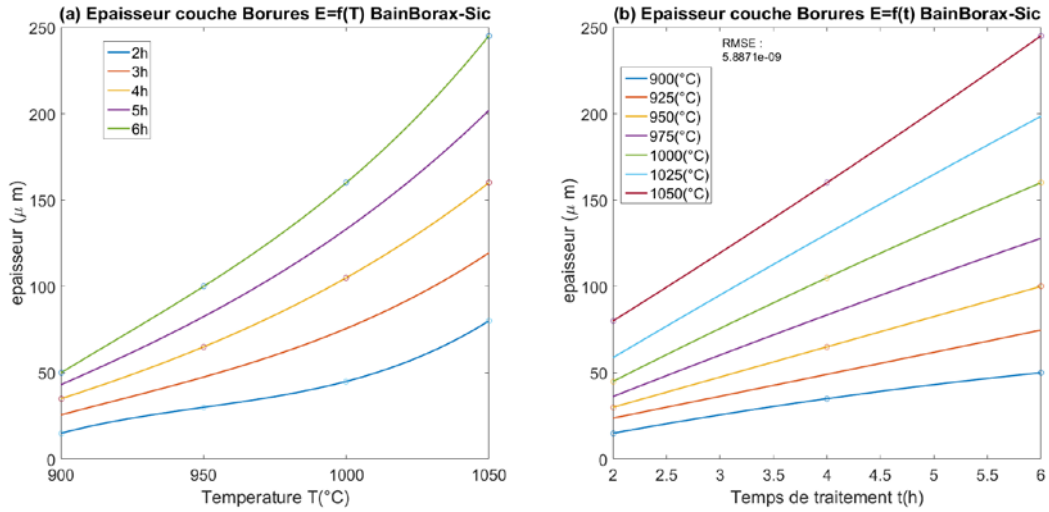


Figure 4.6 : Epaisseur de couche Fonction de la température (a) et du temps de traitement (b) modèle d'approximation au sens des éléments finis pour Borax-SiC

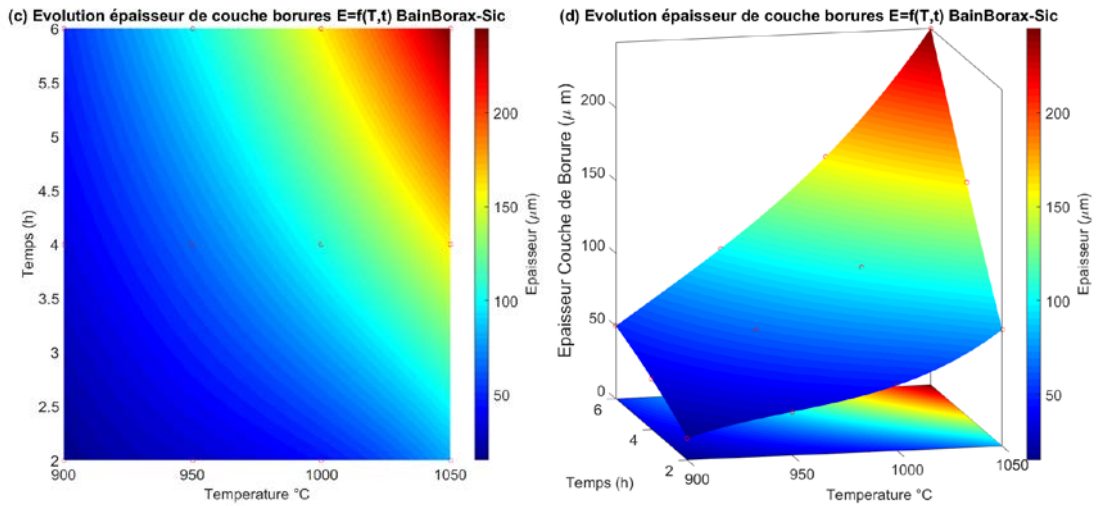


Figure 4.7 : Evolution (c) en ligne de niveau (d) en 3D de l'épaisseur de couche Fonction du temps de traitement et de la température modèle d'approximation au sens des éléments finis pour le cas du Bain Borax-SiC

#### 4.4. Conclusion

L'approximation nodale au sens des éléments finis est un outil assez puissant pour la construction des fonctions d'interpolations basée sur les valeurs aux nœuds. La flexibilité offerte par la méthode permet de spécifier les degrés de continuités d'interpolation de la fonction inconnue. Sur chaque élément une fonction approchée est construite avec un degré de continuité approprié, en faisant introduire des conditions de continuité entre différents éléments on assure une continuité globale de la fonction approchée sur tout le domaine ; la solution globale étant la réunion des différentes fonctions approchées à travers les différents éléments.

Pour notre cas ; on a considéré un seul élément à travers le domaine refermant 12 nœuds ; ces 12 nœuds correspondent aux valeurs nodales de départ qui sont les épaisseurs de couches de borures obtenues expérimentalement.

Tableau 4.4 Erreurs quadratiques moyennes

	Borax-B <sub>4</sub> C	Borax-AL	Borax-SiC
RMSE	1.0505E-07	1.1437E-09	5.8871E-09

Les modèles obtenus dans chaque cas représentent une interpolation au sens des éléments finis des valeurs expérimentales des épaisseurs de couches de borures. D'après leur représentation graphique ces modèles approchent d'une façon assez satisfaisante les valeurs expérimentales ; les erreurs quadratiques moyennes RMSE présentées sur le tableau précédant le confirme assez bien.

#### 4.5. Références bibliographiques

- [1] J. Haslinger, Pekka Neittaanmäki Finite Element Approximation for Optimal Shape, Material and Topology Wiley 1996
- [2] Ted Belytschko , Robert Gracie , Giulio Ventura The extended/generalized finite element method: An overview of the method and its applications International Journal for Numerical Methods in Engineering 2010
- [3] Mitchell Luskin and Ling Ma Analysis of the Finite Element Approximation of Microstructure in Micromagnetics SIAM J. Numer. Anal., 29(2), 320–331
- [4] O. Zienkiewicz, K. Morgan Finite Elements and Approximation Dover Publications 2013
- [5] A. Khenane Méthode des éléments finis Enoncées et principe de base OPU 1997

# **Conclusion générale**

Dans ce travail, une synthèse des méthodes de modélisation et simulation a été développée, trois méthodologies différentes de modélisation ont été entreprises pour élaborer un modèle de diffusion donnant les épaisseurs de couches de borures en fonction des températures et du temps d'expérimentation. La première concernant l'utilisation des réseaux de neurones pour modéliser l'épaisseur de couche en fonction de la température et du temps, la seconde concerne l'utilisation des techniques de logique floue pour aborder le même problème, et finalement l'utilisation d'une technique d'approximation au sens des éléments finis a été abordées pour cette même modélisation. Pour toutes les méthodologies abordées les données expérimentales utilisées sont celles de la boruration avec bain de sel fondus ; trois types de bain ont été utilisé ; Borax-B<sub>4</sub>C ; Borax-Al, et Borax-SiC.

Pour la modélisation par réseau de neurones, d'après les résultats obtenus par les réseaux de neurones on peut ainsi conclure que le nombre des variables d'entrées (les inputs) jouent un rôle primordial dans la précision des résultats.

La prédiction des couches de borures par les réseaux de neurones donne des résultats satisfaisants pourvu que le nombre des variables d'entrée (inputs) soit important (plus de 10).

Les réseaux de neurones à rétro propagation utilisant la fonction de régulation bayésienne a donné les meilleurs résultats dans tous les cas.

Le tableau suivant dresse les erreurs quadratiques moyennes RMSE. Ces erreurs sont calculées par rapport aux moyennes arithmétiques des épaisseurs expérimentales pour les différents bains.

Tableau 1 Erreurs quadratiques moyennes

	Borax-B <sub>4</sub> C	Borax-AL	Borax-SiC
RMSE	0.76462	0.46344	0.22623

Bien que, dans chaque cas, on n'a pas présenté au réseau de neurone aucune des moyennes mesurées pour l'épaisseur, la simulation du réseau au niveau des points de mesures semble converger plus ou moins exactement vers la moyenne arithmétique de ces épaisseurs. Ce résultat est très prometteur, du moment qu'il conforte ce que les ingénieurs ont l'habitude de prendre comme épaisseur apparente à savoir la moyenne arithmétique des mesures d'épaisseurs effectuées.

Pour la modélisation par logique floue, en inspectant les différentes erreurs quadratiques moyennes RMSE calculées d'après :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y - y_i)^2}$$

Où n représente le nombre de valeurs expérimentales utilisées dans chaque cas ; ce qui correspond à douze (12) pour les trois bains, y la valeur calculée et  $y_i$  la valeur expérimentale de l'épaisseur de couche utilisée comme entrée.

Pour les différents cas de bains de sels fondus les valeurs ayant les plus faibles valeurs des Erreurs quadratiques moyennes (RMSE) sont celles utilisant la méthode de Takagi-Sugeno ;

Tableau 2 Erreurs quadratiques moyennes en fonction de la méthode utilisée

	Bain Borax-B <sub>4</sub> C	Bain Borax-Al	Bain Borax-SiC
Mamdani-Linéaire	2.8685	4.3676	5.1901
Mamdani-Gauss	10.271	18.543	13.7637
Takagi-Sugeno	1.4333	1.6688	1.7805

L'utilisation de fonction triangulaires comme fonction d'appartenance pour les entrées et sorties donnent de meilleurs résultats que l'utilisation des fonctions de gauss. On peut conclure que les meilleurs résultats sont obtenus en utilisant la logique floue avec la méthode de Takagi-Sugeno pour la modélisation de la croissance de la couche de borure.

Concernant l'approximation nodale au sens des éléments finis, on peut dire que c'est un outil assez puissant pour la construction des fonctions d'interpolations basée sur les valeurs aux nœuds. La flexibilité offerte par la méthode permet de spécifier les degrés de continuités d'interpolation de la fonction inconnue. Sur chaque élément une fonction approchée est construite avec un degré de continuité approprié, en faisant introduire des conditions de continuité entre différents éléments on assure une continuité globale de la fonction approchée sur tout le domaine ; la solution globale étant la réunion des différentes fonctions approchées à travers les différents éléments.

Pour notre cas ; on a considéré un seul élément à travers le domaine refermant 12 nœuds ; ces 12 nœuds correspondent aux valeurs nodales de départ qui sont les épaisseurs de couches de borures obtenues expérimentalement.

Tableau 3 Erreurs quadratiques moyennes

	Borax-B4C	Borax-AL	Borax-SiC
RMSE	1.0505E-07	1.1437E-09	5.8871E-09

Les modèles obtenus dans chaque cas représentent une interpolation au sens des éléments finis des valeurs expérimentales des épaisseurs de couches de borures. D'après leur représentation graphique, ces modèles approchent d'une façon assez satisfaisante les valeurs expérimentales ; les erreurs quadratiques moyennes RMSE présentées sur le tableau précédant le confirme assez bien.

Bien que toutes les méthodologies de modélisation abordées donnent des résultats satisfaisants, la meilleure qui ressort est celle d'approximation par éléments finis. Il faut signaler que pour les deux autres méthodes, l'aspect régulier de la répartition des données d'entrée n'est pas important contrairement à la méthode d'approximation par éléments finis qui exige une répartition régulière des données d'entrée.

Comme perspectives au présent travail on peut suggérer ce qui suit :

- L'exploration des méthodes Hybrides pour la modélisation et simulation des problèmes de diffusion
- La modélisation thermodynamique en utilisant des logiciels comme ThermoCalc®, où d'autres aspects, tels que l'effet de la composition chimique du substrat, l'effet des traitements thermiques après la formation de la couche de diffusion, ....

## RESUME

Les changements de phases dans la structure des métaux et des alliages et leurs relations avec les propriétés physiques et mécaniques sont d'un intérêt primordial pour la connaissance et l'exploitation de ces derniers. Vu que la plupart des changements de structure se fait par diffusion, toute compréhension réelle des changements de phase (homogénéisation, sphéroïdisation, cémentation, boruration,...) doit être basée sur la connaissance de la diffusion.

L'objectif principal de ce travail est l'étude expérimentale, la modélisation et la simulation de la diffusion atomique. Dans ce cadre la boruration par bain de sels fondus de l'acier XC38 a été retenue, vu que le procédé est assez bien maîtrisé au sein du labo génie des procédés de l'université de Laghouat, et que les moyens d'expérimentation soient disponibles.

Les résultats obtenus ont montré que la modélisation par réseaux de neurones exige un nombre des variables d'entrées (les inputs) important pour avoir des résultats ayant une précision acceptable. Pour la logique floue, la meilleure modélisation de la croissance de la couche de borure a été obtenue avec la méthode de Takagi-Sugeno. Pour l'approximation par éléments finis, les modèles obtenus approchent d'une façon assez satisfaisante les valeurs expérimentales.

Bien que toutes les méthodologies de modélisation abordées donnent des résultats satisfaisants, la meilleure qui ressort est celle d'approximation par éléments finis.

**Mots clés** : Modélisation, Simulation, Diffusion, Boruration, Réseau de Neurones, Logique floue, Approximation par éléments finis

## ABSTRACT

The phase changes in the structure of metals and alloys and the relation with their physical and mechanical properties are of primary interest for the knowledge and exploitation of these materials. since most structural changes is done by diffusion, any real understanding of phase changes (homogenization, spheroidizing, carburizing, boriding, ...) must be based on good knowledge of diffusion process.

The main objective of this work is the experimental study, modelling and simulation of atomic diffusion. In this context boriding by molten salt bath of XC38 steel was chosen, since the process is fairly well controlled and the experimental facilities available in the Process Engineering Laboratory (LGP) at Laghouat University.

The results showed that neural network modelling requires an important number of input variables to have results with acceptable accuracy. For fuzzy logic, the best modelling of the growth of the boride layer was obtained with the Takagi- Sugeno method. For the finite element approximations, the obtained models approaches the experimental values by a quite satisfactorily way.

Although all addressed modelling methodologies give satisfactory results, the best that emerge is that of finite element approximations.

**Keywords**: modelling, Simulation, Diffusion, Boriding, Artificial Neural Network, Fuzzy logic, Finite Element Approximation.

## ملخص

تعتبر التحولات الطورية في بنية المعادن والسبائك وعلاقتها بالخصائص الفيزيائية والميكانيكية ذات أهمية بالغة لمعرفة واستغلال هذه المواد. نظرا لأن أغلب التحولات في البنية تحدث بالانتشار، فإن كل فهم حقيقي للتحولات الطورية (التجانس، التكوير، التشبييع بالكربون، التشبييع بالبور)، يجب أن يكون معتمدا بالأساس على ظاهرة الانتشار.

الأهمية الأساسية لهذا العمل هي الدراسة التطبيقية، النمذجة ومحاكاة ظاهرة الانتشار الذري. في هذا الإطار، أخذت عملية التشبييع بالبور في الأملاح الذائبة للصلب XC38، كون هذه العملية متحكم فيها في مخبر هندسة الطرائق بجامعة عمار تليجي بالأغواط، وكون إمكانيات التجربة متاحة.

النتائج المنحصلة عليها أثبتت أن النمذجة بالشبكات العصبية تتطلب أعداد كبيرة من المتغيرات المدخلة (inputs) للحصول على نتائج ذات دقة مقبولة. في المنطق الضبابي أفضل نمذجة لنمو طبقة البوريد مع طريقة Takagi-Sugeno. أما في المقاربة بالعناصر المحدودة، فإن النماذج المحصل عليها تقترب من القيم التجريبية بصورة جد مرضية.

على الرغم من أن جميع منهجيات النمذجة المتناولة أعطت نتائج مرضية، إلا أن النمذجة بالمقاربة بالعناصر المحدودة اعتبرت الأحسن.

**الكلمات المفتاحية**: النمذجة، المحاكاة، الانتشار، التشبييع بالبور، الشبكات العصبية، المنطق الضبابي، المقاربة بالعناصر المحدودة.