



**HAL**  
open science

# Modèle par éléments discrets multi physique du comportement des matériaux métalliques sous sollicitations thermo mécaniques extrêmes

Moubarak Gado

► **To cite this version:**

Moubarak Gado. Modèle par éléments discrets multi physique du comportement des matériaux métalliques sous sollicitations thermo mécaniques extrêmes. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université de Bordeaux, 2017. Français. NNT : 2017BORD0707 . tel-01827243

**HAL Id: tel-01827243**

**<https://theses.hal.science/tel-01827243>**

Submitted on 2 Jul 2018

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

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

THÈSE EN COTUTELLE PRESENTÉE  
POUR OBTENIR LE GRADE DE  
**DOCTEUR DE**  
**L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX**  
**ET DE L'UNIVERSITÉ DU PAYS BASQUE**  
**(ESPAGNE)**

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET PHYSIQUES DE L'INGÉNIEUR  
ESCUELA DE MASTER Y DOCTORADO  
SPÉCIALITÉ «MÉCANIQUE ET INGÉNIERIE»

Par **Moubarak GADO**

---

**MODÈLE PAR ÉLÉMENTS DISCRETS MULTI PHYSIQUE DU  
COMPORTEMENT DES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES SOUS  
SOLLICITATIONS THERMO MÉCANIQUES EXTRÊMES**

---

Directeurs de thèse : **Ivan Iordanoff et Franck Girot**  
Co-encadrement de la thèse : **Dominique Coupard, Jean-Luc Charles**

Soutenue publiquement le 23 Octobre 2017

Membres du jury :

<b>MME ELISABETH MASSONI</b> , Maître de Recherches, MINES ParisTech	Présidente
<b>M. MOHAMED GUESSAMA</b> , Professeur, Université de Picardie Jules Verne	Rapporteur
<b>MME MIRENTXU DUBAR</b> , Professeur, Université de Valenciennes	Rapporteur
<b>M. IVAN IORDANOFF</b> , Professeur, Arts et Métiers ParisTech	Examineur
<b>M. FRANCK GIROT</b> , Professeur, UPV/EHU (ETSI Bilbao)	Examineur
<b>M. DOMINIQUE COUPARD</b> , Maître de conférences, Arts et Métiers ParisTech	Examineur
<b>M. JEAN-LUC CHARLES</b> , Maître de conférences, Arts et Métiers ParisTech	Invité



*Être heureux c'est aussi avoir quelqu'un sur qui on peut compter quoi qu'il arrive.*

Merci maman et papa.

À ma mère, mon père,  
mes soeurs et frères, mes amis,  
je leur dédie cette thèse.



*Everything is hard before it is easy.*

— Johan Wolfgang von Goethe

*L'ignorant affirme, le savant doute, le sage réfléchit.*

— Aristote

## REMERCIEMENTS

---

Cette thèse, fruit d'une cotutelle entre l'Université de Bordeaux et l'Université du pays basque (ETSI Bilbao), a été possible grâce au financement de l'Initiative d'excellence de l'Université de Bordeaux (Idex Bordeaux). Je remercie toutes les personnes qui ont rendu possible cette collaboration.

Je tiens à adresser mes sincères remerciements aux membres du jury pour m'avoir fait l'honneur d'évaluer mes travaux: à M. Mohamed GUESSASMA et Mme Mirentxu DUBAR pour avoir accepté la tâche d'être rapporteurs de ce travail de recherche, ainsi qu'à Mme Elisabeth MASSONI pour avoir accepté présider mon jury de thèse. Permettez moi de vous exprimer ma profonde gratitude pour la lecture minutieuse de ce manuscrit, la pertinence de vos questions et suggestions ainsi que pour vos compliments.

Je tiens à remercier mes encadrants, Ivan, Jean-Luc, Dominique, Franck, pour la confiance qu'ils m'ont accordée en me recrutant sur cette thèse, mais également pour les nombreuses heures qu'ils m'ont consacrés. Leur compétence, leur rigueur scientifique et leur clairvoyance m'ont beaucoup appris. Merci à Ivan pour nos discussions autant inspirantes que passionnantes qui a su me guider malgré son emploi du temps chargé. Merci à Jean-Luc pour les nombreuses discussions captivantes et toujours pleines d'humour qu'on a pu avoir. En informatique ou autre, "simple is beautiful", je ne l'oublierai jamais. Merci pour ta bonne humeur contagieuse. Merci à Dominique pour sa rigueur, sa patience et sa pédagogie qui m'ont permis d'assimiler beaucoup plus facilement des concepts métallurgiques complexes. Merci à Franck qui au delà de nos réunions de travail constructives et sa disponibilité, a facilité mon intégration à Bilbao.

Une thèse est aussi une aventure humaine jonchée de rencontres qui nous marqueront à jamais. Merci à Sondes, Pablo, Adrien, Arthur avec qui j'ai partagé de belles tranches de rigolades mais également de nombreux sachets de thé et dosettes de café.

Merci aux collègues et doctorants qui m'ont si bien accueilli à Bilbao (Octavio, Egoitz, Roberto, Leire et tous les autres). Eskerrik asko! Muchas gracias!

Merci à tous ceux que j'ai pu croiser durant ces années de thèse, merci à tous les doctorants et permanents, trop nombreux pour les citer sans risquer d'en oublier. Ils se reconnaîtront.

Merci à mes amis d'ici et d'ailleurs, Yohanes, Francis, Lumen, Philippe, Olafe, Gil!

Enfin merci à ma famille pour leur soutien indéfectible. Merci à Maman, Papa, Asmaou, Gaston, Taoufik. Mention spéciale à mes nièces Manolla, Marie et Grâce toujours très curieuses sur la mécanique des matériaux.

Aux nombreuses personnes que j'oublie de nommer, merci!



## RÉSUMÉ

---

Les travaux de cette thèse concernent le développement d'un modèle par éléments discrets du comportement thermo-mécanique d'un alliage d'aluminium et de son évolution microstructurale lorsqu'il est soumis à des conditions de grandes déformations et/ou de grandes vitesses de déformation (soudage par friction-malaxage ou FSW). Le procédé de « soudage par friction malaxage » (Friction Stir Welding, FSW) est un procédé de soudage récent, inventé en 1991 par « The Welding Institute (TWI) ». Ce procédé se distingue des autres par sa capacité à souder la matière à l'état visqueux, sans atteindre le point de fusion. Le principe est relativement simple et comparable à une opération de fraisage, si ce n'est que l'outil coupant est remplacé par un outil malaxant composé d'un pion et d'un épaulement. Ce procédé revêt un fort intérêt pour l'industrie aéronautique, car il offre la possibilité de souder des alliages d'aluminium des séries 2XXX et 7XXX, réputés difficiles à souder par d'autres procédés. Le soudage par friction-malaxage étant un procédé récent, il demeure encore un sujet de recherche actif, pour mieux appréhender certains points comme l'écoulement de la matière, l'influence des paramètres du procédé (vitesse de rotation, forme de l'outil, ...) et la modification de la microstructure. Ce dernier point est particulièrement important pour les alliages à durcissement structural comme ceux des séries 2XXX et 7XXX. Pour ces alliages d'aluminium, les propriétés mécaniques dépendent étroitement de leur état de précipitation, lui-même influencé par l'apport de chaleur généré lors du soudage. L'optimisation des paramètres de soudage par rapport aux propriétés mécaniques passe obligatoirement par la prédiction de l'état de la précipitation le long du joint soudé. Le travail de la thèse vise à mettre en place des modèles à l'échelle de la microstructure permettant de prévoir la modification des propriétés de la matière liées aux paramètres du procédé.

**Mots clés :** méthode des éléments discrets, précipitation, soudage par friction malaxage

## ABSTRACT

---

The work of this thesis concerns the development of a model using the discrete element method, for the thermo-mechanical behavior of an aluminum alloy and its microstructural evolution when exposed to conditions of large deformations and/or high deformation rates (Friction Stir Welding or FSW). Friction stir welding is a recent welding process invented in 1991 by "The welding Institute" (TWI). This process is different from the others by its ability to weld material in the viscous state, without reaching the melting point. The principle is relatively simple and similar to a milling process except that the cutting tool is replaced by a rotary tool composed of a pin and a shoulder. This process is of great interest in the aircraft industry because it offers the possibility to weld aluminum alloys 2XXX and 7XXX series, known to be difficult to weld by other processes. Since friction stir welding is a recent process, it still remains a subject of active research, to better understand certain issues such as material flow,



influence of process parameters (rotation speed, tool shape, ...) and the modification of the microstructure. This last point is particularly important for structural hardening alloys such as those of the 2XXX and 7XXX series. For these aluminum alloys, the mechanical properties are highly dependent on their state of precipitation, which is itself influenced by the heat generated during the welding. The optimization of welding parameters in order to obtain good mechanical properties requires the prediction of precipitation state along the welded joint. The work of this thesis is to develop required models at the scale of microstructure allowing to predict the modification of material properties related to the process parameters.

**Keywords :** discrete element method, precipitation, friction stir welding



## TABLE DES MATIÈRES

1	ÉTAT DE L'ART	1
1.1	Procédés impliquant grandes déformations et grandes vitesses de déformation et leurs simulations . . . . .	2
1.2	FSW . . . . .	2
1.2.1	Historique du FSW . . . . .	2
1.2.2	Matériaux soudables par FSW . . . . .	3
1.2.3	Points forts et points faibles du FSW . . . . .	4
1.2.4	Justification économique du FSW et domaines d'application . . . . .	5
1.2.5	Caractéristiques . . . . .	5
1.2.6	Phénomènes thermo-mécaniques et métallurgiques présents . . . . .	7
1.3	Matériau d'étude . . . . .	9
1.3.1	Les alliages d'aluminium à durcissement structural . . . . .	9
1.3.2	Matériau étudié: l'alliage d'Aluminium 2024 . . . . .	11
1.4	Modélisation et simulation du FSW . . . . .	12
1.4.1	Modélisation . . . . .	12
1.4.2	Simulation du FSW . . . . .	15
1.5	Modélisation et simulation avec la méthode des éléments discrets (DEM)	18
1.5.1	Différences entre la méthode des éléments discrets et les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus: avantages et inconvénients . . . . .	18
1.5.2	Calcul des interactions entre éléments discrets . . . . .	18
1.6	Choix de la méthode DEM . . . . .	22
1.6.1	Intérêt de la DEM comme méthode particulière . . . . .	22
1.6.2	Justifications . . . . .	23
1.6.3	Objectifs . . . . .	23
1.7	Synthèse et objectifs de l'étude . . . . .	25
2	MODÈLE MÉTALLURGIQUE	27
2.1	Précipitation dans les alliages à durcissement structural . . . . .	28
2.1.1	Importance de la précipitation . . . . .	28
2.1.2	Influence de la précipitation sur les propriétés mécaniques- Influence du cycle thermique . . . . .	28
2.1.3	Mécanismes de précipitation . . . . .	28
2.2	Modélisation de la précipitation . . . . .	30
2.2.1	Thermodynamique . . . . .	30
2.2.2	Cinétique de précipitation . . . . .	43
2.2.3	État de l'art sur les modèles de précipitations existants . . . . .	47
2.2.4	Description du modèle choisi . . . . .	47
2.2.5	Bilan des hypothèses et des paramètres du modèle . . . . .	52
2.2.6	Algorithme de calcul . . . . .	54
2.3	Plate-forme de calcul C++ / python . . . . .	55
2.3.1	Description du modèle orienté objet . . . . .	55
2.4	Modèle de durcissement structural . . . . .	58

2.4.1	Mécanismes de durcissement par précipitation des alliages d'aluminium . . . . .	58
2.4.2	Modélisation du durcissement structural . . . . .	58
2.5	Validation . . . . .	60
2.5.1	Validation dans le cas de la maturation . . . . .	60
2.5.2	Dans le cas d'un cycle thermique . . . . .	65
2.6	Conclusion . . . . .	67
3	MODÉLISATION MÉCANIQUE PAR ÉLÉMENTS DISCRETS . . . . .	69
3.1	Problème des grandes déformations . . . . .	70
3.2	Loi de comportement . . . . .	70
3.2.1	Description du modèle . . . . .	70
3.2.2	Méthode par potentiel: identification du comportement élastique . . . . .	76
3.3	Construction de la loi basée sur les potentiels . . . . .	89
3.3.1	Présentation du modèle- loi de comportement à seuil . . . . .	89
3.3.2	Étude du comportement macroscopique émergent . . . . .	89
3.3.3	Méthode de calibration . . . . .	94
3.4	Conclusion . . . . .	99
4	CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES . . . . .	101
4.1	Synthèse . . . . .	102
4.2	Perspectives . . . . .	103
4.2.1	Modèle Mécanique . . . . .	103
4.2.2	Modèle Métallurgique . . . . .	104
4.2.3	Couplage thermo-mécano-métallurgique . . . . .	105
	<b>Annexes</b> . . . . .	107
A	RELATIONS IMPORTANTES POUR LES CALULS DE PRÉCIPITATION . . . . .	109
A.1	Calcul du Volume molaire . . . . .	110
A.1.1	Solution solide . . . . .	110
A.1.2	Volume molaire des précipités . . . . .	110
A.2	Rayon minimum des précipités . . . . .	111
A.2.1	Précipités GP . . . . .	111
A.2.2	Precipité S' . . . . .	111
A.3	Actualisation des concentrations volumiques dans la solution solide . . . . .	111
A.4	Rayon moyen d'un précipité à partir d'une distribution . . . . .	112
A.5	Nombre de sites de germination . . . . .	112
A.5.1	Précipités GP . . . . .	112
A.5.2	Précipités S' . . . . .	113
B	FICHIERS D'ENTRÉES POUR LE PROGRAMME DE PRÉCIPITATION . . . . .	115
B.1	Fichier matériau pour l'alliage d'aluminium 2024 . . . . .	116
B.2	Fichier pour l'initialisation du calcul . . . . .	118
	<b>BIBLIOGRAPHIE</b> . . . . .	121

## TABLE DES FIGURES

Figure 1.1	Illustration schématique du FSW [3] . . . . .	3
Figure 1.2	Quelques applications du FSW . . . . .	6
Figure 1.3	Outil conventionnel de FSW et paramètres clés [8] . . . . .	7
Figure 1.4	Description cinématique de l'écoulement de la matière [9, 10] . . . . .	9
Figure 1.5	Interaction entre éléments discrets . . . . .	19
Figure 1.6	Poutre cylindrique d'Euler-Bernoulli . . . . .	20
Figure 1.7	Exemple d'un potentiel de Lennard-Jones . . . . .	22
Figure 1.8	Comparaison entre dureté expérimentale et cohésion entre les particules dans le joint de soudure . . . . .	23
Figure 1.9	Cartographie de la cohésion entre les particules dans le joint de soudure: cohésion maximale (zone rouge), cohésion minimale (zone verte), cohésion du métal de base (zone bleue) . . . . .	24
Figure 1.10	Visualisation du réarrangement des particules après passage de l'outil . . . . .	24
Figure 2.1	Variation de durcissement en fonction de la taille des particules déformables et non déformables [113] . . . . .	29
Figure 2.2	Évolution de la précipitation durant un traitement isotherme . . . . .	30
Figure 2.3	Germination d'un précipité . . . . .	32
Figure 2.4	Types de précipités selon l'interface matrice/précipité . . . . .	37
Figure 2.5	Changements d'interfaces durant la précipitation . . . . .	37
Figure 2.6	Énergie totale de germination . . . . .	39
Figure 2.7	Germination hétérogène sur une surface plane . . . . .	41
Figure 2.8	Évolution du profil de concentration lors de la croissance . . . . .	44
Figure 2.9	Évolution d'une population de précipité . . . . .	48
Figure 2.10	Distribution de classes de précipités . . . . .	49
Figure 2.11	Différents cas possibles selon le signe des vitesses aux interfaces . . . . .	50
Figure 2.12	Algorithme de calcul général . . . . .	55
Figure 2.13	Vue globale du diagramme de classes orienté objet . . . . .	57
Figure 2.14	Architecture de la plate-forme de calcul lié aux aspects métallurgiques . . . . .	58
Figure 2.15	Cisaillement d'un précipité sphérique dans le plan de glissement d'une dislocation [113] . . . . .	59
Figure 2.16	Franchissement des précipités par contournement d'Orowan [113] . . . . .	59
Figure 2.17	Résultats d'un calcul de maturation pour une durée de 55h . . . . .	62
Figure 2.18	Distribution des précipités GP en fin de maturation . . . . .	63
Figure 2.19	Population de précipités GP à 35 h (124787 s), 51h (183703 s) et à 55 h (200000 s) . . . . .	64
Figure 2.20	Comparaison courbe de dureté expérimentale et numérique . . . . .	64
Figure 2.21	Cycle thermique TKA mesuré en un point situé au début de la ZAT . . . . .	66
Figure 2.22	Profil de dureté HV1 dans le cordon de soudure . . . . .	66

Figure 2.23	Évolution de la fraction volumique des précipités GP lors du cycle thermique TKA . . . . .	67
Figure 3.1	Interaction au niveau des éléments discrets . . . . .	70
Figure 3.2	Forme de la courbe force-distance en fonction des couples de paramètres $(m,n)$ avec $m=2n$ : $(m,n)= (2,1), (4,2), (6,3), (8,4), (10,5), (12,6)$ . . . . .	72
Figure 3.3	Éléments discrets en équilibre parfait . . . . .	73
Figure 3.4	État d'équilibre initial . . . . .	73
Figure 3.5	Distance maximale d'interaction . . . . .	74
Figure 3.6	Cas avec $(\epsilon, n, \alpha) = (100, 4, 3)$ . . . . .	78
Figure 3.7	Cas avec $(\epsilon, n, \alpha) = (130, 4, 3)$ . . . . .	79
Figure 3.8	Courbe contrainte-déformation . . . . .	80
Figure 3.9	Courbe contrainte-Déformation: chargement cyclique . . . . .	80
Figure 3.10	Rupture du matériau . . . . .	81
Figure 3.11	Évolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre $\epsilon$ . . . . .	82
Figure 3.12	Evolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre $n$ . . . . .	82
Figure 3.13	Évolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre $t$ . . . . .	83
Figure 3.14	Effet des paramètres du potentiel sur le coefficient de Poisson macroscopique . . . . .	85
Figure 3.15	Effet du nombre de particules sur le module de Young macroscopique . . . . .	86
Figure 3.16	Effet du nombre de particules sur le module de Young macroscopique avec la nouvelle formulation . . . . .	88
Figure 3.17	Échelle macroscopique: Comportement macroscopique émergent . . . . .	91
Figure 3.18	Échelle de deux éléments discrets: force à seuil . . . . .	91
Figure 3.19	Évolution de la contrainte en fonction du ratio d'éléments discrets en interaction "plastique" $F^{II}$ . . . . .	92
Figure 3.20	Echelle macroscopique: Comportement macroscopique émergent . . . . .	93
Figure 3.21	Influence de la vitesse de sollicitation sur le comportement macroscopique: coefficient d'amortissement proche de 1 ( $\theta \approx 1$ ) . . . . .	94
Figure 3.22	Comparaison à une loi d'érouissage de type puissance (loi de Ludwik) . . . . .	96
Figure 3.23	Comparaison à une loi d'érouissage de type exponentielle (loi de Voce) . . . . .	96
Figure 3.24	Effet de $\epsilon_2$ sur les courbes macroscopiques de traction monotone . . . . .	97
Figure 3.25	Effet de $\epsilon_2$ : comparaison à une loi d'érouissage de type exponentielle . . . . .	98
Figure 3.26	Effet de $\epsilon_2$ sur la contrainte maximale $\sigma_{max}$ . . . . .	98
Figure 3.27	Effet de $\epsilon_2$ : paramètre $b$ de la loi exponentielle de Voce . . . . .	99

## LISTE DES TABLEAUX

---

Table 1.1	Composition chimique [fournisseur ALCAN, projet ADSAM] .	12
Table 3.1	Valeur des paramètres pour les différentes courbes . . . . .	76
Table 3.2	Conditions limites . . . . .	76
Table 3.3	Caractéristiques mécaniques de l'alliage d'aluminium 2024-T351	77
Table 3.4	Valeurs des paramètres . . . . .	81
Table 3.5	Valeurs des paramètres . . . . .	81
Table 3.6	Valeurs des paramètres . . . . .	83
Table 3.7	Valeurs des paramètres . . . . .	86
Table 3.8	Nombres d'éléments discrets . . . . .	86
Table 3.9	Valeurs des paramètres . . . . .	87
Table 3.10	Nombre d'éléments discrets . . . . .	87
Table 3.11	Valeurs des paramètres utilisés pour les essais de traction uniaxiale sans forces dissipatives . . . . .	90
Table 3.12	Valeurs des paramètres utilisés pour les essais de traction uniaxiale avec forces dissipatives . . . . .	92
Table 3.13	Valeurs des paramètres . . . . .	97
Table 3.14	Valeurs des paramètres choisis pour étudier l'effet de $\epsilon_2$ . . . .	97

## NOTATIONS

---

<b>ALE</b>	Arbitrary Lagrangian-Eulerian
<b>CFD</b>	Computational Fluid Dynamics
<b>DEM</b>	Discrete Element method
<b>DM</b>	Dynamique Moléculaire
<b>DNPA</b>	Diffusion de Neutrons aux Petits Angles
<b>DPD</b>	Dissipative Particle Dynamics
<b>FEM</b>	Finite Element Method
<b>GPB</b>	Guinier-Preston Bagaryatsky
<b>KWN</b>	Kampman Wagner numerical model
<b>MB</b>	Métal de base
<b>NEM</b>	Natural Element Method
<b>SANS</b>	Small-Angle Neutron Scattering
<b>SPH</b>	Smoothed Particle Hydrodynamics
<b>SS</b>	Solution solide
<b>SSSS</b>	Solution solide sursaturée
<b>TWI</b>	The Welding Institute
<b>ZAT</b>	Zone affectée thermiquement
<b>ZATM</b>	Zone affectée thermomécaniquement



## SYMBOLES

---

$F_i$	Force d'interaction s'exerçant sur la particule $i$
$\mathbf{r}_{ij}$	Vecteur distance entre deux particules $i$ et $j$
$\delta_{eq}$	Distance d'équilibre entre deux particules
$\epsilon$	Valeur absolue du potentiel à la distance d'équilibre
$G$	Énergie libre de Gibbs
$H$	Enthalpie
$K_{eq}^P$	Produit de solubilité d'équilibre d'un précipité $P$
$K_P$	Pré-exponentiel du solvus d'équilibre d'un précipité $P$ , lié à son entropie de formation
$\Delta G^P$	Énergie libre standard de formation d'un précipité $P$
$\Delta H^P$	Enthalpie de formation d'un précipité $P$
$X_{eqA_i}$	Concentration molaire d'équilibre en soluté $A_i$
$a_{eqA_i}$	activité chimique de l'élément $A_i$ dans la solution solide d'équilibre
$\xi_i$	Stoechiométrie de l'éléments $A_i$ dans le précipité $P$
$\Delta G_V$	Énergie de Gibbs volumique de changement de phase
$V_{m-p}$	volume molaire du précipité ( $m^3$ /mole précipité)
$R$	Constante des gaz parfaits
$T$	Température
$\Delta G_S, \gamma_{p-ss}$	Énergie de surface ( $J/m^2$ )
$\Delta G_{el}$	Énergie élastique de distorsion des réseaux
$\delta_{mp}$	Variation relative des paramètres de maille entre la matrice et le précipité
$r^*$	Rayon critique de germination
$J$	Flux de germination
$\Delta G^*$	Énergie critique de germination
$Z$	Facteur de Zeldovich
$X_{lac}$	Concentration en lacunes
$D_{lac}$	Coefficient de diffusion des lacunes
$f_{vp}$	Fraction volumique de précipités $P$
$\Phi_{ij}$	Potentiel d'interaction entre deux particules $i$ et $j$



## ÉTAT DE L'ART

---

L'objectif de ce chapitre est d'introduire le sujet et le cadre de l'étude, puis de faire un état de l'art sur les travaux ayant été réalisés. L'état de l'art portera sur la modélisation du FSW, les techniques actuelles utilisées pour sa simulation, et les phénomènes mis en jeu. De plus, le matériau étudié et ses caractéristiques, notamment métallurgiques, seront aussi présentés.

### Sommaire

---

1.1	Procédés impliquant grandes déformations et grandes vitesses de déformation et leurs simulations . . . . .	<b>2</b>
1.2	FSW . . . . .	<b>2</b>
1.2.1	Historique du FSW . . . . .	<b>2</b>
1.2.2	Matériaux soudables par FSW . . . . .	<b>3</b>
1.2.3	Points forts et points faibles du FSW . . . . .	<b>4</b>
1.2.4	Justification économique du FSW et domaines d'application . . . . .	<b>5</b>
1.2.5	Caractéristiques . . . . .	<b>5</b>
1.2.6	Phénomènes thermo-mécaniques et métallurgiques présents . . . . .	<b>7</b>
1.3	Matériau d'étude . . . . .	<b>9</b>
1.3.1	Les alliages d'aluminium à durcissement structural . . . . .	<b>9</b>
1.3.2	Matériau étudié: l'alliage d'Aluminium 2024 . . . . .	<b>11</b>
1.4	Modélisation et simulation du FSW . . . . .	<b>12</b>
1.4.1	Modélisation . . . . .	<b>12</b>
1.4.2	Simulation du FSW . . . . .	<b>15</b>
1.5	Modélisation et simulation avec la méthode des éléments discrets (DEM) . . . . .	<b>18</b>
1.5.1	Différences entre la méthode des éléments discrets et les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus: avantages et inconvénients . . . . .	<b>18</b>
1.5.2	Calcul des interactions entre éléments discrets . . . . .	<b>18</b>
1.6	Choix de la méthode DEM . . . . .	<b>22</b>
1.6.1	Intérêt de la DEM comme méthode particulière . . . . .	<b>22</b>
1.6.2	Justifications . . . . .	<b>23</b>
1.6.3	Objectifs . . . . .	<b>23</b>
1.7	Synthèse et objectifs de l'étude . . . . .	<b>25</b>

---

## 1.1 PROCÉDÉS IMPLIQUANT GRANDES DÉFORMATIONS ET GRANDES VITESSES DE DÉFORMATION ET LEURS SIMULATIONS

De nombreux procédés utilisés en industrie impliquent de grandes déformations, de grandes vitesses de déformation, et des gammes de températures élevées (quelques centaines de degrés Celcius). La simulation de ce type de procédés nécessite de mettre en place des modèles numériques avec des lois de comportement non linéaires, dépendantes de la vitesse de déformation, et adaptées à des gammes de températures élevées. La prise en compte du comportement des matériaux en grandes déformations est nécessaire pour la modélisation des procédés de mise en forme, les instabilités de structures et les crashes, où les vitesses de déformations sont aussi très élevées. De nos jours, beaucoup de produits métalliques passent généralement par au moins une phase de mise en forme à chaud (forgeage, laminage, emboutissage, extrusion) pendant leur fabrication. La mise en place de modèles mathématiques et de techniques de simulation numérique adaptés peut permettre d'analyser et d'améliorer ces procédés tout en réduisant considérablement leur coût. Le développement de modèles pertinents est très difficile, et fait encore de nos jours l'objet de plusieurs études, du fait de la complexité des phénomènes mise en jeu, notamment pour les procédés impliquant des matériaux métalliques (précipitation, restauration, recristallisation, couplage thermo-mécanique, etc.).

La simulation numérique des procédés devrait idéalement inclure non seulement le caractère multiphysique des phénomènes mis en jeu, en prenant par exemple en compte les caractéristiques mécaniques, métallurgiques, mais aussi le design et l'optimisation de la structure. Les développements récents dans le domaine de la simulation numérique s'inscrivent dans cette optique. Plusieurs techniques de simulation allant de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique existent (dynamique moléculaire, modèle à champs de phase, dynamique des dislocations, les méthodes d'homogénéisation, les méthodes sans maillages, la méthode des éléments discrets, la méthode par éléments finis, etc.).

Dans le cadre de ce travail de recherche, nous avons choisi de nous concentrer sur le soudage par friction malaxage (friction stir welding, FSW) comme support de l'étude.

## 1.2 FSW

Le soudage par friction malaxage est un procédé de soudage récent, qui permet d'effectuer des soudures par le biais d'un outil rotatif malaxant la matière dans un état pâteux grâce à la chaleur produite par friction et déformation plastique. Les températures atteintes sont de l'ordre de quelques centaines de degrés et les vitesses de déformations sont très importantes (jusqu'à  $1000 \text{ s}^{-1}$ ).

### 1.2.1 HISTORIQUE DU FSW

Bien que l'assemblage des pièces remonte à plus de deux millénaires, le soudage n'est devenu un procédé viable qu'à partir de la fin du 19e siècle. Plusieurs autres découvertes et inventions s'en sont suivies telles que le soudage au gaz, le soudage entre 2 électrodes de carbone conduisant plus tard au soudage à l'arc, le soudage par effet joule conduisant au soudage par résistance. Au début des années 1990, le soudage au gaz, qui était jusqu'à lors le plus répandu, a progressivement laissé place

au soudage à l'arc qui devint la technique de soudage la plus populaire. Le soudage au gaz et le soudage à l'arc étant des techniques de soudage par fusion, les deux matériaux à souder sont localement fondus puis solidifiés dans le joint de soudure. Pour le soudage à l'arc, la densité surfacique d'énergie thermique est généralement faible, entraînant un noyau de soudure étendu, de larges zones affectées thermiquement et un niveau élevé de défauts liés à la solidification. Pour y remédier, plusieurs techniques ont été développées à partir de 1950 comme le soudage plasma et le soudage laser. Certaines techniques de soudage évitant le passage à l'état fondu (soudage par friction par exemple) ont aussi été développées, mais leurs applications industrielles sont longtemps restées limitées. Le principe thermomécanique du soudage par friction a conduit plus tard à l'invention du soudage par friction malaxage (FSW). Pendant plusieurs années, l'institut de soudure anglais (The Welding Institute, TWI) a mené de nombreuses études sur diverses variantes de soudage par friction ("friction extrusion", "friction hydro-pillar processing", "third-body friction joining processes"). En 1991, Wayne Thomas et ses collègues ont découvert qu'en utilisant un pion rotatif, les matériaux à souder pouvaient être plastifiés, et que cette plasticité pouvait être utilisée pour souder les deux matériaux. Le premier brevet lié au FSW sera déposé par la suite par Thomas et al. (1991) [2].

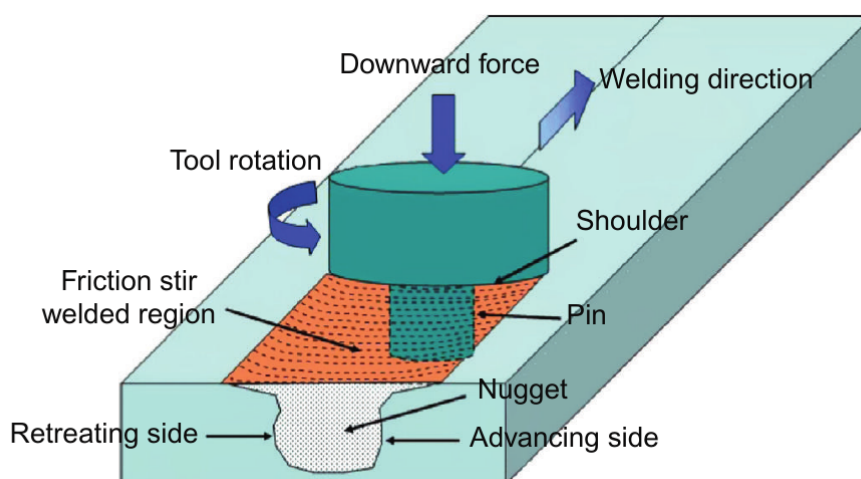


Figure 1.1: Illustration schématique du FSW [3]

### 1.2.2 MATÉRIAUX SOUDABLES PAR FSW

Certains matériaux sont réputés difficilement soudables par les procédés de soudage traditionnels par fusion. Le FSW, en restant un soudage à l'état solide, supprime cette difficulté. Par ailleurs, les soudures hétérogènes sont plus faciles, car, d'une part, l'utilisation de métal d'apport n'est pas nécessaire, et, d'autre part, une éventuelle surchauffe est moins problématique du fait que la température de fusion des matériaux ne sont pas atteintes. Selon TWI, les matériaux suivants sont soudables par FSW :

- a) les alliages d'aluminium des séries 2000, 5000, 6000, 7000 et 8000,
- b) le titane et ses alliages,
- c) le plomb,
- d) le cuivre et ses alliages,

- e) les alliages de magnésium,
- f) le zinc,
- g) les alliages de nickel,
- h) les aciers inox,
- i) les aciers doux et aciers au carbone-manganèse,
- j) les matériaux plastiques.

Toutefois, le soudage par FSW de matériaux comme les aciers et le titane reste délicat. De plus, l'usure rapide de l'outil rend difficile l'utilisation du FSW pour certains matériaux.

### 1.2.3 POINTS FORTS ET POINTS FAIBLES DU FSW

Le FSW qui est un procédé de soudage à l'état solide a été très utilisé avec les alliages d'aluminium, plus difficiles à souder par des techniques conventionnelles. Des développements sont toujours en cours afin de l'utiliser pour d'autres types de matériau. Les températures atteintes lors du FSW étant plus faibles qu'avec des techniques de soudage à l'arc, les distorsions transversales et longitudinales sont réduites. De plus, ces niveaux de températures et de contraintes résiduelles réduits sont des facteurs qui peuvent améliorer les performances en chargement cyclique. Par ailleurs, la tenue à la corrosion est améliorée. L'aspect esthétique des joints de soudures obtenus par FSW est aussi un des facteurs qui justifient son utilisation. En effet, les joints obtenus par FSW sont souvent plats, relativement lisses, et peuvent être pratiquement invisibles après peinture. Le FSW apparaît comme une alternative intéressante aux techniques de soudage conventionnelles et présente des avantages techniques, économiques et environnementaux.

Pour les alliages d'aluminium, les principaux avantages du FSW sont entre autres [4] :

- contrairement aux techniques conventionnelles, le soudage se fait à l'état solide ce qui évite les problèmes de fissuration à chaud, les porosités, la perte de matière, et de manière générale, les défauts de solidification des joints de soudures réalisés par les techniques de soudage en phase liquide;
- l'intervention d'un opérateur manuel est rarement nécessaire ce qui rend le procédé facilement automatisable;
- l'utilisation de gaz de protection ou de fil d'apport n'est pas nécessaire;
- les propriétés mécaniques résultantes rivalisent avec celles obtenues par les autres procédés. Les assemblages réalisés en soudage FSW ont une résistance mécanique égale en moyenne à 80% de celle du matériau de base [5]. Comparativement aux autres techniques de soudage, les soudures FSW ont une résistance à la fatigue nettement supérieure [6].
- l'énergie nécessaire pour la soudure est moins importante que pour une soudure MIG (metal inert gaz), mais, tout de même plus importante que pour une soudure laser;
- la soudabilité est augmentée;
- les joints de soudures obtenus ont une meilleure qualité esthétique.

Le FSW présente néanmoins certains inconvénients :

- des montages spéciaux sont nécessaires,
- les efforts de soudages requis sont importants.

### 1.2.4 JUSTIFICATION ÉCONOMIQUE DU FSW ET DOMAINES D'APPLICATION

Comparer le FSW par rapport aux autres procédés sur le plan économique est délicat, car, chaque procédé a ses avantages. Les principaux facteurs qui justifient économiquement l'utilisation du FSW sont:

- la durée d'opération,
- le volume de production,
- le faible nombre de défauts.

Le FSW est aujourd'hui utilisé dans divers secteurs industriels pour des applications de plus en plus nombreuses :

- A. Industrie aéronautique : de par sa répétabilité, sa fiabilité, et, sa capacité à assembler des alliages légers, le FSW est un procédé très intéressant pour le secteur aéronautique. Les matériaux les plus utilisés dans le domaine aéronautique, comme les alliages d'aluminium des séries 2xxx et 7xxx, donnent des soudures de meilleure qualité avec le FSW comparativement aux autres techniques de soudage. Les techniques de soudage par friction malaxage ont été adoptées par plusieurs entreprises [7] : Dassault Aviation sur les appareils de type Falcon (panneaux de fuselage), Eclipse Aviation sur le E550 (figure 1.2a), avion d'affaire et de loisir de 4 à 6 passagers (assemblage des différents éléments de structure et du fuselage), Airbus sur les planchers de l'A400M, Boeing sur C-17 Globemaster II et la version cargo du 747, etc. Par ailleurs, pratiquement tous les grands fabricants de cellules d'avion étudient la possibilité d'utiliser le FSW (et d'autres procédés comme le soudage laser) pour remplacer le rivetage des structures actuelles.
- B. Industrie automobile : le FSW est intéressant pour le soudage des alliages d'aluminium des séries 6xxx qui sont très utilisées pour la fabrication des carrosseries automobiles;
- C. Industrie ferroviaire : le soudage par friction malaxage apparaît comme idéal pour des wagons de train à grande vitesse en aluminium comme le Shinkansen (figure 1.2b) au Japon. Les très faibles distorsions sont citées comme un des principaux avantages [4];
- D. Industrie marine : les constructeurs des navires transbordeurs à grande vitesse, des aéroglisseurs et des bateaux de croisière (figure 1.2c) sont de plus en plus intéressés par les structures obtenues par FSW. Plusieurs entreprises comme Mazda, Alstom ou Ford ont financé de nombreuses études expérimentales et théoriques.

### 1.2.5 CARACTÉRISTIQUES

Le soudage par friction malaxage est un procédé où la soudure est effectuée grâce à un pion rotatif qui rend la matière pâteuse sous l'effet de la chaleur produite par friction et déformation plastique, la rendant ainsi malaxable par l'outil. Les pièces sont chauffées sans passer par le point de fusion, ce qui permet d'éviter plusieurs difficultés souvent rencontrées avec les techniques de soudage par fusion.

Comparé aux techniques de soudage à l'arc, le FSW est plus automatisable mais les efforts à appliquer sont plus importants.

La forme de l'outil est un paramètre crucial pour le FSW. Plusieurs formes existent et l'étude de la forme de l'outil est un sujet de recherche actif depuis l'invention du



(a) Eclipse 550



(b) Train à grande vitesse Shinkansen: FSW employé pour les planchers



(c) Bateau de croisière: FSW employé pour l'assemblage des panneaux

Figure 1.2: Quelques applications du FSW

FSW. À l'origine, l'outil était constitué d'un épaulement au contact de la surface des pièces, et d'un pion de petit diamètre pénétrant légèrement les matériaux à souder.

Le FSW peut être décomposé en trois phases : la phase de plongée qui correspond à l'initiation du soudage, la phase principale (phase d'avance) où la soudure est réalisée, et une dernière phase où l'outil est retiré des pièces. Les propriétés des soudures obtenues dépendent des paramètres du procédé (surtout lors de la phase d'avance). La phase de plongée correspond à la phase où l'outil rotatif pénètre dans les pièces avec une vitesse ou une force donnée.

La section transverse d'un joint de soudure FSW peut être décomposée en quatre parties: le métal de base (MB), la zone affectée thermiquement (ZAT), la zone affectée thermomécaniquement (ZATM), et le noyau. Le métal de base, plus ou moins proche de la zone de soudure, présente les mêmes propriétés que les pièces avant soudage bien que soumis à un cycle thermique. Aux abords de la zone soudée, se trouve la zone affectée thermiquement (ZAT), qui subit un cycle thermique suffisant pour modifier ses propriétés sans déformation plastique de la structure initiale. Les modifications des propriétés dans la zone affectée thermiquement sont par exemple la résistance mécanique, la dureté, la susceptibilité à la corrosion, ou la ductilité. Généralement, la taille de grain et la composition chimique restent inchangées. Concernant les alliages d'aluminium, le cycle thermique dans la ZAT entraîne des phénomènes de précipitation ou de vieillissement qui sont la principale cause des changements de propriétés dans cette zone. Dans la zone affectée thermomécaniquement, la déformation plastique est non nulle, la microdureté est généralement faible et la susceptibilité à la corrosion augmente. Le noyau est la zone où le matériau est suffisamment chauffé, transformé



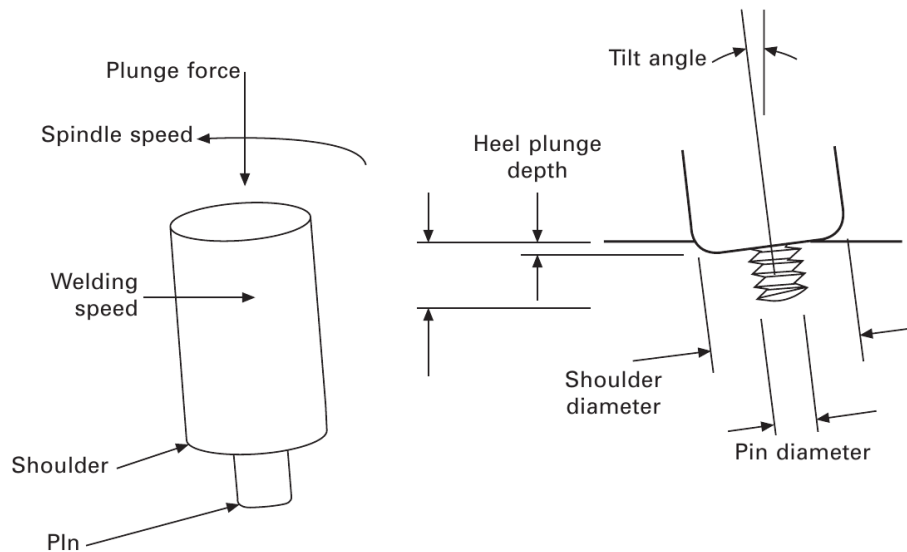


Figure 1.3: Outil conventionnel de FSW et paramètres clés [8]

en état pâteux et malaxé. Dans le noyau, la déformation plastique est très élevée et les phénomènes de recristallisation sont importants.

### 1.2.6 PHÉNOMÈNES THERMO-MÉCANIQUES ET MÉTALLURGIQUES PRÉSENTS

Les phénomènes mis en jeu qui conduisent à la formation du cordon de soudure lors du FSW font encore l'objet de recherches actives. Néanmoins, ces phénomènes peuvent être classés en trois types :

- mécaniques,
- thermiques,
- métallurgiques.

Les phénomènes mécaniques concernent surtout la déformation plastique du matériau sous l'action de l'outil, et le frottement qui se produit entre la matière et l'outil. Les phénomènes thermiques concernent principalement la génération de la chaleur, les phénomènes de conduction et de convection de chaleur. La chaleur est générée d'une part, par une source de chaleur volumique due à la déformation plastique et d'autre part, par une source surfacique due au frottement à l'interface outil/matière (contacts épaulement-tôle et tôle-pion). Notons cependant que la répartition de chaleur entre ces deux sources n'est toujours pas bien déterminée. Le transfert de chaleur s'effectue essentiellement par conduction, selon la conductivité thermique du matériau à souder et la résistance thermique des interfaces, mais aussi par convection entre l'outil, le support, les plaques à souder et le milieu extérieur. Par ailleurs, les gradients thermiques apparaissant lors du soudage causent des dilatations thermiques qui provoquent l'apparition d'incompatibilités de déformations. La compréhension des phénomènes qui interviennent lors du FSW est d'autant plus complexe que plusieurs phénomènes physiques sont couplés. En outre, les phénomènes mécaniques et thermiques modifient la microstructure du matériau. En effet, plusieurs transformations microstructurales se produisent et sont gouvernées par l'échauffement de la matière. Ces transformations microstructurales modifient aussi les propriétés mécaniques. La modification de la microstructure est due à des

phénomènes métallurgiques qui concernent surtout la précipitation, la coalescence, la recristallisation et la restauration.

Concernant les alliages commerciaux qui sont généralement ceux utilisés pour le soudage, plusieurs phénomènes contribuent au durcissement (écrouissage, durcissements par précipitation, par effet de taille de grains). De plus, dans le cas des alliages à durcissement structural, l'état métallurgique final du joint soudé est déterminé par l'évolution de la température lors du soudage. Par ailleurs, durant l'opération de soudage, les phénomènes de restauration et de recristallisation interviennent surtout dans la zone proche de l'outil.

### **Interactions lors du soudage**

De manière générale, les différentes interactions à prendre en compte lors du soudage sont :

- les interactions thermique-métallurgique : les différentes phases présentes influent sur les propriétés thermo-physiques par exemple la diffusivité ou la conductivité (thermique -> métallurgique) et la distribution de température dépend des effets de chaleur latente qui accompagnent les transformations métallurgiques qui s'opèrent (métallurgique->thermique). Cependant, l'effet des chaleurs latentes peut être négligé pour un procédé tel que le FSW, car l'opération de soudage est réalisée à l'état solide
- les interactions thermique- mécanique : les propriétés mécaniques varient avec la température qui crée aussi des dilatations et contractions. Par ailleurs, la déformation irréversible conduit à une dissipation d'énergie sous forme de chaleur. Ainsi, la variation de température est due à la fois à la dissipation d'énergie plastique mécanique, mais aussi à l'apport de chaleur résultant du frottement outil/matière. Dans le cas d'un procédé tel que le FSW, avec de grandes déformations et grandes vitesses de déformation, la dissipation d'origine mécanique ne peut être négligée devant l'apport de chaleur provenant du procédé.
- les interactions métallurgique-mécanique : l'histoire métallurgique influe sur l'histoire mécanique (plasticité de transformation, contraction et dilatation dues aux transformations, restauration, hétérogénéité du matériau). D'autre part, les phénomènes mécaniques, en modifiant l'énergie stockée dans le matériau et sa structure atomique, peuvent influencer les transformations métallurgiques.

### **Déformation plastique**

Le soudage FSW peut être considéré comme une opération de mise en forme comme le forgeage ou l'extrusion, car le soudage est réalisé à l'état solide. Les mouvements de translation et de rotation de l'outil ont une influence sur la déformation plastique. L'écoulement de la matière autour de l'outil est cylindrique du fait du champ de vitesses tangentielles crée par le mouvement de rotation de l'outil 1.4a. La translation de l'outil produit un mouvement horizontal de matière 1.4b. Pour un outil fileté, l'écoulement de matière est vertical et peut se déplacer vers le bas ou vers le haut selon la géométrie des filets et du sens de rotation. La matière, confinée entre l'épaulement, le support inférieur et le matériau froid, est soumise à une succession de déplacements ascendants et descendants. 1.4c. Ainsi, l'écoulement de la matière est en forme de spirale et résulte de la combinaison de ces trois mouvements 1.4d[9, 10]. Pour des conditions de forces

et de températures données, la déformation maximale que peut subir le matériau ne peut excéder une certaine valeur à cause de la résistance du matériau à se déformer.

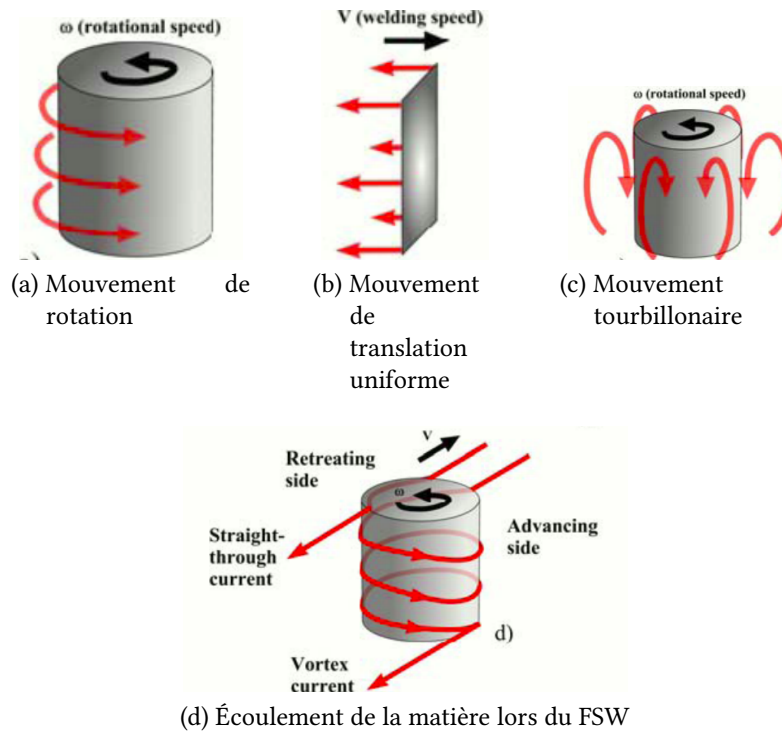


Figure 1.4: Description cinématique de l'écoulement de la matière [9, 10]

## 1.3 MATÉRIAU D'ÉTUDE

### 1.3.1 LES ALLIAGES D'ALUMINIUM À DURCISSEMENT STRUCTURAL

Du fait de leurs bonnes propriétés de mise en forme, les alliages d'aluminium sont de plus en plus utilisés dans divers secteurs comme l'aéronautique, l'automobile, l'industrie nucléaire. La nécessité de prendre en compte l'empreinte écologique, de faire des économies de carburants et d'améliorer l'efficacité structurale sont des facteurs qui poussent les secteurs aéronautiques et automobiles à concevoir des structures de plus en plus légères. L'aluminium, métal le plus abondant sur terre (sous forme de bauxite), est aussi l'un des plus légers utilisé dans l'industrie [11]. Les alliages d'aluminium sont très utilisés en industrie aéronautique de par leur bon compromis entre les propriétés physiques, mécaniques, thermiques, de corrosion et économique. Ils sont en général employés pour:

- leurs propriétés spécifiques ou propriétés statiques
- leur bonne résistance à la corrosion, déterminante en milieu marin, et appréciée dans de nombreuses applications
- leurs propriétés en fatigue (initiation des fissures)
- leur résistance à la propagation des fissures
- leur durabilité
- l'expérience accumulée suite à leur utilisation. En effet, les alliages d'aluminium sont relativement bien connus, ont déjà fait l'objet de nombreuses études si bien que le milieu industriel et académique en a une bonne connaissance.

Malgré les avancées récentes et prometteuses concernant notamment les matériaux composites à matrice polymère (notamment utilisé pour le Boeing 787 Dreamliner), les alliages d'aluminium sont encore majoritairement utilisés de nos jours et composent par exemple plus de 60 % de la masse structurale de l'Airbus 380.

Les alliages d'aluminium corroyés sont généralement classés en deux groupes selon qu'ils soient traitables thermiquement ou non. Les alliages des séries 1xxx, 3xxx, 5xxx ne sont pas traitables thermiquement et sont durcis par écrouissage. Les alliages des séries 2xxx, 6xxx, 7xxx et certains de la série 8xxx sont traitables thermiquement et durcissent majoritairement par précipitation. Plus particulièrement, les alliages des séries 2xxx et 7xxx sont les plus utilisés en industrie aéronautique, car ils sont à la fois légers et résistants. Les éléments d'alliages les plus utilisés sont le cuivre, le magnésium, le zinc et le silicium. Les principaux alliages d'aluminium sont ceux des systèmes aluminium-cuivre-magnésium (Al-Cu-Mg), aluminium-zinc-magnésium (Al-Zn-Mg) et aluminium-zinc-magnésium-cuivre (Al-Zn-Mg-Cu). Les propriétés statiques des alliages d'aluminium sont influencées par leur état structural (précipitation, recristallisation) résultant du traitement thermique. Les alliages des systèmes Al-Zn-Mg et Al-Zn-Mg-Cu présentent de meilleures caractéristiques statiques que les alliages Al-Cu-Mg. De plus, ces alliages sont principalement traités à l'état T6, ce qui leur confère de bonnes propriétés statiques et une résistance à la corrosion sous tension plutôt basse, ou à l'état T7 qui leur confère des propriétés statiques plutôt faibles et une bonne résistance à la corrosion sous tension.

Les alliages traitables thermiquement (Al-Cu-Mg, Al-Mg-Si, Al-Zn, Mg, Al-Li) ont leur dureté qui augmente suite à des mécanismes de durcissement par précipitation. Les propriétés mécaniques des alliages traitables thermiquement dépendent des revenus effectués, si bien que des revenus spécifiques sont choisis de telle manière à obtenir le meilleur compromis entre les propriétés mécaniques.

Parmi les alliages existants, ceux dits à durcissement structural se distinguent des alliages à durcissement par écrouissage. En effet, les alliages à durcissement structural ont des propriétés mécaniques influencées par le traitement thermique tandis que les alliages à durcissement par écrouissage sont plutôt sensibles à l'état de déformation plastique. Le réseau cristallin d'un métal contient des défauts comme les lacunes qui permettent l'introduction d'atomes étrangers (éléments d'alliages), et leur déplacement dans le réseau. Les éléments ajoutés (par exemple le magnésium, le cuivre, le zinc ou le silicium) peuvent se combiner entre eux et/ou avec l'aluminium pour former un réseau spécifique plus stable et différent de celui de la matrice d'aluminium qui contiendrait les atomes étrangers en solution solide. Ces entités possédant leur propre réseau cristallin sont appelées composés intermétalliques ou précipités. Les précipités jouent le rôle d'obstacles aux glissements susceptibles de se produire dans le réseau cristallin. Les précipités fins et bien dispersés sont plus efficaces pour bloquer les glissements. À température ambiante, un alliage à durcissement structural est généralement composé d'une solution solide en contact avec des précipités ce qui permet une augmentation de la dureté du matériau en s'opposant à la propagation des dislocations. Les traitements thermiques contrôlent la dispersion et la taille des précipités afin de moduler leurs effets. Cela permet d'obtenir par exemple la résistance mécanique maximale que peut offrir l'alliage. Les précipités sont formés durant la maturation ou le revenu qui suivent les étapes de mise en solution et trempe. La mise en solution consiste à maintenir l'alliage à haute température durant un certain temps (fonction de la taille de la pièce).

Cette étape permet de dissoudre la plupart des intermétalliques et précipités grossiers formés lors de la mise en oeuvre de l'alliage. Puis, un traitement thermique de trempe est appliqué à l'alliage. Celui-ci va être refroidi rapidement pour être généralement amené à température ambiante. La solution solide est alors dans un état hors équilibre dit sursaturé.

### Applications dans l'industrie

Les alliages d'aluminium sont très utilisés dans les industries aéronautique, automobile, militaire, et navale.

De manière générale, la conception des ensembles aéronautiques doit tenir compte de deux notions de base :

- la conception "fail-safe" où la propriété importante est la résistance à la propagation des criques, car la rupture ne doit pas mettre en danger l'appareil même lorsqu'une fissure s'initie
- la conception "safe-life" où la propriété principale est la résistance à l'initiation des criques, la fissuration étant prohibée pour une durée de vie donnée.

### 1.3.2 MATÉRIAU ÉTUDIÉ: L'ALLIAGE D'ALUMINIUM 2024

L'alliage d'aluminium 2024 présente un bon compromis entre la résistance mécanique et la tenue à la fatigue, le rendant intéressant pour les applications aéronautiques. La famille d'alliage 2XXX dont est issue le 2024 présente généralement une dureté plus élevée dans des états sous-revenu. Les principaux éléments d'alliages de la série 2xxx sont le cuivre et le magnésium. Ces éléments forment dans certaines conditions des précipités de taille nanométrique qui confèrent la plus grande partie de la résistance mécanique de ces alliages. Grâce à sa haute résistance mécanique et en fatigue, l'alliage 2024 est largement utilisé dans les structures d'aéronefs, notamment des structures d'ailes et de fuselage.

La décomposition d'une solution solide sursaturée dans le AA2024 lors de la précipitation est très controversée [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20] et fait encore de nos jours l'objet de recherches actives. Selon Wang et Starink [21], la séquence de décomposition de la solution solide sursaturée (SSSS) est la suivante :



Les zones GPB signifient zones de Guiner-Preston-Bagaryatsky, et sont différentes des zones de Guinier-Preston observées dans les alliages Al-Cu. La phase d'équilibre S a pour composition  $\text{Al}_2\text{CuMg}$  et une maille orthorombique de groupe d'espace Cmc<sub>m</sub> avec comme paramètres  $a=0.40$  nm,  $b=0.923$  nm, et  $c=0.714$  nm [22]. La phase S' est une version un peu distordue de la phase S [23] et n'est généralement pas considérée comme une phase distincte de la phase S. Une phase intermédiaire cohérente avec la matrice est notée dans la littérature soit GPB<sub>2</sub> ou S'' [24].

Pour notre étude, l'alliage 2024 utilisé est à l'état T351 ce qui correspond à une mise en solution à  $495 \text{ }^\circ\text{C} \pm 5 \text{ }^\circ\text{C}$ , suivie d'une trempe, d'un détensionnement (déformation permanente de 1% à 3%), et finalement d'une maturation à température ambiante. Cet état est généralement l'état dans lequel se trouve les tôles d'aluminium 2024 utilisées pour le soudage en industrie aéronautique. Sa composition chimique est indiquée dans la table 1.1.

Table 1.1: Composition chimique [fournisseur ALCAN, projet ADSAM]

Composition chimique	Cu	Mg	Si	Mn	Fe	Zn	Ti	Cr	Zr	Ni	Pb
% massique	4.11	1.3	0.08	0.47	0.18	0.22	0.03	< 100 ppm	< 100 ppm	< 100 ppm	< 100 ppm

## 1.4 MODÉLISATION ET SIMULATION DU FSW

### 1.4.1 MODÉLISATION

Le procédé de soudage par friction malaxage est un procédé complexe où des phénomènes thermiques, mécaniques, et métallurgiques interviennent. Du fait des multiples phénomènes mis en jeu, la simulation numérique du soudage par friction malaxage doit prendre en compte non seulement l'action de chaque phénomène (thermique, métallurgique, mécanique), mais aussi les différents couplages associés.

Selon les résultats attendus, diverses approches peuvent être utilisées. Les premiers modèles étaient analytiques et portaient surtout sur le champ de température [25, 26]. Les modèles analytiques sont peu flexibles et ne donnent que des indications thermiques.

Contrairement à la première approche qui repose uniquement sur la prise en compte des aspects thermiques, une seconde approche consiste à modéliser l'écoulement du matériau, et peut tenir compte de différents couplages thermo-mécanique ou thermo-mécano-métallurgique lors du procédé. Les sources de chaleur induites lors du FSW proviennent d'une part de la friction entre l'outil et la matière, et d'autre part de la dissipation thermique due à la déformation plastique, les phénomènes thermiques et mécaniques étant fortement couplés. De plus, le contact entre l'outil et la matière ayant une grande influence sur la chaleur générée, la bonne prise en compte de l'aspect tribologique est primordiale.

Les modélisations du FSW portent sur différents aspects, et, dans la littérature, il existe plusieurs modèles concernant la thermique, la loi d'écoulement du matériau, des modèles métallurgiques, des modèles thermo-mécaniques, et des modèles thermo-mécano-métallurgiques.

Par ailleurs, certaines études ont porté sur des modèles numériques simplifiés, notamment avec des modèles réduits qui sont basés sur l'identification des paramètres dominants [27, 28].

De manière générale, les modèles peuvent être classés en 3 catégories: thermique (analytique et numérique), mécanique, et thermo-mécanique. De plus, deux approches sont fréquemment utilisées :

- une approche basée sur la mécanique des solides, avec une formulation lagrangienne dans laquelle les grandes déformations du matériau et l'histoire du chargement sont pris en compte. Dans cette approche, la matière est assimilée à un solide élastoplastique ou élastoviscoplastique.
- une approche basée sur la mécanique des fluides, en formulation eulérienne, dans laquelle l'écoulement de la matière autour de l'outil est étudié. Dans cette approche, la matière est considérée comme un fluide purement visqueux

ou viscoplastique, avec une viscosité qui varie entre la zone proche de l'outil (chaude) et la zone plus éloignée (froide)

#### 1.4.1.1 Aspect thermique

La prédiction du champ de température étant primordiale, les premières tentatives de modélisation concernant le FSW portaient essentiellement sur l'aspect thermique. De plus, les difficultés liées à la mesure expérimentale de la température (précision limitée et difficulté d'effectuer des mesures dans les zones déformées) renforcent l'intérêt pour la simulation numérique. Ainsi, afin de modéliser les cycles thermiques, l'apport de chaleur a été étudié. Certains auteurs [29, 30] relient la puissance totale fournie par l'outil au flux de chaleur surfacique, issu du frottement outil/matière.

La première approche pour estimer les flux de chaleur est basée sur la déduction du flux à partir des mesures expérimentales de la température. La deuxième approche est basée sur la détermination du flux de chaleur par des modèles analytiques. Ces modèles ne prennent pas en compte la forme des outils et ne s'intéressent qu'à l'effet thermique [31, 32, 33].

#### 1.4.1.2 Aspect mécanique

La connaissance ou la modélisation de l'écoulement plastique du matériau permet de déterminer plus précisément la puissance de déformation plastique en se basant sur le champ de vitesses de déformations. Divers modèles de comportement mécanique ont été proposés pour la simulation du FSW. Plusieurs auteurs ont considéré un modèle de fluide visqueux pour la modélisation de l'écoulement de matière, notamment dans le voisinage de l'outil. De manière générale, les lois de fluide non-newtonien de type Norton-Hoff ou Sellars-Tegart sont les plus utilisées. Cependant, les modèles basés sur une approche fluide ne permettent pas directement d'avoir accès aux contraintes résiduelles. Des modèles basés sur la mécanique des solides sont utilisés à cet effet. Dans ces approches où le matériau est supposé se comporter comme un solide, des lois de comportement élastoplastiques ou élastoviscoplastiques sont souvent considérées. L'une des lois les plus utilisées est la loi de Johnson-Cook, classiquement utilisée pour les phénomènes d'impact ou de mise en forme à grande vitesse de déformation. Afin de tirer parti des avantages des deux approches, certains auteurs [34, 35] ont proposé des modèles mixtes, dans lesquels les approches basées sur la mécanique des fluides et sur la mécanique des solides sont utilisées.

#### 1.4.1.3 Sources de chaleur et échanges thermiques

Lors du FSW, les températures induites jouent un rôle clé pour l'obtention d'une bonne soudure, et les valeurs maximales atteintes sont de l'ordre de 80% de la température de fusion du matériau [36]. Une partie de travail plastique au sein du matériau est converti en chaleur (généralement supposée égale à 90%). Concernant l'interaction outil/matière, le flux de chaleur peut être calculé à partir de la chaleur dissipée par frottement [33] ou par la puissance totale fournie par l'outil [37].

Les échanges thermiques à prendre en compte sont :

- les échanges thermiques de la pièce avec l'air ambiant : communément modélisés en prenant en compte une convection naturelle avec un coefficient d'échange thermique  $h$ . Ce coefficient varie généralement entre  $10\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$  et  $30\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$  [38, 30]
- les échanges thermiques entre la pièce et l'outil

- les échanges entre les pièces et le montage : défini en tenant compte d'un coefficient de partage de chaleur entre l'outil et la matière en contact. Certains auteurs déterminent ce coefficient en se basant sur l'effusivité des deux matériaux en contact. Cependant, d'autres auteurs estiment la puissance totale perdue dans l'outil à 13 % [37] et 5% [39].

#### 1.4.1.4 Aspect métallurgique

Dans un procédé tel que le FSW, les cycles thermiques modifient la microstructure ce qui influence les propriétés mécaniques. Afin d'avoir des modèles plus complets, la prise en compte des phénomènes métallurgiques qui contribuent à la modification de la microstructure est primordiale. Dans le cas du FSW, les matériaux les plus utilisés sont les alliages d'aluminium à durcissement structural. Pour ces alliages, la précipitation est le phénomène prépondérant. Ainsi, la majorité des études se concentrent sur les alliages d'aluminium à durcissement structural et sur la précipitation.

##### quelques éléments sur la modélisation de la précipitation

Durant le traitement thermique, trois types de particules sont généralement présentes [40, 41, 42] :

- les intermétalliques qui se forment durant la solidification et ont une taille allant de quelques microns à plusieurs dizaines de microns
- les dispersoïdes, qui se forment durant l'homogénéisation et ont une taille comprise entre 0.05 et 0.5 micron.
- les précipités, qui se forment pendant la maturation ou le revenu.

Les phénomènes de durcissement par précipitation dans les alliages d'aluminium, ont fait l'objet, depuis leur découverte il y a plus de cent ans, de très nombreuses études expérimentales et théoriques. Plusieurs auteurs ont contribué à la mise en place des théories classiques du durcissement par précipitation [40, 43, 44, 45, 46] . La modélisation de l'évolution de la microstructure est généralement basée sur des approches physiques qui consistent à bien identifier les mécanismes mis en jeu puis à les traduire en équations mathématiques décrivant quantitativement le processus [47, 48] . Les mécanismes mis en jeu étant très complexes, les modèles sont développés avec plusieurs paramètres inconnus qui nécessitent tout d'abord une calibration avec des données expérimentales. Ces paramètres de même que les données expérimentales utilisées pour la calibration ont ainsi une grande influence sur la qualité des résultats obtenus. La modélisation de l'évolution de la microstructure peut être scindée en deux composantes : les modèles de précipitation et les modèles de durcissement structural. Les modèles de précipitation permettent de prédire l'effet des traitements thermiques sur l'état de précipitation, et ont fait l'objet de nombreuses études qui ont conduit à des modèles éprouvés comme les théories classiques de germination et de croissance (nous reviendrons sur ces modèles dans 2.2). Un modèle de précipitation comprend un modèle thermodynamique et un modèle cinétique (pour la prédiction de l'évolution de la fraction transformée en fonction du temps et de la température). La modélisation thermodynamique de la précipitation nécessite la connaissance précise du diagramme de phase qui est souvent difficile à déterminer. Plusieurs logiciels et techniques de calcul permettent de déterminer les diagrammes de phases [49, 50, 51] . Cependant, ces méthodes de calculs nécessitent l'accès à des bases de données thermodynamiques extrêmement précises qui sont souvent privées. Les alliages industriels Al-Cu-Mg sont généralement suffisamment dilués pour permettre l'utilisation d'un modèle de



solution régulière afin de déterminer la solubilité des différents précipités [52, 53, 54]. Concernant la modélisation de la cinétique de précipitation, plusieurs modèles ont été développés lors des quarante dernières années [55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62]. Dans le cas de la germination homogène, Wagner, Kampmann, and Voorhees [57] ont proposé une expression du flux de germination en fonction de plusieurs paramètres qui dépendent de la morphologie des précipités. Russel et Aaronson [63] ont déterminé les expressions de ces paramètres pour des précipités sphériques.

Le FSW est un procédé où s'opèrent divers phénomènes complexes et fortement couplés. De plus, les paramètres des échanges de chaleur qui dépendent directement du type de contact choisi ont un rôle clé au cours du soudage. Les grandes déformations, le malaxage, les lois de comportement, la thermique, le contact et les lois de frottement doivent donc être mieux compris et pris en compte. La modélisation et la simulation du FSW sont d'autant plus délicates que tous ces aspects qui ne sont pas toujours bien compris doivent être considérés.

## 1.4.2 SIMULATION DU FSW

### 1.4.2.1 Motivation, objectifs et intérêt de la simulation numérique du FSW

Le FSW est un procédé complexe, et l'obtention d'une soudure optimale dépend du choix des bons paramètres du procédé. Afin d'avoir une meilleure compréhension du procédé et d'améliorer ses performances, plusieurs études ont été menées. Les premières études ont été expérimentales, mais, du fait des avantages que procureraient des analyses numériques pertinentes, de plus en plus d'études numériques sont aussi effectuées sur le sujet. Les outils numériques peuvent permettre de mieux comprendre l'influence des paramètres du procédé sur les phénomènes qui interviennent lors du FSW. De plus, avec la simulation numérique, la visualisation et l'analyse de l'écoulement de la matière, du champ de températures, des contraintes durant l'opération est plus simple que lors d'essais expérimentaux. Par ailleurs, compte-tenu des changements microstructuraux importants (précipitation, recristallisation, etc.), les outils de simulation numérique apparaissent comme des moyens aidant à une meilleure compréhension du procédé, car ils peuvent fournir l'historique des sollicitations thermo-mécaniques nécessaires pour déterminer la microstructure finale des soudures.

### 1.4.2.2 Revue des techniques de simulation du FSW

Le développement des techniques de simulation numériques a fait l'objet de nombreuses études ces vingt dernières années. Plus particulièrement, dans le cadre d'un procédé tel que le FSW, l'intérêt croissant pour les techniques de simulation numérique font qu'elles sont toujours l'objet de recherches actives. La simulation numérique permet en effet d'éviter les contraintes liées aux essais expérimentaux (observation durant la soudure impossible, etc.). La simulation d'un procédé tel que le FSW est très complexe, car en plus des très grandes déformations et vitesses de déformation principalement dans la zone de malaxage proche de l'outil, elle implique aussi la prise en compte de multiples phénomènes physiques, mais aussi leurs couplages. Le challenge que représente la simulation d'un tel procédé a conduit la communauté scientifique à proposer diverses solutions de simulation pour améliorer la compréhension du procédé et réduire les temps de calcul.

La résolution des équations aux dérivées partielles associées à un problème thermomécanique passe par des méthodes de discrétisation du domaine (éléments finis,

volumes finis, etc.). Ainsi, ces méthodes nécessitent la construction sur le domaine d'un maillage qui contribue à la qualité des résultats numériques.

### **Méthode des éléments finis**

La plupart des études concernant la modélisation et la simulation du FSW ont été effectuées avec des approches numériques basées sur la méthode des éléments finis. La méthode des éléments finis est une méthode disposant d'une base théorique forte et est largement utilisée pour traiter un grand nombre de problèmes. Les équations peuvent être décrites par deux formulations classiques différentes: lagrangienne et eulerienne, ou par des formulations hybrides (Arbitraire lagrangienne eulerienne). Dans la formulation eulerienne, le maillage est fixe et n'est pas lié aux points matériels, mais plutôt aux points spatiaux, tandis que dans la configuration lagrangienne, le maillage est attaché aux particules et suit l'écoulement de la matière. L'utilisation des deux formulations l'une à la suite de l'autre est aussi possible.

**Formulation lagrangienne** La formulation lagrangienne est plus utilisée en mécanique du solide du fait de l'écoulement de matière qui reste limité. Faisant suite aux premiers travaux qui étaient surtout analytiques, des études basées sur la méthode des éléments finis appliqués à la mécanique des solides ont été effectuées [64, 65, 66]. La formulation lagrangienne présente deux caractéristiques principales qui sont que chaque particule est identifiée à partir de sa position dans sa configuration initiale et que toute grandeur physique est évaluée en fonction du temps et de la position dans sa configuration de référence (qui correspond à la configuration initiale). Ainsi, l'histoire thermo-mécanique de chaque particule est connue. Cela fait donc de la configuration lagrangienne une description judicieuse pour la simulation d'un procédé tel que le FSW, car les propriétés mécaniques du joint soudé dépendent de son état métallurgique qui lui-même dépend de la sollicitation thermo-mécanique des particules. Pour étudier les problèmes liés à l'évolution des champs de température, à la distribution des contraintes résiduelles, la formulation lagrangienne a été utilisée par plusieurs auteurs [67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74]. Par ailleurs, en plus de l'état résiduel de la soudure [29, 35], les efforts sur les outils peuvent être déterminés [75]. Cette formulation, outre le fait qu'elle permette de déterminer directement l'histoire thermomécanique de chaque particule a l'avantage de permettre de suivre la surface libre, de modéliser les bavures le long de l'outil. Cependant, dans le cadre d'un procédé tel que le FSW, les distorsions importantes dues aux grandes déformations nécessitent l'utilisation de remaillages fréquents, qui sont par ailleurs généralement réalisés dans une zone proche de l'outil. Ainsi, certains auteurs s'intéressent à la zone de malaxage, et utilisent une formulation lagrangienne avec un remaillage intensif [76, 70]. Toutefois, cela entraîne une augmentation importante des temps de calcul et augmente les risques de diffusion numérique, car d'une part, la nouvelle répartition des noeuds doit être déterminée, mais d'autre part, le transfert des champs thermo-mécaniques entre l'ancienne configuration et la nouvelle doit aussi être effectué. Toutes ces difficultés liées au traitement des grandes distorsions du maillage surtout dans la zone proche de l'outil font aussi que l'approche lagrangienne n'est pas adaptée pour représenter l'écoulement de matière.

**Formulation eulerienne** Afin de pouvoir simuler de manière adéquate l'écoulement de la matière lors du FSW, la prise en compte des grandes déformations est nécessaire. Ainsi, les méthodes basées sur la mécanique des fluides numériques (CFD) ont été étudiées. La formulation eulérienne est généralement plus utilisée en mécanique des fluides. Pour un procédé tel que le FSW, cette formulation permet la description de l'écoulement de la matière en s'affranchissant des problèmes de distorsions du maillage notamment dans la zone proche de l'outil. Cette formulation est généralement utilisée pour analyser l'écoulement de la matière [77, 78, 79, 80] et les facteurs influents comme le design de l'outil [77, 81, 28]. Avec une approche basée sur la mécanique des fluides, le matériau est représenté comme un fluide visqueux [82, 83, 28, 84]. Cependant, cette formulation présente aussi des inconvénients. L'histoire thermo-mécanique n'étant pas connue directement, les contraintes résiduelles et les distorsions des tôles ne peuvent être déterminées. Des calculs complémentaires sont alors nécessaires. De plus, la gestion du contact et des surfaces libres avec cette méthode restent difficiles. En effet, la matière s'écoulant dans un maillage fixe, cette formulation ne permet pas de prendre en compte le mouvement des surfaces libres. Ainsi, les défauts tels que les cavités sont difficilement simulables. Un autre inconvénient de cette formulation est le fait de ne pas pouvoir prendre en compte des géométries d'outils de formes complexes.

**Formulation ALE** La formulation arbitraire lagrangienne eulerienne (Arbitrary lagrangian eulerian) ou ALE est une formulation mixte qui permet de combiner l'avantage des formulations eulérienne et lagrangienne. Le maillage est modifié pendant l'écoulement et sa vitesse peut être différente de celle de la matière. Des termes convectifs supplémentaires apparaissent dans les équations d'équilibres et dépendent des vitesses de maillage et de la matière. Cette méthode a été utilisée pour simuler le FSW [85, 86, 87, 88]. Cependant, même avec l'utilisation de cette technique, le malaxage de la matière reste tout de même très difficile à simuler [89]. La simulation numérique avec la formulation ALE fait toujours l'objet de nombreuses études en cours.

### Méthodes sans maillage

Les difficultés liées à la gestion du maillage et qui sont associées à la méthode des éléments finis, et plus généralement aux méthodes basées sur la discrétisation du domaine, ont conduit à des développements actifs dont certains orientés vers d'autres méthodes telles que les méthodes sans maillage.

Les méthodes sans maillage reposent uniquement sur la position des noeuds. Parmi les méthodes sans maillages, se retrouvent aussi les méthodes particulières où la matière est considérée comme un ensemble de particules en interaction.

Ainsi, parmi les alternatives que représentent les méthodes particulières lagrangiennes, plusieurs études ont porté sur l'utilisation de méthodes comme la méthode SPH [90], la méthode des éléments naturels (NEM) [91] ou la méthode des éléments discrets (DEM) [92]. Par ailleurs, pour l'étude des phénomènes à l'interface outil-matière, certaines études ont porté sur le couplage de la méthode par éléments finis et de la méthode par éléments discrets [93, 94]

**SPH** La méthode SPH ou Smoothed Particle Hydrodynamics en anglais est une méthode développée en 1977 par Gingold et Monaghan [95, 96] et initialement utilisée en astronomie. La première utilisation de cette méthode pour la simulation du FSW

date de 2006 [97], où a été développé, selon les auteurs, un « modèle simpliste » pour étudier l'adéquation de la méthode au FSW. D'autres travaux concernant l'utilisation de cette méthode pour le FSW ont aussi été effectués [90, 98].

**NEM** Les travaux Alfaro et al. [91] sont à notre connaissance la première tentative de simulation numérique du FSW avec une méthode sans maillage. Ces travaux sont basés sur la méthode des éléments naturels [99]. La précision de cette méthode n'est pas affectée par la distorsion du maillage donc elle est naturellement adaptée aux grandes déformations et au comportement thermo- mécanique fortement couplé et non-linéaire du procédé de soudage par friction malaxage. Néanmoins, cette méthode n'est pas naturellement adaptée à d'autres phénomènes très présents dans le procédé FSW, notamment celui du contact. Ainsi, les auteurs supposent dans ce travail que le pion et le matériau sont parfaitement collés, ce qui conduit à surestimer la déformation créée au niveau du contact outil-matière.

## 1.5 MODÉLISATION ET SIMULATION AVEC LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS (DEM)

### 1.5.1 DIFFÉRENCES ENTRE LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS ET LES MÉTHODES BASÉES SUR LA MÉCANIQUE DES MILIEUX CONTINUS: AVANTAGES ET INCONVÉNIENTS

La méthode des éléments discrets (DEM), originellement utilisée pour étudier les matériaux granulaires, permet d'aborder des problèmes pour lesquels les modèles basés sur la mécanique des milieux continus sont peu adaptés. Cependant, plusieurs études ont été menées pour modéliser des matériaux continus avec la DEM. En revanche, l'une des difficultés réside dans le choix de lois d'interactions pour retrouver un comportement macroscopique satisfaisant. Parmi les méthodes numériques récemment développées, nombreuses sont celles qui concernent des échelles microscopiques, voire nanoscopiques. Cependant, à cette échelle, l'hypothèse de continuité de la matière n'est plus valable, et, il est alors nécessaire de prendre en compte dans le comportement d'un matériau, son comportement local. Les modèles de dynamique moléculaire permettent de prendre en compte la discontinuité de la matière à l'échelle nanoscopique, mais le passage de cette échelle à l'échelle de la mécanique qui permet de simuler le comportement d'une pièce ou d'un procédé n'est pas possible avec les moyens de calcul actuels. Une des solutions consiste donc à bâtir un modèle mésoscopique qui prend en compte un grand nombre de discontinuités, mais à une échelle permettant de simuler ensuite un volume compatible avec une étude mécanique. Les modèles par éléments discrets, historiquement développés pour modéliser les matériaux granulaires [100, 101], s'inscrivent dans cette optique.

Depuis quelques années, plusieurs études ont été menées afin d'utiliser la méthode des éléments discrets pour la simulation de matériaux continus [102, 103].

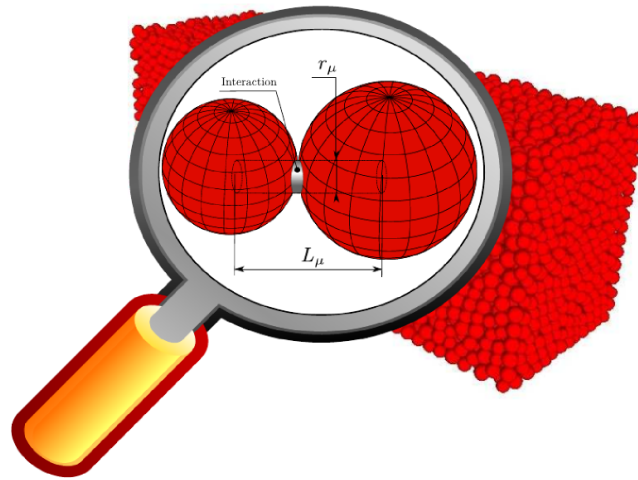
### 1.5.2 CALCUL DES INTERACTIONS ENTRE ÉLÉMENTS DISCRETS

La méthode des éléments discrets est une méthode où, à la différence des méthodes continues, la loi de comportement est définie à l'échelle microscopique (échelle des éléments discrets). Ainsi, pour définir une loi de comportement, les forces d'interactions doivent être définies à l'échelle des éléments discrets. Les travaux qui

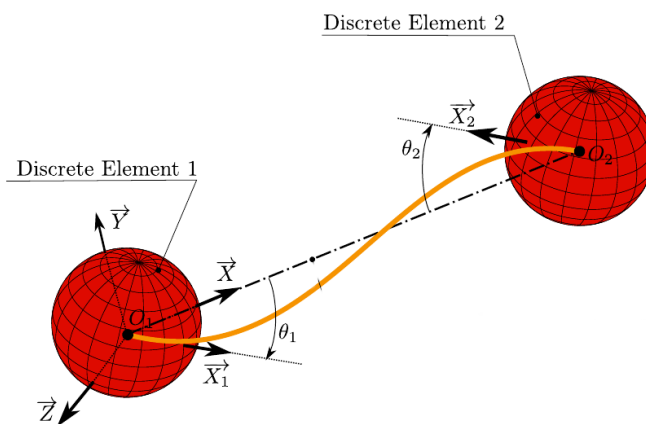
utilisent la méthode des éléments discrets pour faire des simulations mécaniques des matériaux continus peuvent être classés en deux groupes différents selon le type de loi d'interaction utilisée pour calculer les forces exercées sur chaque élément discret : l'approche basée sur des forces issues d'un potentiel et celle basée sur des forces issues de liens microscopiques. L'équation générale qui donne cette force est sous la forme :

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ji} (\vec{\delta}, \dot{\vec{\delta}}, \vec{\theta}, \dot{\vec{\theta}})$$

Dans cette équation,  $\vec{F}_{ji}$  est la force que l'élément discret  $j$  exerce sur son voisin  $i$ ;  $\vec{\delta}$  est le vecteur entre les barycentres des deux éléments discrets ;  $\dot{\vec{\delta}}$  est la vitesse relative entre les éléments discrets;  $\vec{\theta}$  représente un angle caractéristique entre les éléments discrets  $i$  et  $j$  et, finalement,  $\dot{\vec{\theta}}$  représente sa vitesse angulaire relative.



(a) Vue macroscopique



(b) Échelle des éléments discrets

Figure 1.5: Interaction entre éléments discrets

### 1.5.2.1 Force issue de liens microscopiques

Avec cette approche, les éléments discrets sont liés par différents types de liens cohésifs (poutres, ressorts-amortisseurs, cordes, etc.). Les positions, rotations et vitesses relatives définissent un torseur d'actions mécaniques et les interactions entre éléments discrets qui en découlent. Le torseur résultant dépend par ailleurs de la géométrie des liens et des éléments discrets, mais aussi des propriétés mécaniques

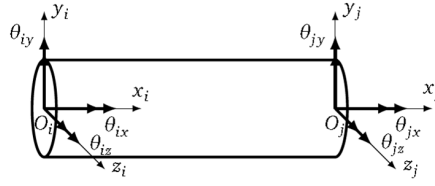


Figure 1.6: Poutre cylindrique d'Euler-Bernoulli

des liens. Les propriétés mécaniques microscopiques (à l'échelle des liens) doivent être déterminées pour obtenir les propriétés macroscopiques du matériau désiré. La méthode de détermination des propriétés microscopiques est soit analytique, soit empirique ou par calibration. Dans les travaux de André et al. (2012) [102], une méthode de calibration est mise en place pour des matériaux élastiques isotropes en utilisant des poutres cylindriques d'Euler-Bernoulli (figure 1.6).

### 1.5.2.2 force issue d'un potentiel

Dans cette approche inspirée de la dynamique moléculaire (DM), les forces d'interaction dérivent d'un potentiel. Pour un ensemble de particules (atomes en DM, éléments discrets en DEM), l'énergie potentielle totale du système est:

$$\Phi_{p_{\text{total}}} = \Phi_p^{\text{interaction}} + \Phi_p^{\text{extérieur}} \quad (1.2)$$

où  $\Phi_p^{\text{interaction}}$  et  $\Phi_p^{\text{extérieur}}$  sont respectivement l'énergie d'interaction entre tous les éléments du système et l'énergie potentielle d'origine externe (champ électromagnétique, champ de gravité, ...). La force  $F_i$  sur une particule  $i$  est égale au gradient de l'énergie potentielle totale du système par rapport à la position  $r_i$  de la particule.

$$F_i = -\text{grad}(\Phi_p(r_i)) \quad (1.3)$$

L'énergie potentielle d'interaction entre les différentes particules du système peut être décomposée selon les contributions suivantes :

- une énergie potentielle  $\Phi_{\text{interaction de paires}}$  due aux interactions entre chaque paire de particules. Elle s'exprime en fonction de potentiels de paires noté  $V_2$

$$\Phi_{\text{interaction de paires}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_2^{ij}(r_i, r_j)$$

- une énergie potentielle  $\Phi_{\text{correction}}$  correspondant à la correction des interactions de paires, car l'énergie potentielle d'une paire de particules dépend de la présence simultanée d'autres particules. Cette énergie potentielle de correction est une somme de termes de corrections. Parmi ces derniers, le plus courant est un potentiel à trois corps  $V_3$ , les termes d'ordre supérieur étant souvent négligés pour des raisons de temps de calcul. L'énergie potentielle de correction  $\Phi_{\text{correction}}$  peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\Phi_{\text{correction}} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq j} V_3^{ijk}(r_i, r_j, r_k) + \dots$$

L'énergie potentielle d'interaction peut ainsi se mettre sous la forme :

$$\Phi_p^{\text{interaction}} = \Phi_{\text{interaction de paires}} + \Phi_{\text{correction}}$$

De manière générale, l'énergie potentielle totale d'un ensemble d'atomes ou d'un ensemble d'éléments discrets (à l'échelle mésoscopique) est donc sous la forme :

$$\Phi_{p_{\text{totale}}} = \sum_i V_1(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_2^{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \frac{1}{3} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq j} V_3^{ijk}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (1.4)$$

### Potentiel d'interaction

Le potentiel d'interaction est souvent exprimé uniquement par des potentiels de paires pour minimiser les temps de calcul. Ce potentiel doit représenter les forces d'attractions et répulsions entre les particules. Parmi ces forces, deux catégories sont distinguées : les forces à faible rayon d'action (essentiellement les forces nucléaires répulsives) et les forces à long rayon d'action (forces électrostatiques, forces d'induction, forces de dispersion). De manière générale, l'énergie potentielle d'interaction d'une particule  $i$  peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\Phi_p^i = \sum_{j \neq i} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{\text{paire}}(\mathbf{r}_{ij}) + F\left(\sum_{j \neq i} f(\mathbf{r}_{ij})\right) \quad (1.5)$$

avec  $\Phi_{\text{paire}}$  fonction de paire représentant les forces à faible rayon d'action et électrostatiques

$F$  fonction tenant compte des forces d'induction et de dispersion

$\mathbf{r}_{ij}$  distance entre la particule  $i$  et la particule  $j$

Si  $F$  n'est pas nulle,  $V_2$  n'est plus un potentiel de paire, mais est plutôt qualifié de fonctionnelle de paire. Les potentiels les plus souvent utilisés sont des potentiels de paires. Les potentiels de paires sont adoptés pour les particules dont les interactions dominantes sont dues aux forces de Van Der Waals [104].

Exemples de potentiels de paires simples :

- Hard Sphere Potential
- Soft Sphere potential
- Square Well Potential
- Potentiel de Morse

Les potentiels de paires les plus utilisés sont ceux proposés par J.E. Lennard-Jones [105]. Ils contiennent deux termes représentant pour l'un, les forces attractives et pour l'autre, les forces répulsives. Un exemple est illustré sur la figure 1.7. Le potentiel  $\Phi_{L-J}$  de Lennard-Jones est décrit ci-dessous:

$$\Phi_{L-J}(\delta) = \epsilon \left[ \left( \frac{n}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-m} - \left( \frac{m}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-n} \right] \quad (1.6)$$

avec  $\delta$  distance entre deux particules  
 $\delta_{eq}$  distance d'équilibre entre deux particules, correspondant au minimum d'énergie potentielle  
 $\epsilon$  lié au minimum d'énergie potentiel ( $-\epsilon$ )  
 $m, n$  exposants liés aux parties répulsives et attractives de la force

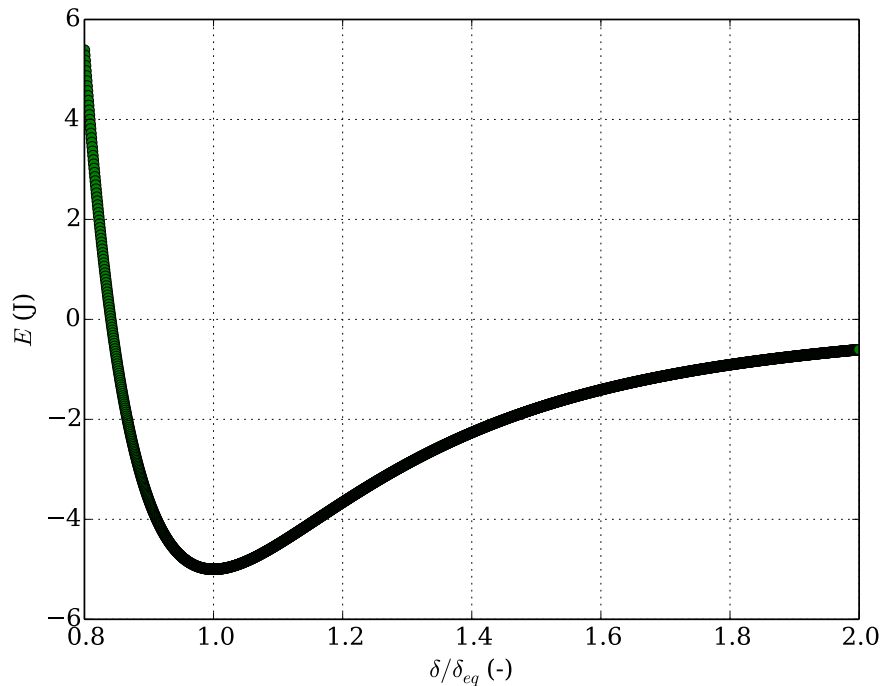


Figure 1.7: Exemple d'un potentiel de Lennard-Jones

## 1.6 CHOIX DE LA MÉTHODE DEM

### 1.6.1 INTÉRÊT DE LA DEM COMME MÉTHODE PARTICULAIRE

Certaines difficultés liées à l'utilisation des méthodes par éléments finis ou par différences finies, typiquement la difficulté liée au calcul des termes convectifs, la prise en compte dans le calcul des grandes déformations, l'analyse du transfert de matière, ont conduit à un certain nombre de travaux portant sur d'autres méthodes. Parmi ces alternatives figurent les méthodes particulaires qui prennent en compte de manière naturelle les termes convectifs et le transfert de la matière [106]. Ainsi, les méthodes particulaires sont adaptées pour observer le malaxage du matériau et s'affranchissent de certaines difficultés liées aux grandes déformations.

Par exemple, Terreros et al. (2009) [107] ont présenté un modèle où la loi mécanique est basée sur des forces d'adhésion. L'idée principale de cette loi est que l'adhésion décroît avec la température et augmente avec le déplacement. Les auteurs ont comparé la cohésion des particules à la dureté expérimentale le long du joint de soudure (figure 1.8) et ont montré que la cohésion est plus élevée dans le noyau (zone rouge sur la figure 1.9) que dans le métal de base (zone bleue sur la figure 1.9), mais aussi, que la cohésion est minimale (zone verte sur la figure 1.9) dans la région délimitée par le noyau de soudure et le métal de base. De plus, un exemple de réarrangement des particules après passage de l'outil est illustré (figure 1.10).



### 1.6.2 JUSTIFICATIONS

Les modèles par éléments discrets permettent d'aborder de nombreux problèmes tels que la multi-fissuration lors d'impact, l'usure et la tribologie pour lesquels les modèles basés sur la mécanique des milieux continus sont peu adaptés [108, 109, 110, 111]. La DEM est une méthode qui présente de nombreux avantages pour simuler le FSW, notamment à cause de sa gestion des aspects tribologiques et de sa simplicité lagrangienne. Chaque élément discret transporte ses propres propriétés, ce qui facilite aussi la gestion des aspects multiphysiques (mécanique, thermique, métallurgique, électrique, etc.). De plus, la méthode des éléments discrets permet d'allier certains avantages de la formulation lagrangienne (l'histoire de chaque particule) et de la formulation eulerienne (pas de déformation du maillage). Quelques études préliminaires ont été effectuées par Terreros et al. [107, 92], et, ont permis de montrer que la méthode pouvait être une alternative pour la simulation du comportement thermomécanique soumis à une sollicitation dynamique (impacteur ou outil dans le cadre du FSW ou de l'usinage). Le choix de lois d'interactions afin de retrouver les comportements macroscopiques désirés reste cependant l'une des difficultés de la méthode DEM.

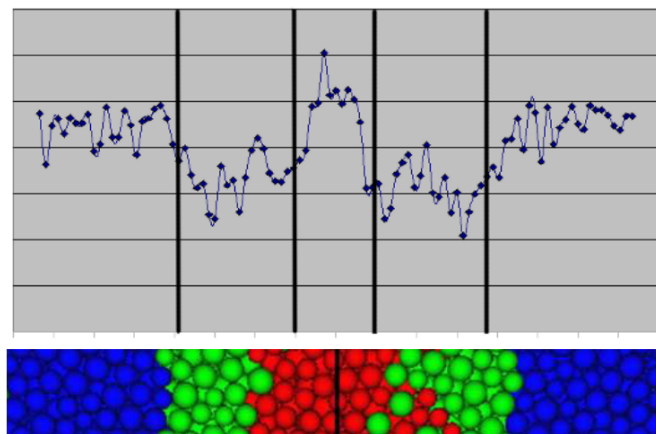


Figure 1.8: Comparaison entre dureté expérimentale et cohésion entre les particules dans le joint de soudure

### 1.6.3 OBJECTIFS

Dans le cadre des alliages des séries 2XXX, les sollicitations thermomécaniques conduisent à une évolution métallurgique locale qui aura un impact certain sur la tenue résiduelle de la pièce à des sollicitations ultérieures en statique ou en fatigue. La description lagrangienne naturelle de la matière par la méthode des éléments discrets permet à chaque élément de transporter sa propre histoire métallurgique. Dans un premier temps, les travaux porteront sur une modélisation DEM rigoureuse et pertinente du comportement macroscopique plastique d'un matériau continu. Dans une deuxième étape, le modèle devra prendre en compte le couplage mécano-métallurgique dans la loi de comportement du matériau à l'échelle des liens entre éléments discrets.

Des travaux antérieurs [112] ont permis de valider un modèle DEM pour la conduction thermique 3D entre les éléments discrets sur un domaine compact

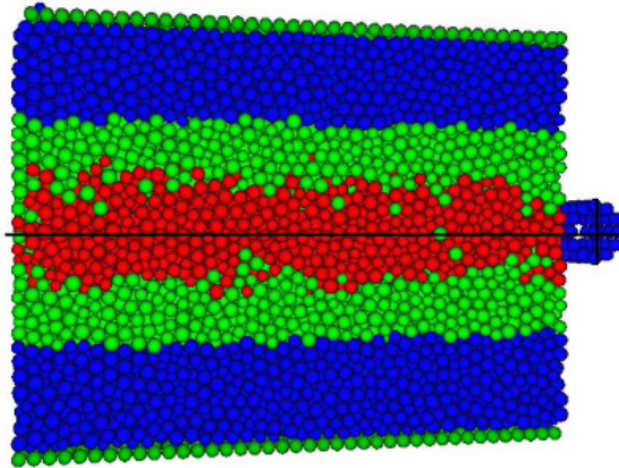


Figure 1.9: Cartographie de la cohésion entre les particules dans le joint de soudure: cohésion maximale (zone rouge), cohésion minimale (zone verte), cohésion du métal de base (zone bleue)

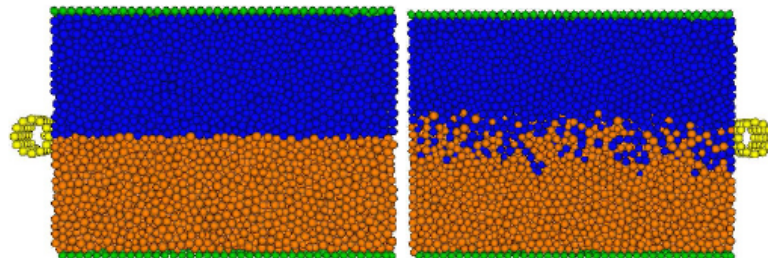


Figure 1.10: Visualisation du réarrangement des particules après passage de l'outil

homogène et isotrope représentant de la matière continue. Dans ces travaux, Terreros et al. décrivent une méthode qui associe un solide platonique virtuel à chaque élément et permet de résoudre les problèmes rencontrés liés à la nature granulaire du domaine discret, notamment les difficultés dues aux vides internes relatifs à la masse du matériau continu d'une part et aux contacts entre éléments discrets relatifs à la conductivité du matériau continu d'autre part. La comparaison des résultats obtenus à des simulations par éléments finis a montré que l'erreur relative était acceptable et que cette méthode était valide même dans les cas complexes avec de forts gradients de température.

À terme, l'enjeu scientifique sera le développement d'un modèle par éléments discrets couplant le comportement thermomécanique élasto-plastique à l'évolution métallurgique locale en fonction des sollicitations thermomécaniques.

## 1.7 SYNTHÈSE ET OBJECTIFS DE L'ÉTUDE

Nous avons vu dans ce chapitre, d'une part, l'intérêt que présente un procédé comme le FSW pour différents secteurs industriels, notamment la possibilité de souder certains alliages d'aluminium des séries 2XXX et 7XXX, réputés difficiles à souder pour d'autres procédés, et, d'autre part, l'intérêt d'une méthode numérique comme la méthode des éléments discrets pour simuler le procédé et donc apporter des outils permettant d'optimiser les paramètres de soudage par rapport aux propriétés mécaniques. Par ailleurs, pour ces alliages d'aluminium, leur état métallurgique, notamment de précipitation, doit également être pris en compte car leurs propriétés mécaniques y sont étroitement liées.

Les travaux présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans la lignée de modélisation du FSW ou des procédés de transformation de la matière dans lesquels la matière subit de grandes déformations et est dans un état pâteux. Pour arriver à cet objectif, certains travaux antérieurs basés sur la méthode des éléments discrets ont été effectués. Ils ont permis de mettre en place une méthode efficace sur la partie thermique, et de proposer un modèle mécanique basé sur des liaisons cohésives mais qui ne permettait pas de simuler les grandes déformations. La mise en place d'un modèle DEM complet mécano-thermo-métallurgique, nécessite la mise en oeuvre d'un modèle métallurgique et d'un modèle DEM mécanique valable en grandes déformations.

Les travaux exposés dans ce manuscrit ont donc pour objectifs de mettre en place, d'une part, un modèle de précipitation dépendant du cycle thermique, et, d'autre part, un modèle mécanique par éléments discrets valable en grandes déformations, afin de tendre vers un modèle complet mécano-thermo-métallurgique.



---

*All models are wrong but some are useful.*

– George Box

L'objectif de ce chapitre est notamment de présenter le modèle métallurgique concernant la modélisation de la précipitation. Les caractéristiques du matériau de l'étude seront rappelées, de même que les mécanismes de précipitation et les phénomènes à prendre en compte pour la modélisation. Dans un premier temps, le modèle de précipitation dans un alliage d'aluminium sera présenté. Ensuite, la création d'une plate-forme de calcul basée sur ce modèle sera décrite. Enfin, les résultats obtenus et les évolutions du modèle métallurgique seront discutés.

## Sommaire

---

2.1	Précipitation dans les alliages à durcissement structural . . . . .	<b>28</b>
2.1.1	Importance de la précipitation . . . . .	28
2.1.2	Influence de la précipitation sur les propriétés mécaniques- Influence du cycle thermique . . . . .	28
2.1.3	Mécanismes de précipitation . . . . .	28
2.2	Modélisation de la précipitation . . . . .	<b>30</b>
2.2.1	Thermodynamique . . . . .	30
2.2.2	Cinétique de précipitation . . . . .	43
2.2.3	État de l'art sur les modèles de précipitations existants . . . . .	47
2.2.4	Description du modèle choisi . . . . .	47
2.2.5	Bilan des hypothèses et des paramètres du modèle . . . . .	52
2.2.6	Algorithme de calcul . . . . .	54
2.3	Plate-forme de calcul C++ / python . . . . .	<b>55</b>
2.3.1	Description du modèle orienté objet . . . . .	55
2.4	Modèle de durcissement structural . . . . .	<b>58</b>
2.4.1	Mécanismes de durcissement par précipitation des alliages d'aluminium . . . . .	58
2.4.2	Modélisation du durcissement structural . . . . .	58
2.5	Validation . . . . .	<b>60</b>
2.5.1	Validation dans le cas de la maturation . . . . .	60
2.5.2	Dans le cas d'un cycle thermique . . . . .	65
2.6	Conclusion . . . . .	<b>67</b>

---

## **2.1 PRÉCIPITATION DANS LES ALLIAGES À DURCISSEMENT STRUCTURAL**

### **2.1.1 IMPORTANCE DE LA PRÉCIPITATION**

La précipitation est généralement très exploitée pour des procédés impliquant l'utilisation d'alliages d'aluminium ou de certains métaux non-ferreux. L'étude de la précipitation pour ces alliages dits à durcissement structural est importante, car leurs propriétés mécaniques sont modifiées par l'apparition de certaines particules appelées précipités. Cependant, cela n'est possible que sous certaines conditions thermiques, d'où l'importance des traitements thermiques. Ainsi, pour des procédés de soudage d'alliages à durcissement structural où les gradients thermiques sont très marqués, la compréhension et la prise en compte des phénomènes de précipitation sont particulièrement nécessaires.

### **2.1.2 INFLUENCE DE LA PRÉCIPITATION SUR LES PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES- INFLUENCE DU CYCLE THERMIQUE**

De manière générale, les propriétés mécaniques (limité d'élasticité, dureté, ...) de certains alliages peuvent être modifiées par les interactions solutés-dislocations, le contrôle de la taille de grain, le formage à froid, mais aussi par l'effet d'un traitement thermique dont les premières découvertes de l'influence sur le durcissement datent du début du 20<sup>e</sup> siècle. Les changements de propriétés mécaniques sous l'effet des traitements thermiques, sont induits par des changements de phase dans la solution solide. En effet, la variation de température a pour conséquence une modification de la limite de solubilité du système, favorisant ainsi les changements de phases comme la précipitation. Or, les propriétés telles que la limite d'élasticité et la dureté sont très dépendantes de la taille, de la fraction volumique et de la distribution des phases. Par exemple, le durcissement lié à la précipitation résulte de l'interaction entre le mouvement des dislocations et les précipités du fait que les champs de déformation autour des précipités et les précipités eux-mêmes sont des facteurs influençant les mouvements des dislocations. Par ailleurs, en fonction de la taille des précipités et du type d'alliage, une distribution critique où les propriétés sont maximales existe (figure 2.1).

### **2.1.3 MÉCANISMES DE PRÉCIPITATION**

Le moteur principal de la précipitation est l'écart à l'équilibre du système. La précipitation permet donc au système de tendre vers son état d'équilibre. En effet, si la solution solide est dans un état d'équilibre sursaturé, les solutés en sursaturation devront diffuser pour faire tendre le système vers son état d'équilibre. La solution solide se déchargeant, les éléments chimiques supplémentaires seront mis à contribution pour former des précipités. Toutefois, pour former des précipités, les conditions pouvant favoriser la diffusion (comme la température) sont tout aussi importantes pour faire passer le système d'un état sursaturé à un état d'équilibre.

Les traitements thermiques de durcissement des alliages d'aluminium correspondent aux traitements thermiques qui font suite aux étapes de solidification, d'homogénéisation et de mise en forme à chaud des alliages de corroyage. Pendant les étapes antérieures aux traitements thermiques, différentes phases peuvent se former. C'est le cas, d'une part, des composés intermétalliques grossiers (contenant

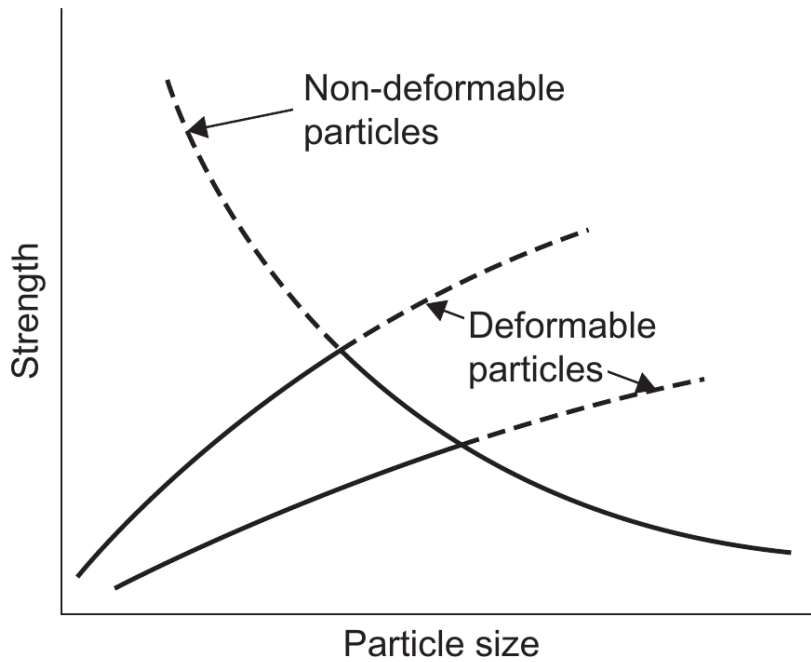


Figure 2.1: Variation de durcissement en fonction de la taille des particules déformables et non déformables [113]

des éléments tels que l'aluminium, le fer, le manganèse, etc.) formés lors de la solidification, et, d'autre part, des dispersoïdes (contenant des éléments tels que Mn, Fe, Cr, Zr). La séquence de traitements thermiques est généralement composée d'une mise en solution, d'une trempe, d'un éventuel écrouissage juste après la trempe, d'une maturation ou éventuellement d'un revenu. La mise en solution consiste à chauffer le matériau jusqu'à une certaine température (495 °C pour l'alliage d'aluminium 2024, et, de manière générale, entre 400 °C et 550 °C) supérieure à la température du solvus de façon à mettre en solution les atomes de solutés. L'étape de trempe ultérieure permet, d'une part, de refroidir l'alliage suffisamment rapidement pour éviter la décomposition de la solution solide en précipités grossiers, et, d'autre part, de figer ou de piéger les lacunes qui étaient très nombreuses à haute température pendant la mise en solution. La solution solide est alors sursaturée en solutés et en lacunes, donc dans un état hors équilibre. Cela favorisera plus tard la décharge de la solution solide en éléments d'alliages conduisant ainsi à la précipitation. Au cours de la maturation, où le matériau est maintenu à température ambiante, la solution solide se décompose généralement en précipités très fins qui sont de petites zones d'amas d'atomes de solutés, communément appelées "zones de Guinier-Preston". Par ailleurs, ces zones sont telles que la continuité du réseau cristallin est assurée (voir 2.2.1.2), et ont une forme et une structure cristallographique qui varie selon les alliages considérés. L'opération de revenu qui consiste en un chauffage à température limitée (entre 100 °C et 200 °C pour les alliages d'aluminium) accentue la décomposition de la solution solide, et pousse le système dans un autre état d'équilibre métastable qui favorise la dissolution des zones de Guinier-Preston et l'apparition d'autres types de précipités.

## 2.2 MODÉLISATION DE LA PRÉCIPITATION

La modélisation de la précipitation distingue de manière idéale trois étapes : germination, croissance, et coalescence. Dans un premier temps, le nombre de précipités augmente, c'est la germination. Au cours de la croissance (pure c'est-à-dire sans germination), il n'y a plus de nouveaux précipités créés et leur nombre n'augmente pas. Enfin, les plus gros précipités grossissent au détriment des plus petits et ainsi le nombre de précipités diminue, c'est le stade de coalescence. Ce découpage est surtout conceptuel, et dans la réalité ces étapes se superposent.

Avant d'aborder la modélisation de ces différentes phases, il est nécessaire de bien comprendre les concepts thermodynamiques fondamentaux nécessaires à leur modélisation.

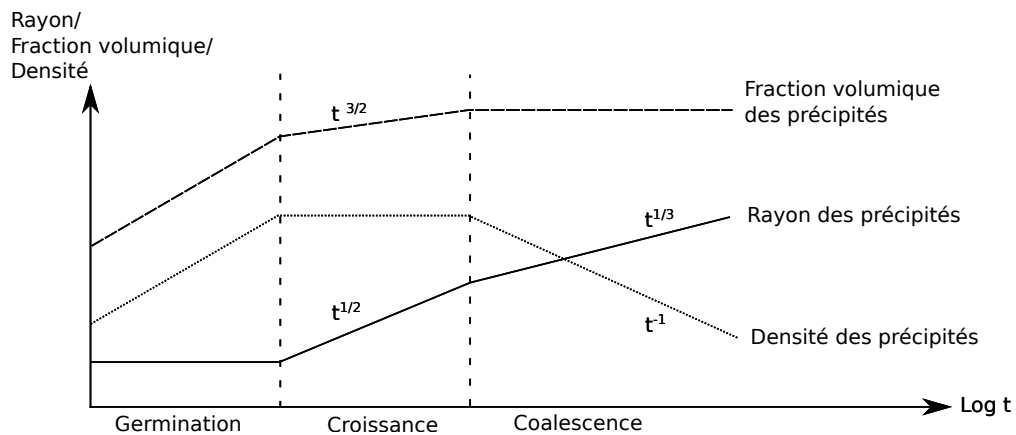


Figure 2.2: Évolution de la précipitation durant un traitement isotherme [114]

### 2.2.1 THERMODYNAMIQUE

Parmi les concepts fondamentaux liés à la thermodynamique de la précipitation, l'enthalpie libre de Gibbs est très importante, car elle permet la description thermodynamique du système. L'énergie libre de Gibbs ou enthalpie libre  $G$  est une fonction d'état résultant des premier et second principes de la thermodynamique qui permettent d'étudier l'évolution d'un système :

$$G = H - TS \quad (2.1)$$

avec,  $H$ , l'enthalpie,  $S$ , l'entropie, et  $T$ , la température. Lorsque la variation de l'enthalpie libre de Gibbs est négative ( $\Delta G < 0$ ), la réaction se déroule de manière spontanée. Par contre, si la variation d'enthalpie libre de Gibbs est positive ( $\Delta G > 0$ ), un apport d'énergie externe au système est nécessaire. Pour que la germination soit possible, l'énergie libre de Gibbs du système (dans notre cas, la solution solide sursaturée) doit nécessairement diminuer. L'enthalpie libre comprend une partie liée à l'enthalpie molaire de formation d'un précipité, mais aussi une partie liée aux barrières thermodynamiques s'opposant à la germination.



### 2.2.1.1 Enthalpie libre molaire de formation d'un précipité

Afin de mieux comprendre les principes liés à la modélisation de l'énergie libre de changement de phase, un rappel des certains concepts est nécessaire.

#### Quelques concepts thermodynamiques

**Le potentiel chimique** Le potentiel chimique est une grandeur qui traduit son état d'énergie au sein d'une phase donnée.

Thermodynamiquement, le potentiel chimique d'un atome peut s'interpréter comme la variation d'énergie libre de Gibbs associée à une modification infinitésimale de la quantité de matière  $n$  de cet atome dans le système, le tout à entropie et à volume constant.

$$\mu = \frac{\partial G}{\partial n} \quad (2.2)$$

D'une manière générale, dans un système polyphasé, le potentiel chimique ou enthalpie libre molaire partielle  $\mu_j^\alpha$  d'un constituant  $j$  dans une phase  $\alpha$  est la variation d'énergie libre du système, lorsque la quantité de matière ( $n_i^\alpha$ ) de ce constituant varie infinitésimalement ( $dn_i^\alpha$ ), et lorsque la température, la pression et la composition du système restent constants :

$$\mu_j^\alpha = \left( \frac{\partial G}{\partial n_j^\alpha} \right)_{T, p, n_k^\beta, (k, \beta) \neq (j, \alpha)} \quad (2.3)$$

Par ailleurs, le potentiel chimique ( $\mu_A$  ou  $g_A$ ) d'un atome  $A$  dans un milieu de type solution solide peut aussi s'exprimer à partir du potentiel chimique standard  $\mu_A^0$  de ce constituant, de son activité  $a_{A_{ss}}$  dans la solution solide et de la température  $T$  :

$$\mu_A(T) = \mu_A^0 + RT \ln(a_{A_{ss}}) \quad (2.4)$$

avec  $R$ , la constante des gaz parfaits.

**Condition d'équilibre dans un système polyphasé** L'équilibre de phase est obtenu dans un système polyphasé dès lors que le potentiel chimique de chaque atome est identique dans l'ensemble des phases. De plus, il est bien connu que si dans un système, le potentiel chimique des atomes est différent dans chaque phase, alors, le transfert de matière se fait vers la phase où le potentiel chimique est le plus bas : c'est le principe d'évolution spontanée.

#### Enthalpie libre molaire

**Enthalpie libre molaire et changement de phase** Lorsque la solution solide est sursaturée en soluté, le mécanisme de germination de nouvelles phases riches en solutés peut débuter et se déroule en plusieurs étapes. Tout d'abord, au hasard dans l'espace et dans le temps, quelques amas nanométriques riches en solutés se développent (état 1, figure 2.3a) par diffusion atomique, ce qui tend à modifier la composition chimique de la solution solide environnante. La composition de ces amas est celle du précipité stable ou métastable, mais leur structure reste celle de la solution solide. Si les amas ont une composition plus riche en éléments chimiques que la

solution solide sursaturée "initiale", alors cette dernière s'appauvrit légèrement.

Ensuite les amas stables vont changer de structure cristalline pour adopter celle du précipité (état 2, figure 2.3b) . Ceci s'accompagne alors d'un gain d'enthalpie libre appelé enthalpie libre de changement de phase  $\Delta G_v$ . Finalement, le nombre de précipités stables va progressivement augmenter jusqu'à ce que la solution solide atteigne sa composition d'équilibre (état 2).

L'enthalpie libre molaire  $\Delta G_M$  (ou volumique  $\Delta G_V$ ) de changement de phase correspond donc au gain d'enthalpie libre lors du passage de l'état 1 à l'état 2, c'est à dire lors de la germination.

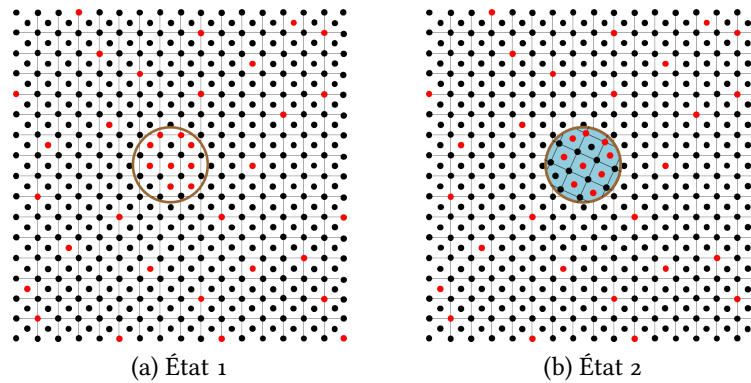


Figure 2.3: Germination d'un précipité

### Modélisation de l'enthalpie libre molaire

**Hypothèse de solution idéale ou de solution régulière et énergie libre molaire de la solution solide** Supposons une solution solide binaire A-B. Son énergie libre de Gibbs dépend :

- de l'énergie libre molaire de Gibbs  $g_0^A$  de l'élément pur A;
- de l'énergie libre molaire de Gibbs  $g_0^B$  de l'élément pur B;
- d'un terme de mélange  $\Delta G_{mix}$  traduisant l'interaction entre les atomes A et B.

Dans le cas totalement théorique d'une solution où il n'y aurait pas d'interactions entre les atomes A et les atomes B, l'énergie libre de la solution solide s'exprimerait comme suit :

$$G^{ss} = n_T(X_A g_A^0 + X_B g_B^0)$$

avec  $n_A$  (respectivement  $n_B$ ) le nombre de moles de A (respectivement de B),  $X_A$  (respectivement  $X_B$ ) la fraction molaire de A (respectivement de B) et  $n_T$  ( $n_T = n_A + n_B$ ).

Dans une solution solide où les atomes A et B interagissent entre eux, un terme d'énergie libre de mélange  $\Delta G_{mix}$  vient modifier l'énergie libre de la solution solide qui s'exprime alors comme suit :

$$\begin{aligned} G^{ss} &= n_T(X_A g_A^0 + X_B g_B^0) + \Delta G_{mix} \\ &= n_T(X_A g_A^0 + X_B g_B^0) + \Delta H_{mix} - T\Delta S_{mix} \end{aligned}$$

L'entropie de mélange  $\Delta S_{mix}$  est exprimée comme suit :

$$\Delta S_{mix} = -n_T R (X_A \ln X_A + X_B \ln X_B)$$

Pour une solution régulière, le terme d'enthalpie de mélange  $\Delta H_{\text{mix}}$  ne dépend que des enthalpies des liaisons A-A, A-B, et B-B entre premiers voisins, et s'exprime en fonction des coefficients d'activités ( $\beta_A$  et  $\beta_B$ ) comme suit :

$$\Delta H_{\text{mix}} = n_T X_B RT \ln \beta_B + n_T X_A RT \ln \beta_A$$

Pour une solution idéale, le terme d'enthalpie de mélange est nul ( $\Delta H_{\text{mix}} = 0$ ), car les enthalpies de liaisons sont égales entre elles ( $H_{A-A} = H_{B-B} = H_{A-B}$ ).

En tenant compte des expressions de l'enthalpie de mélange et de l'entropie de mélange, l'énergie libre de Gibbs de la solution solide régulière s'exprime par :

$$G^{\text{ss}} = n_T X_A \left( g_A^0 + RT \ln \beta_A X_A \right) + n_T X_B \left( g_B^0 + RT \ln \beta_B X_B \right) \quad (2.5)$$

Si la solution solide est supposée régulière et suffisamment diluée alors :

- le solvant A se comporte comme un composé pur ( $a_A = \beta_A X_A = 1$ );
- la concentration du soluté B est suffisamment faible et son coefficient d'activité est égale à l'unité ( $\beta_B = 1$ ).

En conséquence, pour une solution solide régulière diluée, l'énergie libre  $G^{\text{ss}}$  et l'énergie libre molaire  $G_n^{\text{ss}}$  de Gibbs s'expriment comme suit :

$$G^{\text{ss}} = n_T X_A g_A^0 + n_T X_B \left( g_B^0 + RT \ln X_B \right) \quad (2.6)$$

$$G_n^{\text{ss}} = X_A g_A^0 + X_B \left( g_B^0 + RT \ln X_B \right) \quad (2.7)$$

**Énergie de Gibbs molaire d'un précipité de rayon infini (interface plane avec la solution solide)** Soit un précipité  $A_x B_y$  en équilibre avec la solution solide de composition  $X_B^{\text{eq}}$  au travers d'une interface plane. L'enthalpie libre molaire  $g_n^p$  (J/moles précipité) s'exprime comme suit :

$$g_n^p = x g_A^p + y g_B^p \quad (2.8)$$

avec  $g_A^p$  le potentiel chimique de A dans le précipité (J/mole A)

$g_B^p$  le potentiel chimique de B dans le précipité (J/mole B)

$x$  coefficient stœchiométrique  $\left( \frac{\text{mole A}}{\text{mole précipité}} \right)$

$y$  coefficient stœchiométrique  $\left( \frac{\text{mole B}}{\text{mole précipité}} \right)$

Si la solution solide est en équilibre avec le précipité, alors le potentiel chimique de chaque éléments chimique est identique dans chaque phase (voir 2.2.1.1) donc:

$$\begin{aligned} g_A^p &= g_A^{\text{ss eq}} \\ g_B^p &= g_B^{\text{ss eq}} \end{aligned}$$

Par conséquent, l'équation 2.8 devient :

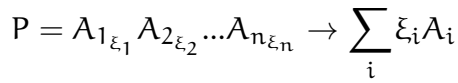
$$g_n^p = xg_A^{ss_{eq}} + yg_B^{ss_{eq}}$$

Et si de plus la solution solide est supposée régulière diluée, l'enthalpie libre molaire est alors exprimée comme suit :

$$g_n^p = xg_A^0 + y \left( g_B^0 + RT \ln(X_B^{ss_{eq}}) \right) \quad (2.9)$$

**Détermination des concentrations d'équilibres** La stabilité thermique d'un précipité est très dépendante de son solvus. Les solvus d'équilibre de phases stables ou métastables à une température donnée sont difficiles à déterminer et ne sont pas toujours disponibles. A cet effet, des méthodes numériques et logiciels ont été développés. Cependant, dans le cas de l'alliage 2024 comme dans la plupart des alliages d'aluminium industriels, les solutés à l'origine de la précipitation durcissante sont introduits en concentration suffisamment faible ce qui permet d'utiliser le modèle de la solution régulière pour déterminer les solvus d'équilibres des phases et prévoir leur stabilité[53, 115]. Dans ce modèle, il y a précipitation si le produit des concentrations volumiques des solutés est supérieur au produit de solubilité du précipité.

Soit un précipité de composition fixe  $A_{1_{\xi_1}} A_{2_{\xi_2}} \dots A_{n_{\xi_n}}$  en dissolution suivant la réaction :



avec  $A_1$ , le constituant principal, et  $A_2, A_3, \dots, A_n$ , les éléments d'alliages. À l'équilibre, la constante d'équilibre ou produit de solubilité est exprimée comme suit :

$$K_{eq}^P = \frac{\prod_{i=1}^n (a_{eqA_i})^{\xi_i}}{a_p} \quad (2.10)$$

avec  $a_p$  représentant l'activité du précipité P et les  $a_{eqA_i}$  les activités des éléments  $A_i$  dans la solution solide d'équilibre. Pour une solution régulière suffisamment diluée, l'activité du solvant est égale à 1 ( $a_{eqA_1} \approx 1$ ) et les activités des éléments d'alliages peuvent être remplacées par les concentrations molaires d'équilibres ( $a_{eqA_i} \approx X_{eqA_i}$ ). D'autre part,  $a_p = 1$  (composé solide pur). Il en découle que :

$$K_{eq}^P = \prod_{i=2}^n (X_{eqA_i})^{\xi_i} \quad (2.11)$$

Par ailleurs, l'énergie libre standard de Gibbs d'une réaction de précipitation effectuée à température et pression constante est reliée à la constante d'équilibre par la relation :

$$\Delta G^P = \Delta H^P - T \Delta S^P = -RT \ln K_{eq}^P \quad (2.12)$$

où  $\Delta H^P$  est l'enthalpie standard de la réaction ou l'enthalpie de formation du précipité P,  $\Delta S^P$  l'entropie standard de la réaction ou l'entropie de formation du précipité P, R

la constante universelle des gaz parfaits et T la température absolue.

Il s'ensuit finalement que :

$$\ln \left[ \prod_2^n (X_{eqA_i})^{\xi_i} \right] = -\frac{\Delta H^P}{RT} + \frac{\Delta S^P}{R}$$

$$\Leftrightarrow \prod_2^n (X_{eqA_i})^{\xi_i} = K_P \exp \left( -\frac{\Delta H^P}{RT} \right) \quad (2.13)$$

avec  $K_P$  une constante lié à l'entropie standard de la réaction.

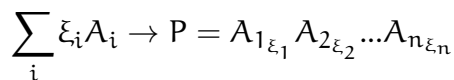
Cette relation permet d'estimer le solvus d'équilibre d'un précipité en fonction de la température. Bien que la relation 2.13 permette d'estimer le solvus d'équilibre d'un précipité en fonction de la température, elle n'est pas suffisante pour déterminer chaque concentration d'équilibre. Dans le cas d'un précipité ternaire, une deuxième relation est nécessaire. Cette relation provient soit de l'hypothèse de l'égalité des vitesses de croissance du précipité quelque soit le soluté considéré, soit de l'hypothèse pseudo binaire [53] dans le cas d'un alliage pseudobinaire. Dans le cadre de notre modèle, cette deuxième relation sera établie en supposant une égalité des vitesses de croissance du précipité quelque soit le soluté considéré (voir la relation 2.31 dans la section 2.2.2.1).

### 2.2.1.2 Énergie totale de germination et barrières thermodynamiques

Pour qu'une transformation puisse s'effectuer, il est nécessaire que l'enthalpie libre  $\Delta G$  du système diminue. Lors de la germination à partir d'une solution solide sursaturée, trois types de contribution énergétique composent l'enthalpie libre du système. Tout d'abord, un terme d'ordre chimique correspondant à l'enthalpie libre volumique de changement de phase  $\Delta G_V$  (ou Énergie libre de Gibbs pour le changement de phase), et, représentant le changement de réseau cristallin d'un certain volume de matière initialement de type solution solide et devenant le précipité. Ensuite, deux autres termes représentent pour l'un, l'enthalpie libre surfacique  $\Delta G_S$  et, pour l'autre, l'enthalpie libre volumique de distorsion élastique  $\Delta G_{el}$ . Généralement, la transformation d'une phase en une autre phase se manifeste par l'apparition de germes de la nouvelle phase, c'est-à-dire de petits éléments de volume qui sont séparés de la phase mère par une interface d'énergie superficielle  $\gamma_{P/SS}$  et qui sont déformés élastiquement à cause du désaccord entre le réseau du précipité et celui de la matrice ou à cause de leur volume molaire différent. La germination s'accompagne donc d'une variation globale d'enthalpie libre  $\Delta G$  qui est la somme de ces trois contributions.

#### Énergie libre de changement de phase $\Delta G_V$

De manière générale, dans le cas de la précipitation d'un composé P stoechiométrique dans une solution solide suivant la réaction de précipitation



avec  $A_1$  le solvant et  $A_2, A_3, \dots, A_n$  les éléments d'alliages.

L'énergie de Gibbs volumique  $\Delta G_V$  ( $J/m^3$ ) de changement de phase est donnée par la relation :

$$\Delta G_V = \frac{RT}{V_{m-p}} \ln \left( \frac{\prod_i (a_{eqA_i})^{\xi_i}}{\prod_i (a_{ssA_i})^{\xi_i}} \right) \quad (2.14)$$

avec	$a_{ssA_i}$	activité de l'élément chimique $A_i$ dans la solution solide sursaturée
	$a_{eqA_i}$	activité de l'élément $A_i$ dans la solution solide d'équilibre
	$\xi_i$	coefficient stœchiométrique de l'élément $A_i$ dans le précipité P
	$V_{m-p}$	volume molaire du précipité ( $m^3/mole$ précipité)
	R	constante des gaz parfaits
	T	température

### Énergie libre de surface $\Delta G_S$

L'énergie de surface  $\Delta G_S$  ou  $\gamma$  ( $J/m^2$ ) résulte, d'une part, de la modification des liaisons chimiques à travers l'interface entre le précipité et la solution solide, d'autre part de l'énergie stockée dans les dislocations interfaciales. En effet, les atomes de part et d'autre de l'interface ne peuvent pas toujours être arrangés de manière à ce qu'ils soient tous séparés par leurs distances habituelles dans la solution solide. L'énergie de liaison entre ces atomes est donc modifiée et correspond à une partie de l'énergie d'interface. L'autre partie correspond à l'introduction d'éventuelles dislocations venant accommoder les écarts de réseaux cristallins des deux entités précipités et solution solide. Notons par ailleurs que l'énergie d'interface dépend de la température. Cependant, dans la plupart des cas, une énergie d'interface indépendante de la température est considérée. Dans certains alliages comme le 2024-T351, il pourrait être nécessaire de complexifier la dépendance de l'énergie d'interface par rapport à la température et à la taille des précipités[116]. L'interface précipité/matrice est caractérisée par sa cohérence cristallographique, définie par le degré d'adéquation entre les deux réseaux cristallins. Différents types d'interfaces sont rencontrés (figure 2.4) :

- Les interfaces cohérentes : le paramètre de maille de la matrice est égal à celui du précipité, et leurs réseaux cristallographiques sont similaires. Dans ce cas, il n'y a pas de dislocations à l'interface, et l'énergie d'interface est alors très faible;
- Les interfaces semi-cohérentes : il existe à l'interface, quelques dislocations venant accommoder les écarts de réseaux cristallins. Les paramètres de maille de la matrice et du précipité sont légèrement différents;
- Les interfaces incohérentes : à l'interface entre la matrice et le précipité, un très grand nombre de dislocations viennent accommoder les désaccords entre les paramètres de maille, mais aussi l'inadéquation entre les orientations cristallographiques. Cela induit une grande quantité d'énergie stockée à l'interface et donc une énergie d'interface  $\gamma$  élevée.

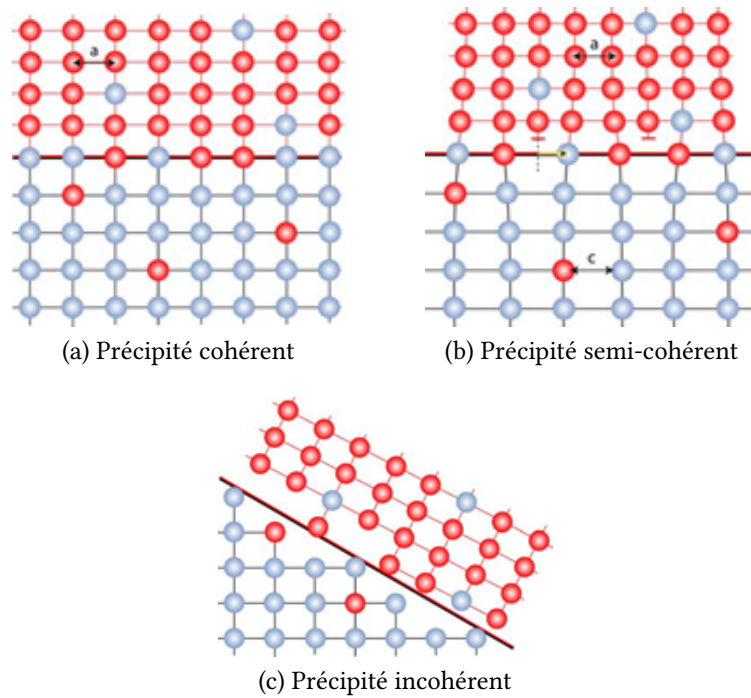


Figure 2.4: Types de précipités selon l'interface matrice/précipité

Par ailleurs, l'éventuel changement d'interface est aussi une conséquence de l'évolution de la précipitation (figure 2.5). En effet, puisque d'une part l'évolution de la précipitation correspond à la croissance de précipités existants, et, d'autre part, à l'apparition éventuelle de nouveaux précipités de composition chimique différente, une accommodation est nécessaire à l'interface entre les précipités et la solution solide. Cela explique le changement d'interface.

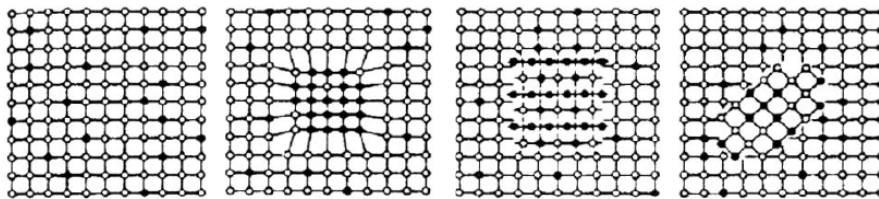


Figure 2.5: Changements d'interfaces durant la précipitation

### Énergie élastique de distorsion des réseaux

L'énergie de distorsion élastique résulte du désaccord entre le réseau de la matrice et celui du précipité, de la différence entre le volume molaire du précipité et celui de la matrice, mais aussi de la forme du précipité et la cohérence de l'interface. Si les paramètres de réseaux entre la matrice et le précipité diffèrent légèrement, le réseau se déforme élastiquement près de l'interface engendrant une certaine énergie de déformation. Avec l'augmentation de cette énergie de déformation, il peut devenir énergétiquement plus favorable de remplacer l'interface cohérente par une interface semi-cohérente dans laquelle la déformation élastique est accommodée par des dislocations interfaciales. Cela conduit à une baisse de l'énergie de déformation et à une augmentation de l'énergie d'interface. Au fur à mesure que la taille du précipité

augmente, l'énergie d'interface par unité d'aire augmente (car progressivement l'interface cohérente devient semi-cohérente puis incohérente) et l'énergie élastique due à l'écart de paramètre de maille diminue, conduisant ainsi à une énergie de distorsion élastique uniquement due à la variation de volume molaire. Quelques modèles issus de la littérature sont recensés ci-dessous :

- Selon Barnett et al. (1974) [117], l'expression de l'énergie de distorsion par unité de volume  $\Delta G_{el}$  pour un précipité sphérique et cohérent est donnée par :

$$\Delta G_{el} = 3\delta_{mp}^2 \chi_p \left[ 1 - \left( 1 + \frac{\chi_m}{\chi_p} \left( \frac{3(1-\nu_m)}{1+\nu_m} - 1 \right) \right)^{-1} \right] \quad (2.15)$$

$\delta_{mp}$ ,  $\chi_m$ ,  $\chi_p$ ,  $\mu_m$  et  $\mu_p$  sont déterminés comme suit :

$$\delta_{mp} = \frac{a_p - a_m}{a_m}; \quad \chi_m = \mu_m \left( \frac{1 + \nu_m}{1 - 2\nu_m} \right); \quad \chi_p = \frac{\mu_p(1 + \nu_p)}{1 - 2\nu_p}$$

$$\mu_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}; \quad \mu_p = \frac{E_p}{2(1 + \nu_p)}$$

avec  $\mu_m$  (resp.  $\mu_p$ ) le module de cisaillement de la matrice (resp. du précipité);  
 $\nu_m$  (resp.  $\nu_p$ ) le coefficient de poisson de la matrice (resp. du précipité);  
 $E_m$  (resp.  $E_p$ ) le module de Young de la matrice (resp. du précipité);  
 $a_m$  (resp.  $a_p$ ) le paramètre de maille du réseau de la matrice (resp. du précipité).

Dans le cas où l'élasticité est supposée homogène et isotrope ( $E_m = E_p$  et  $\nu_m = \nu_p = 0.33$ ), l'expression 2.15 devient :

$$\Delta G_{el} \simeq \frac{E_m}{1 - \nu_m} \delta_{mp}^2 \quad (2.16)$$

- Pour un précipité incohérent, le désaccord des paramètres de maille et l'inadéquation entre les orientations cristallographiques entraînent une faible cohésion à l'interface entre la matrice et le précipité. En conséquence, l'interface ne transmet au précipité que des contraintes hydrostatiques, car toute contrainte de cisaillement appliquée à l'interface est relaxée par un glissement interfacial. Dans le cas de précipités indéformables, de forme ellipsoïdale et de demi-axes  $a$ ,  $b=a$ , et  $c$ , Nabarro (1940) [118] exprime l'énergie de distorsion élastique par unité de volume par la relation suivante :

$$\Delta G_{el} = \frac{E_m}{3(1 + \nu_m)} \left( \frac{\Delta V}{V} \right)^2 f \left( \frac{c}{a} \right) \quad (2.17)$$



avec  $\frac{\Delta V}{V}$  l'écart de volume molaire entre la matrice et le précipité (donné par la relation 2.18);  
 $f$  une fonction de forme dépendant du rapport  $\frac{c}{a}$ .

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\text{Volume molaire de la matrice} - \text{Volume molaire du précipité (J/mole d'atomes)}}{\text{Volume molaire de la matrice}} \quad (2.18)$$

- Pour les précipités semi-cohérents, il est très difficile d'exprimer l'énergie de distorsion élastique. Il n'existe pas de modèles dans la littérature.

### Énergie libre totale de germination

Pour décrire la germination, l'effet de toutes les composantes de l'énergie libre de formation d'un germe doit être pris en compte. Toutes ces composantes constituent autant de barrières thermodynamiques à la germination. Il n'y a germination que si la formation d'un germe s'accompagne d'une baisse de l'enthalpie libre  $\Delta G$  du système. En faisant l'hypothèse que la déformation élastique est concentrée dans le germe (et pas dans la solution solide), la variation d'énergie libre  $\Delta G$  globalement nécessaire à la formation d'un germe de volume  $V_g$  et de surface  $S_g$  est la somme algébrique des trois termes :

$$\Delta G = (\Delta G_V + \Delta G_{el})V_g + \Delta G_S.S_g \quad (2.19)$$

avec  $\Delta G_V < 0$  dans le cas d'une solution solide sursaturée;  $\Delta G_S \geq 0$ ;  $\Delta G_{el} \geq 0$ .

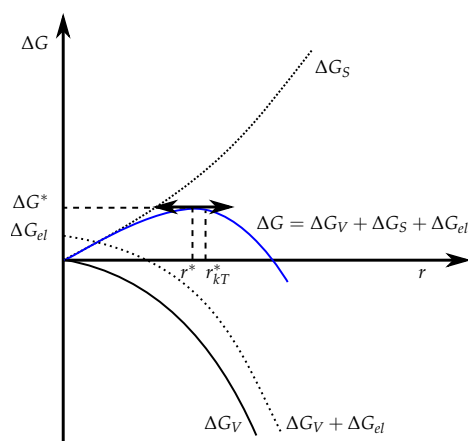


Figure 2.6: Énergie totale de germination

Deux mécanismes de germination sont généralement distingués:

- la germination homogène qui fait référence à l'apparition de germes au sein de la solution solide sursaturée;

- la gemination hétérogène qui se réfère à la formation des germes préférentiellement sur les défauts du réseau cristallins (dislocations par exemple) ou sur les interfaces préexistantes entre les différents grains ou les précipités déjà présents.

Par ailleurs, l'expression de l'enthalpie libre dépend de la forme des précipités et du type de germination.

**Morphologie des précipités** La forme préférentielle des précipités est celle qui minimise la somme de l'énergie interfaciale et l'énergie de distorsion élastique. Du fait de la proportionnalité entre l'énergie de distorsion élastique et le volume des précipités et celle entre l'énergie d'interface et la surface, on admet que le système tendra à minimiser la composante dominante en fonction du ratio entre la surface et le volume caractéristique des précipités. Ainsi, pour les plus petits précipités, le système tendra d'abord à minimiser l'énergie d'interface, car elle est dominante. Cela aura pour conséquence l'apparition de précipité cohérents (faible énergie d'interface). Les alliages d'aluminium Al-Cu-Mg tel que le 2024 renferment selon les cas un ou deux types de précipités :

- Précipité S'/S

Les précipités S' sont généralement confondus avec les précipités S. En effet, ils sont suffisamment proches en composition et en structure cristalline [119]. Selon plusieurs auteurs [120], ils ont pour composition  $Al_2CuMg$  et cristallisent selon une maille orthorhombique (la structure des précipités S' est un peu distordue par rapport à la structure des précipité S) composée de seize atomes par maille avec comme paramètres  $a=0.40$  nm,  $b=0.923$  nm, et  $c=0.714$  nm. Selon Starink et al. (1999) [121], la phase S' a une forme en bâtonnet, et présente un ratio entre la longueur et le rayon supérieur à 10. Dans notre cas, ce ratio est choisi égal à 10.

- Précipités GP

La stœchiométrie et la structure des précipités GP est très incertaine et fait l'objet de beaucoup de controverse. L'analyse à la sonde tomographique 3D suggère que le ratio atomique Cu|Mg dans les co-clusters (ou zones GP) est approximativement de 1|1 et que la concentration atomique en cuivre est de 10 % [122, 123]. Des formules chimiques suggérées sont  $Al_3CuMg$  selon Starink et al. [122, 124] et  $Al_2CuMg$  selon Wolverton [22]. Nous supposons dans le cadre de notre étude une stœchiométrie 8/1/1

**Germination homogène** Dans le cas d'un précipité sphérique de rayon  $r$ , la variation d'enthalpie libre de germination s'écrit :

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 [\Delta G_V + \Delta G_{el}] + 4\pi r^2 \gamma_{p/ss} \quad (2.20)$$

Avec  $\Delta G_V$  et  $\Delta G_{el}$ , les variations d'enthalpie libre par unité de volume, et,  $\gamma_{p/ss}$ , l'énergie d'interface entre le précipité et la solution solide. L'expression de  $\Delta G$  met en évidence que pour les petites valeurs de  $r$ , le terme d'énergie libre de surface est dominant. Par contre, lorsque  $r$  est augmenté, le terme d'enthalpie libre volumique finit par être prépondérant. Pour que le germe puisse être en régime de croissance, il

doit atteindre un rayon critique  $r^*$ , et, donc franchir une barrière de potentiel  $\Delta G^*$ .  
Le rayon critique est obtenu pour :

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial r} = 0$$

Le rayon critique et l'énergie critique ont alors pour expression :

$$r^* = \frac{-2\gamma_{p/ss}}{\Delta G_V + \Delta G_{el}} \quad (2.21)$$

$$\Delta G^* = \frac{16\pi\gamma_{p/ss}^3}{3(\Delta G_V + \Delta G_{el})^2} \quad (2.22)$$

Les nouveaux germes formés ne seront stables et pourront croître que si leur rayon est légèrement supérieur à  $r^*$  ( $\frac{d\Delta G}{dr} < 0$ ). Ainsi, on admet généralement que les germes qui apparaissent auront un rayon légèrement supérieur à  $r^*$ , appelé rayon de germination  $r_{kT}^*$  et donné par la relation [125] :

$$r_{kT}^* = r^* + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k_B T}{\pi \gamma_{p/ss}}} \quad (2.23)$$

avec  $k_B$  constante de Boltzmann  
T température

**Germination hétérogène** Dans le cas de la germination hétérogène, les expressions de l'énergie totale de germination ou du rayon critique sont plus complexes à déterminer. Dans le cas de la germination d'une particule sur un plan, l'énergie critique de germination dépend aussi de l'angle de contact  $\theta$ , et ne diffère de l'énergie critique du cas homogène que par la présence d'une fonction d'interface  $f(\theta)$ .

$$\Delta G_{\text{hétérogène}} = \Delta G_{\text{homogène}} \cdot f(\theta) \quad (2.24)$$

Dans le cas représenté sur la figure 2.7, la fonction  $f$  est défini par :

$$f(\theta) = \frac{(1 - \cos\theta)^2 (2 + \cos\theta)}{4} \quad (2.25)$$

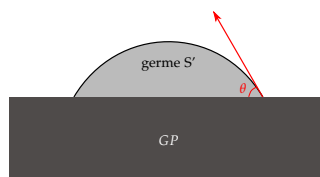


Figure 2.7: Germination hétérogène sur une surface plane

**Choix du type de germination** Pour notre modèle, la germination considérée sera :

- homogène pour les précipités GP;
- hétérogène pour les précipité S'. La germination hétérogène des précipités S' peut se faire sur les précipités GP existants, sur les joints de grains, et, sur les dislocations. Cependant, dans une première approche, ne sera considérée que la germination hétérogène sur les précipités GP existants.

### Flux de germination

Plusieurs auteurs [126, 127, 128] ont décrit le processus de germination en utilisant des grandeurs thermodynamiques pour modéliser la germination. Leurs travaux ont conduit à la théorie classique de la nucléation ou CNT (Classical Nucleation Theory). Volmer et Weber [126] ont donné les fondements de la théorie classique de la nucléation en reprenant les concepts de capillarité et d'équilibre thermodynamique de Gibbs [129]. Zeldovich [128] contribuera à la forme actuelle de la théorie. Finalement, l'expression du flux de germination (nombre de germes critiques de rayon  $r_{kT}^*$  formés par unité de temps et de volume) en régime stationnaire est exprimée comme suit :

$$J = N_s Z \beta \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{kT}\right) \quad (2.26)$$

avec	$N_s$ [nombre de sites/m <sup>3</sup> ]	nombre de sites de germination homogène ou hétérogène potentiellement disponibles par unité de volume;
	$Z$ [constante]	facteur de Zeldovich exprimant la probabilité qu'a un germe de rayon $r_{kT}^*$ de croître. Ce facteur est donc toujours inférieur à 1, autrement dit, seuls certains germes de rayon critique $r_{kT}^*$ seront finalement aptes à croître, les autres se dissolvant;
	$\beta$ [s <sup>-1</sup> ]	taux d'accrochage des atomes de soluté sur le précipité. Il représente la fréquence à laquelle un atome de soluté se condense sur un précipité (pour assurer sa croissance) lors de son déplacement au hasard dans la solution solide;
	$\Delta G^*$	barrière de potentiel ou énergie critique de germination.

Dans le cas d'un précipité sphérique,  $Z$  et  $\beta$  sont exprimés comme suit [128, 63] :

$$\begin{cases} \beta = \frac{4\pi(r_{kT}^*)^2}{a_{mAl}^4} \left( \sum_i \frac{1}{X_{a_i-ss} D_i} \right)^{-1} \\ Z = \frac{V_{m-p}}{2\pi(r_{kT}^*)^2} \sqrt{\frac{\gamma_{p/ss}}{N_A RT}} \end{cases} \quad (2.27)$$

où  $X_{a_i-ss}$  représente la concentration atomique des solutés  $i$  dans la solution solide,  $D_i$ , le coefficient de diffusion des solutés  $i$  dans la solution solide,  $V_{m-p}$ , le volume molaire du précipité, et  $N_A$ , le nombre d'Avogadro,  $a_{mAl}$ , le paramètre de maille de l'aluminium.

L'expression du flux de germination exposée ci-dessus (2.26) suppose que le régime stationnaire est atteint, ce que nous avons considéré dans notre modèle.

Notons, tout de même, que le régime stationnaire est atteint après un temps d'incubation  $\tau$ . Pour tenir compte du régime transitoire, le flux de germination en régime stationnaire (2.26) doit être multiplié par une fonction d'incubation  $f(\tau, t)$  indépendante de la forme des précipités, et, exprimée classiquement comme suit :

$$f(\tau, t) = \exp(-\tau/t), \text{ avec } \tau = \frac{2}{\pi\beta Z^2} \quad [125] \quad (2.28)$$

Perez et al. [130] proposent une autre expression de la fonction d'incubation plus en accord avec les modélisations atomistiques de type Monte-Carlo :

$$f(\tau, t) = 1 - \exp(-\tau/t) \quad (2.29)$$

## 2.2.2 CINÉTIQUE DE PRÉCIPITATION

### 2.2.2.1 Croissance/Dissolution d'un précipité dans une solution solide sursaturée

La croissance d'un précipité implique qu'un dépôt d'atomes s'effectue à sa surface. Cela nécessite un transport d'atomes de la solution solide vers l'interface solution solide/ précipité puis une organisation de ces atomes selon une certaine structure cristallographique (celle du précipité). Le phénomène limitant la croissance d'un précipité sera donc :

1. la diffusion (à plus ou moins longue portée) des atomes ou solutés dans la solution solide; La croissance nécessite surtout le transport des atomes (solutés) de la solution solide vers l'interface. Dans ce cas, la croissance est dite "contrôlée par la cinétique de diffusion"
2. le transport (localisée) des atomes ou solutés à l'interface entre le précipité et la solution solide; La croissance nécessite surtout un accrochage des solutés à l'interface et un réarrangement atomique locale. Dans ce cas, la croissance est dite "contrôlée par la cinétique d'interface"
3. un mode mixte où la croissance est limitée par les deux phénomènes mentionnées ci-dessus.

Dans notre cas, nous ferons l'hypothèse d'une croissance limitée par la cinétique de diffusion.

À l'amorce de la germination, le profil de concentration dans la solution solide est initialement horizontal (figure 2.8a). Comme illustré sur la figure 2.8b, un gradient chimique apparaîtra dans la solution solide pendant une période transitoire suite à la croissance des précipités (ceci est surtout avéré dans l'hypothèse d'une croissance limitée par la cinétique de diffusion). Il est généralement admis que ce gradient résultant s'établit de façon à obtenir un équilibre local au niveau de l'interface précipité/solution solide. Cet équilibre est obtenu dès lors que la concentration interfaciale de la solution solide atteint  $X_i$ . La croissance s'effectue ensuite en régime permanent ou stationnaire (figure 2.8c), ce qui signifie que :

- la concentration de la solution solide à l'interface sera  $X_i$  pour toute particule de rayon  $R$ , indépendamment du temps;
- la concentration de la solution solide loin de l'interface restera  $X_{SS}$ .

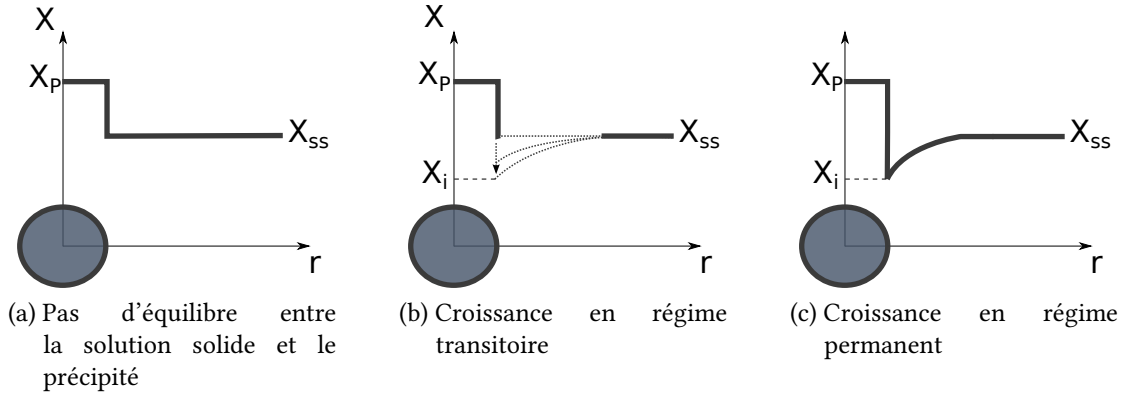


Figure 2.8: Évolution du profil de concentration lors de la croissance

Si le phénomène limitant est la diffusion du soluté B en volume, et,  $r$ , le rayon du précipité supposé sphérique, sa vitesse de croissance  $dr/dt$  est alors donnée par :

$$V_p = \frac{dr}{dt} = \frac{D_B}{r} \left( \frac{X_{V_{ss-B}} - X_{V_{i-B}}}{X_{V_{p-B}} - X_{V_{i-B}}} \right) \quad (2.30)$$

avec:

$D_B$ , coefficient de diffusion du soluté B dans la solution solide

$X_{V_{ss-B}}$ , concentration volumique de la solution solide en soluté B

$X_{V_{i-B}}$ , concentration volumique de la solution solide en soluté B à l'interface solution solide/précipité

$X_{V_{p-B}}$ : concentration volumique du précipité en soluté B.

La stœchiométrie des précipités GP (8/1/1) et S' (2/1/1) permet de faire l'hypothèse de l'égalité des vitesses de croissance quelque soit le soluté ( $sol_i$ ) considéré, et, la relation suivante peut ainsi être déduite :

$$V_p = V_{p_{sol_1}} = \dots = V_{p_{sol_n}}$$

$$\Rightarrow \frac{D_{sol_1}}{r} \left( \frac{X_{V_{ss-sol_1}} - X_{V_{i-sol_1}}}{X_{V_{p-sol_1}} - X_{V_{i-sol_1}}} \right) = \dots = \frac{D_{sol_n}}{r} \left( \frac{X_{V_{ss-sol_n}} - X_{V_{i-sol_n}}}{X_{V_{p-sol_n}} - X_{V_{i-sol_n}}} \right) \quad (2.31)$$

#### Relations permettant de calculer les concentrations interfaciales

Les concentrations d'équilibre à l'interface entre la solution solide et un précipité de rayon  $r$  à une température donnée sont définies de façon analogue aux concentrations d'équilibre entre la solution solide et un précipité de rayon infini (interface plane entre le précipité et la solution solide). Nous avons vu que la connaissance de ces concentrations interfaciales est nécessaire pour modéliser la cinétique de précipitation.

Pour un précipité donnant lieu à une interface d'une certaine courbure avec la matrice, l'énergie d'interface augmente l'enthalpie libre du précipité et modifie le produit de solubilité à l'interface matrice/précipité. Ceci est connu sous le nom d'effet Gibbs-Thomson.

Le produit de solubilité qui représente les concentrations de la solution solide en équilibre avec un précipité est affecté par l'énergie de surface précipité/solution solide, puisque celle-ci entraîne une augmentation de l'enthalpie libre du précipité. Dans le cas d'un précipité ayant une interface plane avec la matrice ou d'un précipité de rayon infini, la surface enveloppe est négligeable devant le volume si bien que l'enthalpie libre du précipité n'est pas affectée par l'énergie de surface. Par contre, lorsque le rayon décroît, la surface enveloppe ne peut plus être considérée comme négligeable devant le volume si bien que l'enthalpie libre du précipité est affectée par l'énergie de surface. L'augmentation du produit de solubilité à cause de l'énergie d'interface est l'effet Gibbs-Thompson. Pour un précipité sphérique de rayon  $r$ , le produit de solubilité  $K_r$  est exprimé comme suit :

$$K_r = K_\infty \exp\left(\frac{2\gamma_{p/ss} V_{m-p}}{rRT}\right) \quad (2.32)$$

avec	$V_{m-p}$	le volume molaire du précipité ( $m^3$ /mole précipité);
	$\gamma_{p/ss}$	l'énergie d'interface entre le précipité et la solution solide;
	$K_\infty$	le produit de solubilité à l'équilibre entre la solution solide et un précipité de rayon infini (donné par la relation 2.13).

Ainsi les concentration interfaciales peuvent être déterminées en résolvant le système d'équations formé par les relations 2.13 et 2.32.

### 2.2.2.2 Rôle des lacunes

Un aspect essentiel des premiers stades de décomposition de la solution solide est l'effet des lacunes. En effet, la cinétique de précipitation est régie non seulement par la sursaturation en solutés et la diffusion des atomes de soluté dans la matrice, mais aussi par la sursaturation en lacunes créée dans la matrice à température ambiante après mise en solution à haute température et trempe rapide. Cette sursaturation en lacunes va donc conduire à une augmentation du coefficient de diffusion des solutés d'un facteur  $\lambda$  en début de maturation. Dans le cas des alliages Al-Cu, ce facteur est de l'ordre de  $10^7$  à  $10^8$ . Le coefficient de diffusion d'un soluté dans une matrice présentant une concentration d'équilibre en lacunes à une température  $T$  est classiquement exprimé par la loi d'Arrhenius :

$$D_{\text{soluté}}^{\text{équilibre}} = D_{0,\text{soluté}} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2.33)$$

Le coefficient de diffusion d'un soluté dans une matrice présentant une concentration en lacunes hors équilibre à une température donnée  $T$  est :

$$D_{\text{soluté}}^{\text{hors-équilibre}} = \lambda D_{0,\text{soluté}} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad \text{où } \lambda = \frac{X_{\text{lac}}^{\text{Tmaturation}}}{X_{\text{lac}}^{\text{eq-Tmaturation}}} \quad (2.34)$$

avec	$Q$	énergie d'activation de la diffusion des solutés
	$D_{0\text{soluté}}$	terme pré-exponentiel du coefficient de diffusion des solutés
	$X_{\text{lac}}^{\text{T}_{\text{maturation}}}$	concentration en lacunes à la température de maturation (température de mise en solution)
	$X_{\text{lac}}^{\text{eq-T}_{\text{maturation}}}$	concentration d'équilibre en lacunes (température de maturation)

Au cours de la maturation, les lacunes vont progressivement s'annihiler en migrant vers des défauts de type joints de grains, sous joints de grains, ou dislocations. En conséquence, le coefficient de diffusion des solutés sera réduit progressivement jusqu'à sa valeur d'équilibre.

L'évolution de la concentration en lacunes peut être déterminée en résolvant l'équation qui régit la cinétique d'annihilation [131] :

$$\frac{\partial X_{\text{lac}}^{\text{T}_{\text{maturation}}}}{\partial t} = -\frac{X_{\text{lac}}^{\text{T}_{\text{maturation}}} - X_{\text{lac}}^{\text{eq-T}_{\text{maturation}}}}{\tau_l} \quad (2.35)$$

avec  $\tau_l$ , une constante de temps.

Les expressions de  $\tau_l$  et de la concentration d'équilibre en lacunes  $X_{\text{lac}}^{\text{eq-T}_{\text{maturation}}}$  sont données ci dessous :

$$\tau_l = \frac{l^2}{4\pi^2 D_{\text{lac}}} = \frac{l^2}{4\pi^2 \nu a_m^2 \exp\left(-\frac{\Delta H_m}{RT}\right)} \quad [131] \quad (2.36)$$

$$X_{\text{lac}}^{\text{eq-T}_{\text{maturation}}} = A \exp\left(-\frac{\Delta H_f}{RT}\right) \alpha(T) \quad [132] \quad (2.37)$$

avec	$D_{\text{lac}}$	coefficient de diffusion des lacunes
	$l$	demi-distance entre puits de lacunes
	$\Delta H_m$	enthalpie de migration des lacunes (correspondant au saut d'une lacune vers un site ou inversement)
	$\nu$	fréquence de saut de lacunes
	$A$	constante liée à l'entropie de formation des lacunes
	$\Delta H_f$	enthalpie de formation des lacunes
	$\alpha$	coefficient d'interaction solutés/lacunes.

Pour prendre en compte les interactions solutés/ lacunes, certains auteurs [133] ont proposé, pour des alliages ternaires, et, pour une structure cristallographique cubique à faces centrées (CFC), l'expression 2.38. Notons tout de même que dans notre modèle, l'interaction solutés/lacunes est négligée ( $\alpha = 1$ ) dans une première approche.



$$\alpha(T) = 1 - 12(X_{\text{soluté1}} + X_{\text{soluté2}}) + 12 \left[ X_{\text{soluté1}} \exp\left(\frac{E_{\text{lacune/soluté1}}}{RT}\right) + X_{\text{soluté2}} \exp\left(\frac{E_{\text{lacune/soluté2}}}{RT}\right) \right] \quad (2.38)$$

### 2.2.3 ÉTAT DE L'ART SUR LES MODÈLES DE PRÉCIPITATIONS EXISTANTS

De nombreuses études ont porté sur la modélisation de la précipitation. La description de l'évolution de la précipitation passe par la connaissance de plusieurs paramètres physiques des précipités comme leur structure cristallographique, leur morphologie, leur composition chimique, leur distribution, etc. La connaissance de ces paramètres couplée à l'utilisation de modèles thermodynamiques et cinétiques permet de décrire l'évolution de la précipitation. Cependant, les modèles thermodynamiques et cinétiques peuvent être implémentés de différentes façons. Deux types d'approches sont généralement rencontrées :

- les modèles à rayon moyen où la distribution de taille des précipités est représentée uniquement par son rayon moyen et par la densité volumique de précipités;
- les modèles multi-classes où la distribution des précipités est discrétisée en plusieurs classes selon leur taille. Dans ce cas, l'évolution de la distribution peut être évaluée par une approche lagrangienne ou eulerienne [perez2008a]. En effet, d'une part, les modèles multi-classes peuvent être "eulerien", où l'évolution de la distribution discrétisée est déterminée en fonction des échanges de flux entre classes voisines. D'autre part, les modèles multi-classes peuvent être "lagrangien", où l'évolution de chaque classe de la distribution est déterminée individuellement au cours du temps.

Les modèles à rayon moyen bien que performants dans certains cas, restent limités pour des traitements thermiques complexes comme dans le cas du FSW. Par exemple, deux distributions distinctes seront considérées identiques dès lors qu'elles ont le même rayon moyen, Par conséquent, les changements à rayon moyen constant (notamment la dissolution à rayon moyen constant) ne peuvent être reproduits. Dans notre étude, une approche multi-classe sera ainsi préférée.

### 2.2.4 DESCRIPTION DU MODÈLE CHOISI

Le modèle utilisé dans notre étude est un modèle multi-classe "eulerien" basé sur le modèle de Myhr et Grong[60], lui même, inspiré, par ailleurs, du modèle Kampman Wagner Numerical Model (KWN) [57], et où l'évolution de la distribution est déterminée en évaluant les flux entre classes voisines.

#### 2.2.4.1 Détermination de la loi de croissance/dissolution

L'étude de l'évolution de la population de précipités nécessite de discrétiser le rayon des précipités de façon à les ranger dans des classes de rayon donné. La loi de croissance/dissolution revient alors à écrire, pour chaque classe, un bilan de l'évolution du nombre de précipités tenant compte :

- du flux de précipités entrant ou sortant;

- d'une éventuelle apparition de précipités résultant d'un processus de germination.

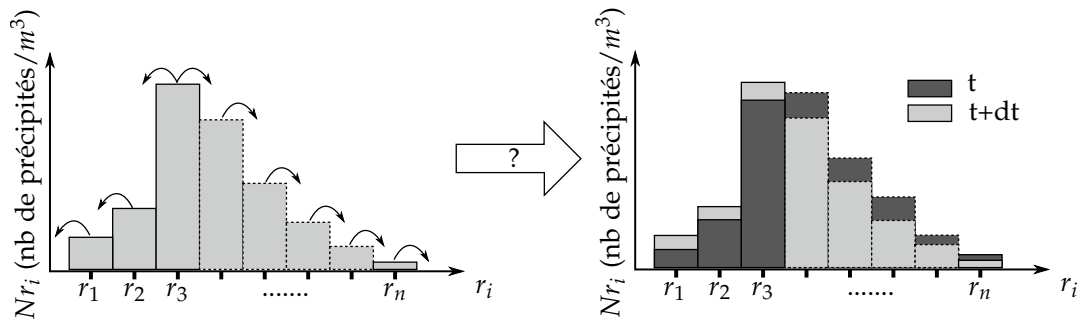


Figure 2.9: Évolution d'une population de précipité

Considérons à un instant  $t$  donné, une distribution de précipités rangés par classe en fonction de leur taille (rayon) et de leur densité (nombre de précipités par unité de volume). Au bout d'une durée  $dt$  (ou à un instant  $t+dt$ ), la densité de chacune des classes composant cette distribution évoluera (figure 2.9). En effet, selon leur taille par rapport à la taille critique de germination, les classes (ou précipités rangés par classe) seront en régime de croissance ou de dissolution. La loi d'évolution du nombre de précipités dans une classe de rayon donnée peut s'exprimer par une loi de conservation sur la densité volumique de précipités dans cette classe :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial r} + S_r \quad (2.39)$$

avec	$\frac{\partial N}{\partial t}$	variation temporelle du nombre de précipités par unité de volume dans une classe de rayon $r$ donné
	$\frac{\partial J}{\partial r}$	variation spatiale de la densité de flux de précipités aux interfaces d'une classe de rayon donnée
	$S_r$	flux de germination (terme source) représentant le nombre de germes par unité de volume et de temps apparus lors de l'étape de germination

Considérons une classe  $i$ , qui échange des flux  $J_i$  et  $J_{i-1}$  respectivement avec les classes adjacentes  $i+1$ , et  $i-1$  (figure 2.10). Si la classe  $i$  est en croissance, les précipités qui s'y trouvent vont grossir de  $dr$  pendant  $dt$ , si bien qu'un certain nombre d'entre eux va être amené à quitter la classe  $i$  pour être comptabilisé dans la classe  $i+1$  de rayon supérieur, d'où, pour la classe  $i$ , un flux sortant  $J_i$ . Parallèlement, si la classe  $i-1$  est en croissance, les précipités qui s'y trouvent vont également grossir, si bien qu'un certain nombre d'entre eux va être amené à quitter la classe  $i-1$  pour être comptabilisé dans la classe  $i$  de rayon supérieur, d'où, pour la classe  $i$ , un flux entrant  $J_{i-1}$ .

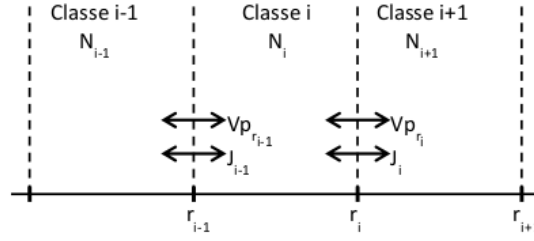


Figure 2.10: Distribution de classes de précipités

La densité de flux de précipités  $J$  (nombre de précipités par unité de surface et de temps) peut être reliée à  $N$  (nombre de particules par unité de volume) et à  $V_p$  (vitesse de croissance ou dissolution des particules) par la relation suivante :

$$J = N * V_p \quad (2.40)$$

La loi 2.39 donnant l'évolution du nombre de précipités peut alors se réécrire sous la forme suivante :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial N V_p}{\partial r} + S_r \quad (2.41)$$

En intégrant la relation 2.41 sur l'espace et le temps sans le terme source (car la germination et la croissance/dissolution sont traitées de façon découplée) :

$$\int_{r_{i-1}}^{r_i} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial N}{\partial t} dt dr = - \int_t^{t+\Delta t} \int_{r_{i-1}}^{r_i} \frac{\partial N V_p}{\partial r} dr dt \quad (2.42)$$

De la loi précédente (2.42), se déduit le schéma implicite suivant :

$$\left( N_i^{t+\Delta t} - N_i^t \right) \Delta r = \left[ \left( N^{t+\Delta t} V_p \right)_{r_{i-1}} - \left( N^{t+\Delta t} V_p \right)_{r_i} \right] \Delta t \quad (2.43)$$

Avec:

$$\left( N^{t+\Delta t} V_p \right)_{r_{i-1}} = \begin{cases} N_{i-1}^{t+\Delta t} V_{p_{r_{i-1}}} & \text{si } V_{p_{r_{i-1}}} > 0 \\ N_i^{t+\Delta t} V_{p_{r_{i-1}}} & \text{si } V_{p_{r_{i-1}}} < 0 \end{cases} \quad (2.44)$$

et

$$\left( N^{t+\Delta t} V_p \right)_{r_i} = \begin{cases} N_i^{t+\Delta t} V_{p_{r_i}} & \text{si } V_{p_{r_i}} > 0 \\ N_{i+1}^{t+\Delta t} V_{p_{r_i}} & \text{si } V_{p_{r_i}} < 0 \end{cases} \quad (2.45)$$

Quatre situations peuvent se présenter selon le signe des vitesses aux interfaces de la classe centrale, et selon la position du rayon critique  $r^*$  par rapport aux classes de la distribution. Cependant, une des quatre situations est impossible. Les cas possibles et les expressions des lois qui en découlent sont résumés sur la figure 2.11.

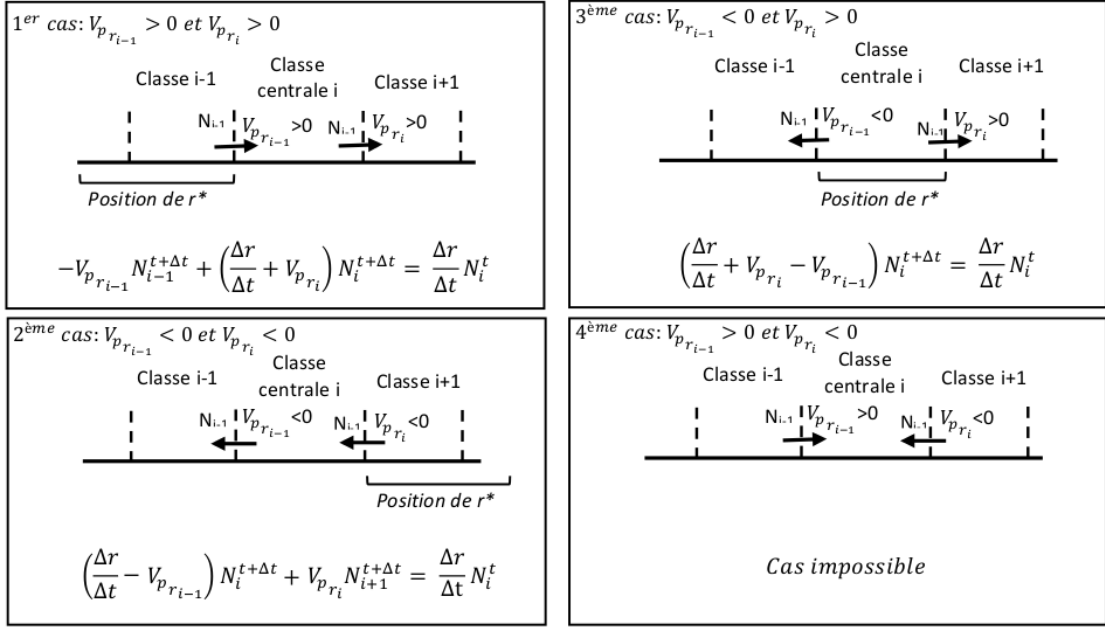


Figure 2.11: Différents cas possibles selon le signe des vitesses aux interfaces

Chaque classe centrale  $i$  donne lieu à une équation d'évolution du type :

$$a_{i,i-1} N_{i-1}^{t+\Delta t} + a_{i,i} N_i^{t+\Delta t} + a_{i,i+1} N_{i+1}^{t+\Delta t} = \frac{\Delta r}{\Delta t} N_i^t \quad (2.46)$$

Pour  $n$  classes,  $n$  équations où les termes représentant les termes de la matrice des vitesses de croissance/dissolution, seront ainsi obtenues. Si  $i$  est la classe centrale, et  $j$  une classe adjacente gagnant ou perdant des particules, alors le terme de vitesse correspondant est noté  $a_{i,j}$  où  $a_{ij}$ . Précisons que pour la première classe de la distribution, comme la germination et la croissance/dissolution sont découplées, le terme  $a_{i,i-1}$  représentant la classe adjacente inférieure est nul (pas de classe inférieure, donc pas de flux pouvant y provenir). De manière analogue, le terme  $a_{i,i+1}$  représentant la classe adjacente supérieure est aussi nul pour la dernière classe de la distribution (pas de flux provenant d'une classe supérieure).

Un système linéaire à résoudre (2.47) est donc obtenu.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1^{t+\Delta t} \\ N_2^{t+\Delta t} \\ N_3^{t+\Delta t} \\ N_4^{t+\Delta t} \\ \vdots \\ N_n^{t+\Delta t} \end{pmatrix} = \frac{\Delta r}{\Delta t} \begin{pmatrix} N_1^t \\ N_2^t \\ N_3^t \\ N_4^t \\ \vdots \\ N_n^t \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

Par ailleurs, la fraction volumique  $f_{vp}$  d'un précipité P compte tenu de sa distribution à un instant t donné s'exprime comme suit :

$$f_{vp} = \sum_i \left( \frac{4}{3} + \alpha_P \right) \pi N_i r_i^3 \quad (2.48)$$

avec  $\alpha_P$  le facteur de forme du précipité P. Dans le cas d'un précipité sphérique,  $\alpha_P = 0$ .

Le modèle métallurgique est utilisé pour la mise en place d'un code de calcul dédié à la précipitation. Afin de permettre une intégration aisée dans la plateforme de calcul DEM qui sera utilisée pour le reste de l'étude, le développement du programme de calcul a nécessité tout d'abord la mise en place d'un modèle Orienté Objet rigoureux et pertinent. Cette étape est très importante, car les performances du programme dépendront directement de la qualité du modèle orienté objet. Le programme, développé en langages C++ et Python, bénéficie donc non seulement de la performance, de la robustesse et de la rapidité des bibliothèques C++, mais aussi de la souplesse du langage Python.

#### 2.2.4.2 Choix du pas de temps

Le pas de temps  $\Delta t$  est calculé automatiquement à chaque incrément de façon à s'assurer que les précipités présents dans une classe passent obligatoirement par les classes adjacentes. Cela implique donc que la classe ayant la vitesse de croissance ou d'interface la plus élevée ( $V_{int}^{max}$ ) croisse au maximum de  $\frac{\Delta r}{2}$ . Le pas de temps s'exprime donc comme suit :

$$\Delta t = \frac{\Delta r}{2 |V_{int}^{max}|} \quad (2.49)$$

avec  $V_{int}^{max} = \max_i (V_{int_i})$   $V_{int_i}$  représentant la vitesse d'interface ou de croissance/dissolution d'un précipité de rayon  $r_{int_i}$  dans une distribution donnée.

Notons tout de même que la vitesse de croissance la plus élevée est généralement atteinte par la plus petite classe de la distribution. En conséquence, le pas de temps devient très limité et le temps de calcul s'avère très long.

Une piste pour pallier ce problème serait le choix d'une valeur critique de la distribution. La valeur du pas de temps choisi serait celle qui correspond à des précipités de rayon inférieur à  $\frac{r^*}{\alpha}$ , où  $\alpha$  est un paramètre réel positif. Selon Hersent [134] et Gendt [135], une valeur  $\alpha = 10$  pourrait ne pas dégrader la précision du calcul sur les parties intéressantes de la distribution et accélérer le calcul.

Toutefois, dans le cas de notre modèle, le paramètre  $\alpha$  aura pour valeur 1. Des études approfondies sont nécessaires pour améliorer ce point et éventuellement modifier ce paramètre par la suite.

### 2.2.4.3 Rayon minimum des précipités et conditions initiales

Au début du calcul, une distribution initiale caractérisée par un nombre de classes  $n_0$ , de taille  $\Delta r$  doit être défini. Cette distribution initiale peut être composée de classes vides ( $N_i = 0$ ) ou égale à une distribution provenant d'un calcul ou d'une expérience préalable. Un précipité qui germera aura une certaine structure et un certain volume. Le volume minimum que doit occuper une molécule de précipité peut être déduit à partir des connaissances ou hypothèses sur leur structure et morphologie. Un rayon minimum correspondant peut ainsi être déterminé. Cela permet d'éviter de prendre en compte des précipités de taille irréaliste (voir en annexe A.2 le calcul de ce rayon).

## 2.2.5 BILAN DES HYPOTHÈSES ET DES PARAMÈTRES DU MODÈLE

Dans cette section, nous résumons toutes les hypothèses effectuées et tous les paramètres utilisés pour le modèle.

### 2.2.5.1 Hypothèses

Dans les travaux présentés ici, la recherche de compromis entre pertinence et simplicité de la modélisation nous amène à effectuer plusieurs hypothèses :

- 2 types de précipités seront considérés : les précipités GP et les précipités S' ;
- les précipités GP seront considérés comme sphériques ;
- les précipités S' seront considérés comme ayant une forme de bâtonnet, avec une forme cylindrique, des bouts hémisphériques, et un facteur de forme constant égale à 20 ;
- seule la germination des précipités S' sur les précipités GP existants sera dans un premier temps considérée. La germination sur les dislocations et sur les joints de grains n'est pas considérée en première approche ;
- les concentrations d'équilibres seront déterminées avec l'hypothèse de la solution régulière suffisamment diluée ;
- quelque soit le type de précipités, l'énergie de distorsion élastique est calculée à partir de la relation 2.16 ;
- la relation permettant de déterminer les concentrations interfaciales sera l'équation de Gibbs-Thomson pour des précipités sphériques.
- la vitesse de croissance sera déterminée en supposant des précipités sphériques ;
- la concentration en lacunes au début de la maturation est présumée égale à la concentration obtenue en fin de mise en solution. En effet, la trempe est supposée suffisamment rapide pour figer la concentration en lacunes.

### 2.2.5.2 Paramètres d'entrée du modèle

À l'initialisation du calcul, un nombre important de paramètres, listés ci-dessous, doit être défini.

#### Paramètres de température et de temps

Les conditions initiales de temps, de température de même que les conditions de chargement thermiques sont nécessaires :

- la température initiale ;
- le chargement thermique ;
- le pas de temps par défaut, lorsqu'il n'y a pas de précipités formés.

#### Paramètres de maillage

Les données liées à la distribution initiale sont :

- le paramètre de maillage (taille de chaque classe présente dans la distribution);
- le rayon initial de la distribution;
- le nombre initial de classes;
- la distribution initiale pour chaque type de précipité résultant d'un calcul précédant, dans le cas où la distribution initiale est connue préalablement. En effet, dans ce cas, le fichier de la distribution peut être donné directement par l'utilisateur.

### Données initiales globales

Concernant les solutés (le cuivre et le magnésium, pour l'alliage 2024) :

- les concentrations volumiques initiales en solutés;
- les termes pré-exponentiels du coefficient de diffusion de chaque soluté;
- l'énergie d'activation de la diffusion de chaque soluté;
- la masse volumique des solutés;
- la masse molaire des solutés.

Concernant la solution solide d'aluminium :

- le paramètre de maille de la solution solide  $a_{ss}$  considéré égale à celui de l'aluminium  $a_{m_{Al}}$  ( $a_{ss} = a_{m_{Al}}$ );
- la masse volumique de l'aluminium;
- la masse molaire de l'aluminium;
- le module d'Young de la solution solide (supposée identique à celui de l'aluminium);
- le coefficient de poisson de la solution solide (considéré comme étant celui de l'aluminium).

### Paramètres de diffusion lacunaires

Les propriétés liées aux lacunes :

- l'enthalpie de formation des lacunes ( $\Delta H_f$ );
- l'enthalpie de migration des lacunes ( $\Delta H_m$ );
- l'entropie de formation des lacunes ( $\Delta S_f$ );
- les énergies d'interaction entre chaque soluté et les lacunes  $E_{lacune/soluté_i}$ ;
- la fréquence de saut des lacunes ( $f_E$ ), nécessaire pour calculer le terme pré-exponentiel de la vitesse de diffusion lacunaire;
- le terme pré-exponentiel du coefficient de diffusion lacunaire ( $D_{lac_0}$ ), calculé comme suit :  $D_{lac_0} = a_{m_{Al}}^2 * f_E$ ;
- la demi-distance  $l$  entre puits de lacunes;
- la température de mise en solution  $T_{sol}$ ;
- la concentration initiale en lacunes (après trempe ou maturation selon la situation considérée).

### Paramètres concernant les précipités

Pour chaque précipité P :

- sa composition chimique;
- la concentration volumique de chaque soluté (donnée par l'utilisateur, ou calculée automatiquement à partir de la composition chimique et des données concernant chaque élément chimique);

- le nombre initial de sites de germination. Selon le type de précipité et les hypothèses concernant les sites de germination, ce paramètre peut être nécessaire à l'initialisation ou déduit automatiquement par calculs;
- le terme pré-exponentiel et l'énergie d'activation pour le solvus d'équilibre;
- le volume molaire;
- la variation relative  $\delta_{mp}$  des paramètres de maille entre la matrice (ss) et le précipité (P) :  $\delta_{mp} = \frac{|a_{ss} - a_p|}{a_p}$ ;
- l'énergie d'interface par unité de surface  $\gamma_p$ ;
- le facteur de forme  $\alpha_p$ , représentant le ratio entre la longueur et le rayon du précipité.

Concernant les précipité de type  $S'$  :

- l'angle de mouillage  $\theta$  utilisé dans le calcul de la fonction d'interface  $f_\theta$ , habituellement nommée fonction de mouillage.

### 2.2.6 ALGORITHME DE CALCUL

L'objectif du modèle de précipitation est, comme nous l'avons expliqué en introduction, de pouvoir prédire l'évolution d'une population de précipités au cours du temps et ce, en fonction d'un cycle thermique imposé. Pour pouvoir obtenir une distribution de taille de précipités après une durée donnée, une série de calculs est effectuée pour chaque incrément de temps. Tout d'abord, les concentrations (volumiques) des éléments chimiques présents dans l'alliage sont actualisées en tenant compte des précipités déjà existants (voir relation A.9 en annexe). De même, les paramètres de diffusion lacunaire (concentrations d'équilibre, coefficients de diffusions) sont déterminés en fonction de la température (relation 2.34). Ensuite, pour chaque type de précipités, les concentrations d'équilibre de chaque soluté sont calculées. Cela permet le calcul des différentes composantes de l'énergie libre nécessaire à la formation d'un germe (énergie de surface, énergie de changement de phase et énergie de distorsion élastique). Ensuite, le calcul du flux de germination est effectué en plusieurs étapes (calcul du rayon critique de germination, du facteur de Zeldovich, de l'énergie de critique de germination, etc.). Afin de déterminer la cinétique d'évolution du système et l'incrément de temps maximal admissible pour l'itération suivante, les concentrations et vitesses d'interfaces sont calculées en résolvant un système d'équations formé par les équations de Gibbs-Thomson et d'unicité de la vitesse de croissance/dissolution quelque soit le soluté. Pour chaque type de précipités, un nombre de germes  $J \Delta t$  est alors ajouté à la classe de rayon  $r^* + \Delta r^*$ . Les coefficients  $\alpha_{ij}$  de la matrice des vitesses de croissance sont ensuite calculés, permettant alors la résolution d'un système d'équations linéaires donnant le nombre de précipités de chaque classe en fin de pas de temps. Enfin, le temps, la température, les fractions volumiques et le nombre de classes dans les distributions sont actualisés. Un aperçu général de l'algorithme de calcul est illustré sur la figure 2.12.



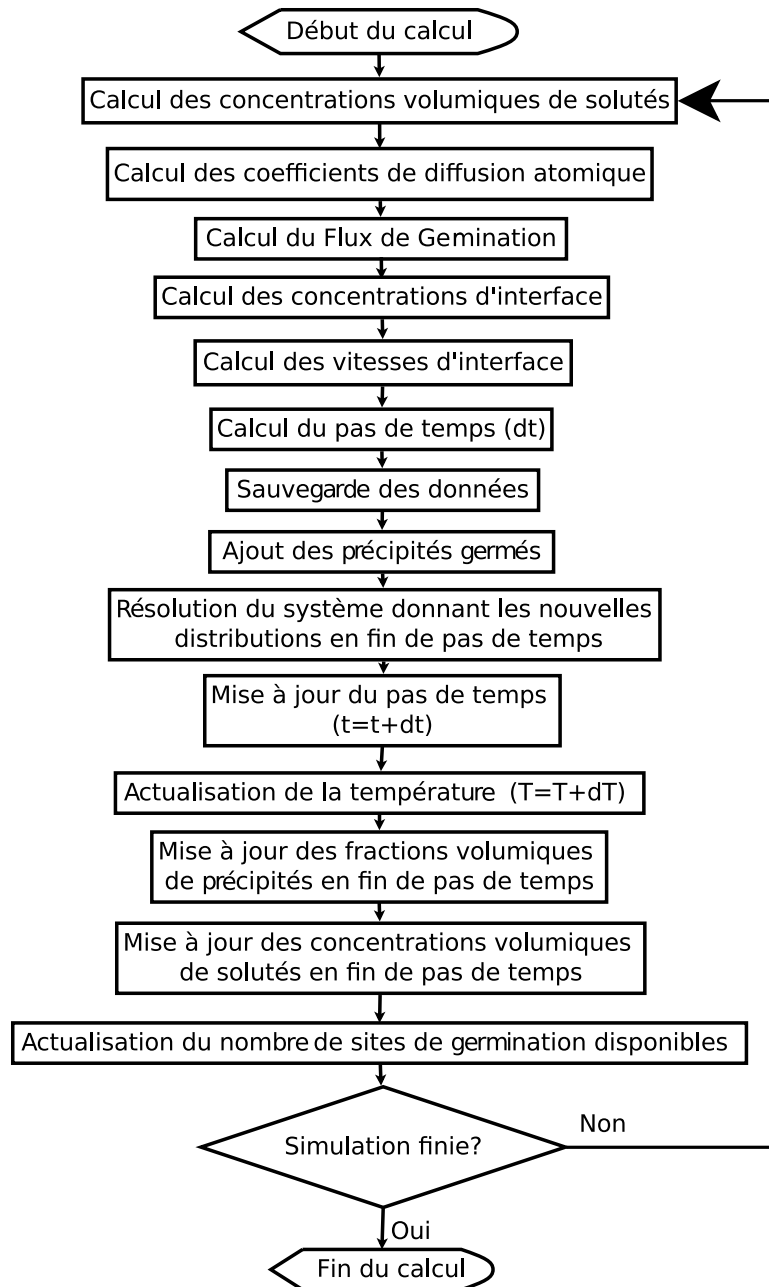


Figure 2.12: Algorithme de calcul général

## 2.3 PLATE-FORME DE CALCUL C++ / PYTHON

### 2.3.1 DESCRIPTION DU MODÈLE ORIENTÉ OBJET

Le but de cette section n'est pas de faire une présentation détaillée du modèle Orienté Objet mis en place, mais plutôt une brève description. Le code de calcul que nous visons doit permettre de garantir des performances satisfaisantes, la justesse des calculs et surtout la possibilité d'élaborer et d'intégrer de nouveaux modèles. Ainsi, un code libre ou open source qui supporte le paradigme de la Programmation Orientée Objet a été privilégié.

#### Besoins

Les besoins qui nous ont conduit à adopter une approche orientée objet sont globalement :

- garantir la possibilité d'élaborer et d'intégrer de nouveaux modèles;
- garantir la pérennité et l'évolutivité des concepts;
- permettre d'effectuer des calculs multi-physiques;
- profiter des paradigmes de la programmation orientée objet (héritage encapsulation, polymorphisme, etc.);
- permettre l'intégration dans la plate-forme de calcul GranOO, utilisée pour les calculs DEM;
- s'assurer d'avoir des performances satisfaisantes;
- garantir un code "open source" et portable sur tout type de système.

### Étape de conception

Pour des développements Orientés Objets, l'Unified Modeling Language (UML) est un outil de modélisation et de description incontournable. Ce langage graphique normalisé qui permet d'apporter une vue synthétique et didactique a été utilisé tout au long de l'étape de conception. Les objets possèdent des relations qui leur permettent d'interagir et de communiquer. Pour représenter ces relations, les "diagrammes de classes" sont utilisés. Un diagramme de classes montre une vue statique de la structure des classes constituant le modèle orienté objet.

Historiquement, les premières approches utilisées étaient fonctionnelles et avaient comme inconvénients d'être peu évolutives et difficilement maintenables. La programmation orientée objet (POO) a été développée à partir de 1970 et s'est ensuite répandue à partir des années 1980. La POO propose une organisation différente où les traitements et données sont regroupés au sein de mêmes entités : les objets. Ces derniers sont des entités possédant une identité, un état (ensemble d'attributs) et un comportement défini par des méthodes. Les objets sont décrits par des modèles : les classes. Une classe est un modèle qui décrit toutes les propriétés et le comportement d'une même famille d'objet. Les objets sont alors la concrétisation d'une classe, ou plus précisément, une instance d'une classe. Un diagramme de classe de notre modèle métallurgique est présenté sur la figure 2.13. La classe Material modélise un matériau qui possède une composition chimique (classe ChemicalComposition). Un matériau est composé de grains (classe Grain) et est caractérisé par un état microstructural défini par les grains qui le composent.

La classe Grain, qui est une classe abstraite, modélise le grain. Une classe abstraite est une classe non instanciable, dont l'implémentation n'est pas complète et représente juste une famille d'objet dont elle sert de base. La classe Grain se dérive en précipité (classe Precipitate) et en grain de solution solide (SSGrain) : les précipités et les grains de solution solide "sont des" grains, au sens de l'héritage orienté objet. Les précipités envisagés en première approche seront les précipités GP (classe GuinierPreston) et S' (classe Sprime).

La classe ChemicalComposition modélise le concept de composition chimique, faite d'un ou plusieurs éléments chimiques (classe ChemicalElement) ayant chacun une concentration (classe Concentration). Pour les grains, les concentrations peuvent varier donc les concentrations initiales de tous les éléments physiques présents de même que les concentrations à chaque incrément de temps seront stockées. La diffusion chimique (classe Diffusion) s'opère d'un élément chimique à un autre.

Une interface (classe Boundary) peut être soit un joint de grain (type grain-grain), soit de type grain-précipité ou précipité-précipité. Toutes les classes

définies sont : Boundary, ChemicalComposition, ChemicalElement, Computation, Concentration, Diffusion, Grain, GuinierPreston, Hardening, InterfacialConcentration, Material, Polynomial, Precipitate, Quenching, RadiusDistribution, Sprime, SSGrain, Temperature, ThermalLoading, ThermoDynamicsConstant, Vacancy. Toutes ces classes seront regroupées dans une librairie appelée "LibMetallurgical" qui pourra donc s'insérer dans un code de calcul existant.

### Étape de développement

Afin de faciliter une future intégration dans la plate-forme GranOO, le choix de développement s'est porté sur une combinaison des langages C++ et Python. En effet, d'une part, le langage C++ (déjà utilisé pour la plate-forme GranOO) est un langage qui supporte le style orienté objet, garantit la performance, la robustesse de même que la portabilité de nombreuses bibliothèques libres. D'autre part, le langage Python en raison de sa facilité d'utilisation, sa flexibilité et sa simplicité, est très utilisé en recherche et en industrie. De plus, le langage Python est un langage interprété multi paradigmes et multi plate-forme. L'idée de développement consiste à initialiser le calcul et instancier les objets issus des données d'entrées en langage python, puis à exécuter les calculs avec les bibliothèques C++ très performantes, et enfin, donner la possibilité de manipuler les objets et post-traiter les résultats en fin de calcul en langage Python.

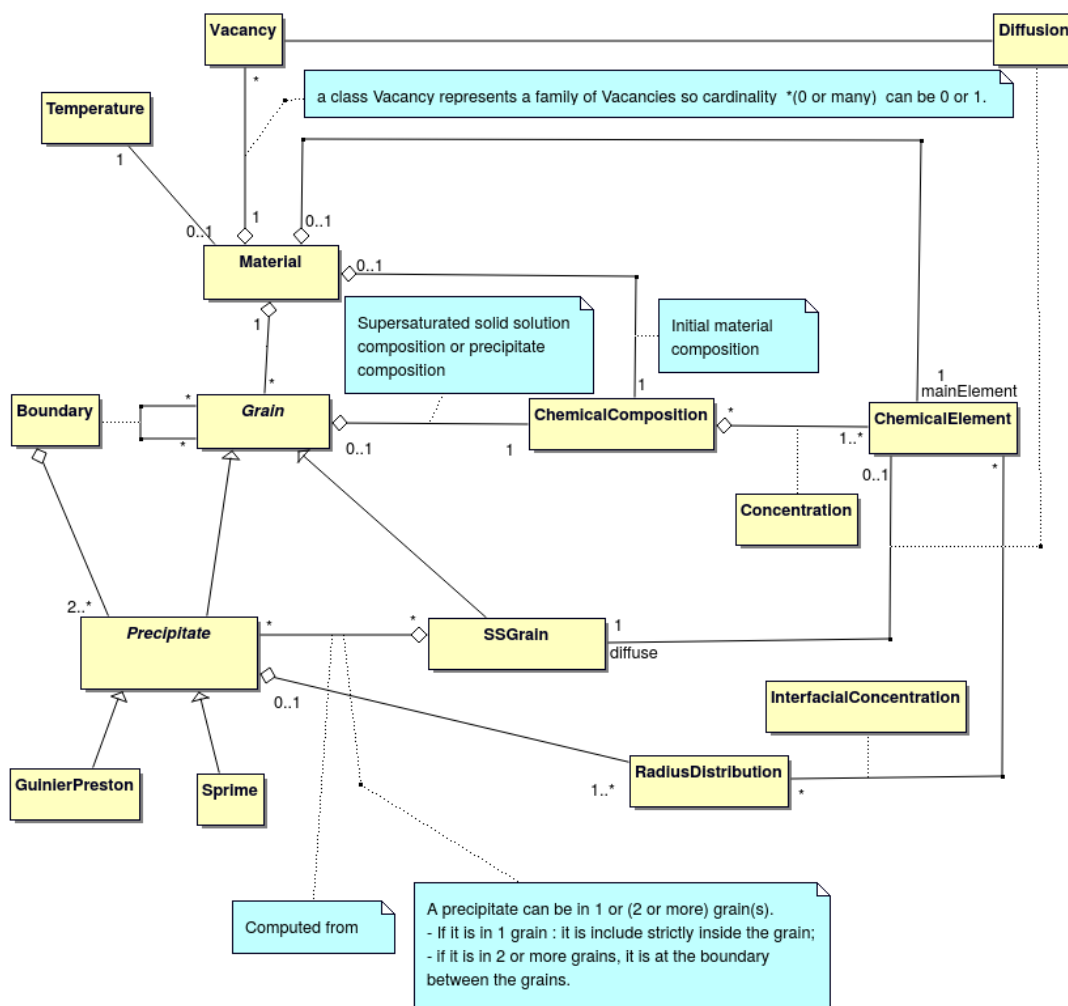


Figure 2.13: Vue globale du diagramme de classes orienté objet

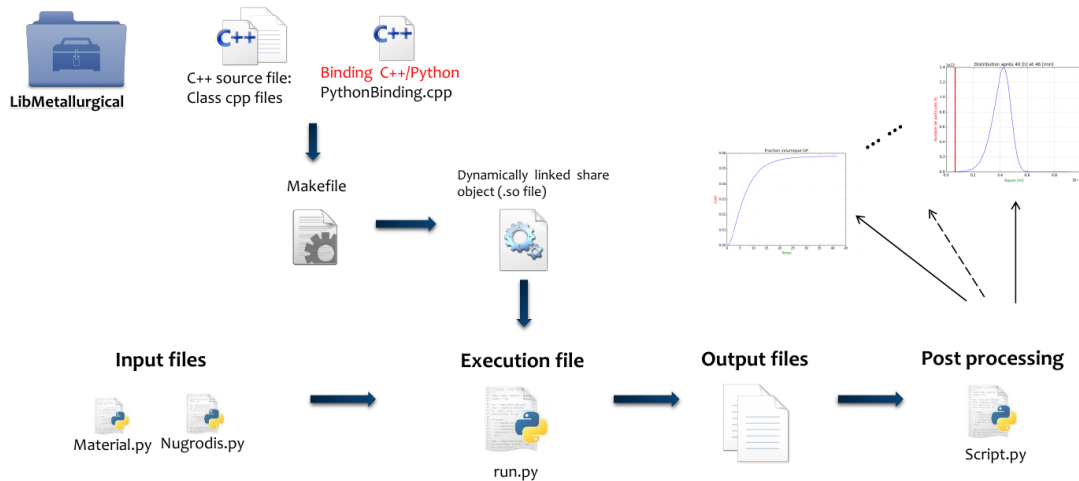


Figure 2.14: Architecture de la plate-forme de calcul lié aux aspects métallurgiques

## 2.4 MODÈLE DE DURCISSEMENT STRUCTURAL

### 2.4.1 MÉCANISMES DE DURCISSEMENT PAR PRÉCIPITATION DES ALLIAGES D'ALUMINIUM

Dans le cas des alliages d'aluminium de la série zxxx, les principaux mécanismes de durcissement proviennent de l'interaction entre les dislocations et les précipités, ces derniers se comportant comme des obstacles au déplacement des dislocations. Ainsi, la distribution (taille, nombre de précipités par unité de volume, ...) de ces précipités (obstacles), leur nature, influencent directement la mobilité des dislocations. Même si d'autres composantes peuvent limiter le mouvement des dislocations (contraintes internes, nature de la solution solide, dislocations initialement présentes), l'effet des précipités reste majeur. Les principaux mécanismes physiques de durcissement structural peuvent se classer en trois groupes [136] :

- le durcissement dû aux effets à distance : il résulte de l'apparition de microcontraintes internes locales dont l'origine est par exemple l'écart de volume molaire précipités/solution solide ou la différence entre les constantes d'élasticité des précipités et de la solution solide.
- le durcissement dû aux effets de cisaillement direct : le cisaillement des précipités par les dislocations (figure 2.15) dépend des caractéristiques de l'interface précipité/matrice de même que les propriétés chimiques et cristallographiques des précipités. La variation de l'énergie des dislocations, l'apparition de nouvelles interfaces précipités/matrices, ou la création de fautes de structures dans les précipités sont autant de mécanismes qui peuvent induire le durcissement dans le cas du cisaillement.
- Durcissement dû aux effets de contournement : par exemple le contournement d'Orowan représenté sur la figure 2.16

### 2.4.2 MODÉLISATION DU DURCISSEMENT STRUCTURAL

La précipitation entraîne une modification des propriétés mécaniques du matériau telles que la limite d'élasticité ou la dureté. La principale difficulté lors de la modélisation de l'évolution des propriétés mécaniques est le passage du comportement microscopique local au comportement macroscopique. Deux approches peuvent être

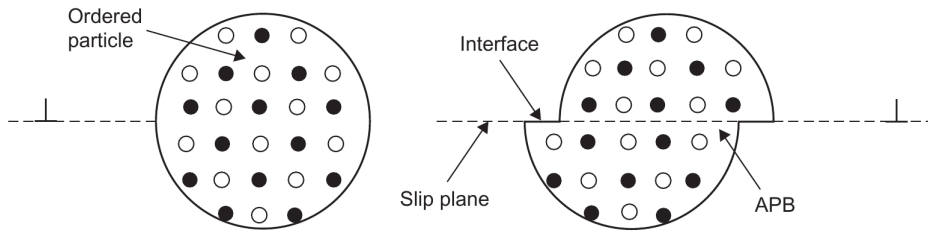


Figure 2.15: Cisaillement d'un précipité sphérique dans le plan de glissement d'une dislocation [113]

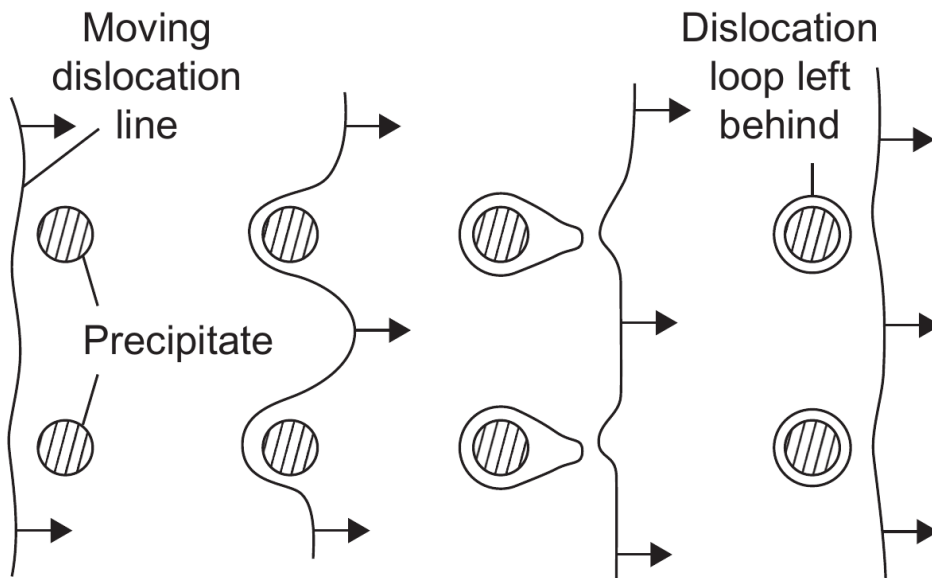


Figure 2.16: Franchissement des précipités par contournement d'Orowan [113]

utilisées pour modéliser l'influence des précipités sur le mouvement des dislocations. D'un côté, une approche mécanique en considérant le déplacement d'une ligne élastique, de tension de ligne donnée, ancrée sur un obstacle et soumise à une contrainte donnée.

D'autre part, une approche physique qui prend en compte directement les mécanismes d'interactions entre dislocations et précipités. Les mécanismes conduisant au durcissement à l'échelle locale sont généralement bien connus. Plusieurs composantes contribuent au durcissement structural :

- le durcissement par effet taille de grain;
- le durcissement par effet de solution solide;
- le durcissement par écrouissage;
- le durcissement par précipitation.

Des lois d'additivité sont utilisées pour représenter le durcissement structural global résultant de la contribution de divers modes de durcissement. De manière générale, les lois d'additions sont de la forme :

$$\sigma^q = \sigma_1^q + \sigma_2^q \quad (2.50)$$

Par exemple, dans le cas de durcissements plutôt faibles comme les effets de taille de grain et de solution solide, les contributions sont additionnées linéairement ( $q = 1$ ). Par contre, les contributions importantes, de même nature, mais de fraction volumique différente telle que le durcissement des précipités GP et S', sont généralement additionnées par une loi pythagoricienne ( $q = 2$ ). Par ailleurs, lorsque le rayon des précipités augmente, leur contribution au durcissement devient faible. Par conséquent, il est généralement admis que la contribution des gros précipités peut être négligée en première approche.

## 2.5 VALIDATION

### 2.5.1 VALIDATION DANS LE CAS DE LA MATURATION

Afin de valider les premiers résultats obtenus par le modèle de précipitation, un modèle de durcissement avec comme paramètre d'entrée la fraction volumique de précipités GP obtenue à l'issue d'un calcul de maturation a permis d'estimer la dureté de l'alliage d'aluminium 2024 et de la comparer avec des données expérimentales. Pour ce modèle de durcissement, les différentes contributions retenues sont :

- le durcissement par effet de taille de grain : cette contribution qui prend en compte l'effet des joints de grain est obtenue en fonction du diamètre  $D$  des grains par la relation suivante  $H_V = 15.4 + 18.4D^{-1/2}$  [137] et en supposant  $\sigma_{\text{grain}}^{\text{el}} \simeq 3H_V$ , où  $\sigma_{\text{grain}}^{\text{el}}$  est la limite d'élasticité. Pour des diamètres équivalents compris entre 50 microns et 150 microns, cette contribution varie peu (entre 51MPa et 54MPa), donc elle sera par la suite estimée à 54 MPa.
- le durcissement par effet de solution solide : le durcissement apporté par la solution solide dépend de la concentration des différents atomes de soluté et peut s'écrire [138] :

$$\sigma_{\text{ss}} = \sum_i k_i C_{i_{\text{ssat}}}^{2/3} \quad (2.51)$$

avec  $k_i$  une constante en MPa/at%  
 $C_{i_{ssat}}$  la somme des pourcentages atomiques des solutés  
dans la solution solide

En tout début de maturation, seuls les effets "joints de grain" et "solution solide" contribuent au durcissement de l'alliage. Pour notre alliage 2024-T351, les concentrations atomiques en cuivre (Cu) et magnésium (Mg) sont respectivement de 1,7% et 1,5%. De plus, après trempe, la dureté mesurée est de 89 HV. La relation 2.51 nous permet alors d'estimer la valeur du paramètre  $k$  ( $k = 40$  MPa/at%). La contribution liée au durcissement par solution solide est donc estimée à :  $\sigma_{ss} = 143$  MPa

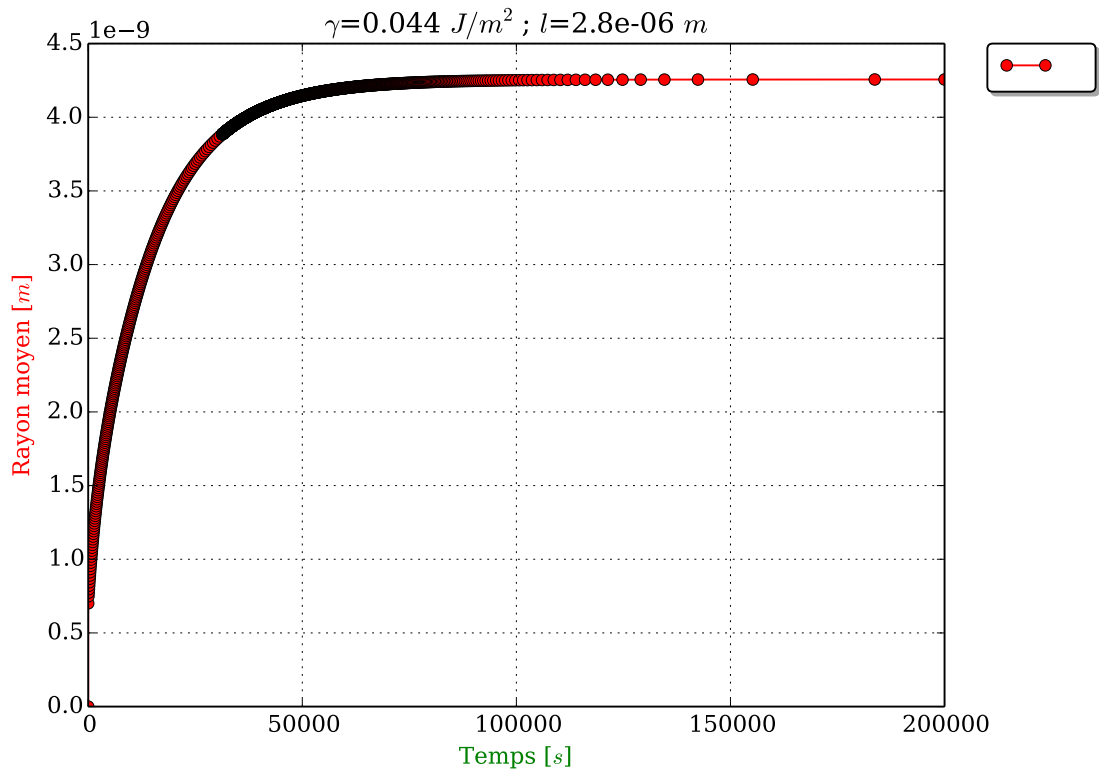
- le durcissement par précipitation : lors de la maturation, seules les précipités GP sont susceptibles de germer. Leur contribution peut être exprimée comme suit [139] :

$$\sigma_{GP} = \frac{M \cdot \Delta\mu}{4\pi\sqrt{2}} \sqrt{f_{v_{GP}}} \quad (2.52)$$

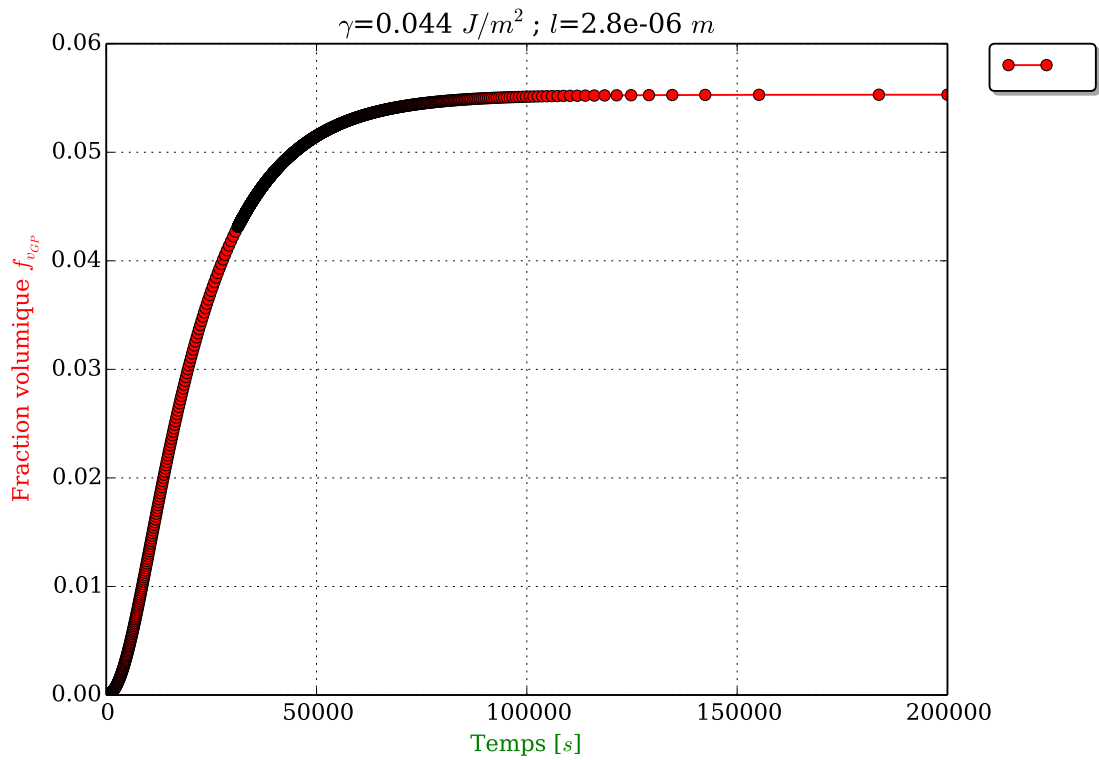
avec  $M$  le facteur de Taylor que nous supposerons égale à 3, valeur couramment admise pour un métal non texturé de structure CFC.  
 $f_{v_{GP}}$  la fraction volumique des précipités GP.  
 $\Delta\mu$  la différence du module de cisaillement entre le précipité et la matrice.

L'évolution de la fraction volumique sera obtenue grâce au modèle de précipitation (équation 2.48), et permettra ainsi de déduire la contribution des précipités GP au cours du temps. La fraction volumique réelle des précipités GP à la fin de la maturation serait de l'ordre de 5,5% [138]. Une calibration du modèle de précipitation est alors nécessaire : les paramètres de calibration sont l'énergie de surface par unité d'aire  $\gamma_{GP}$  et la demi-distance entre puits de lacunes  $l$ .

Les résultats de la calibration pour un couple de paramètres  $(\gamma_{GP}, l) = (0.044 \text{ J/m}^2, 2.8 \text{ }\mu\text{m})$  sont présentés sur les figures 2.17 et 2.18.



(a) Évolution du rayon moyen des précipités GP



(b) Fraction volumique de précipité GP

Figure 2.17: Résultats d'un calcul de maturation pour une durée de 55h



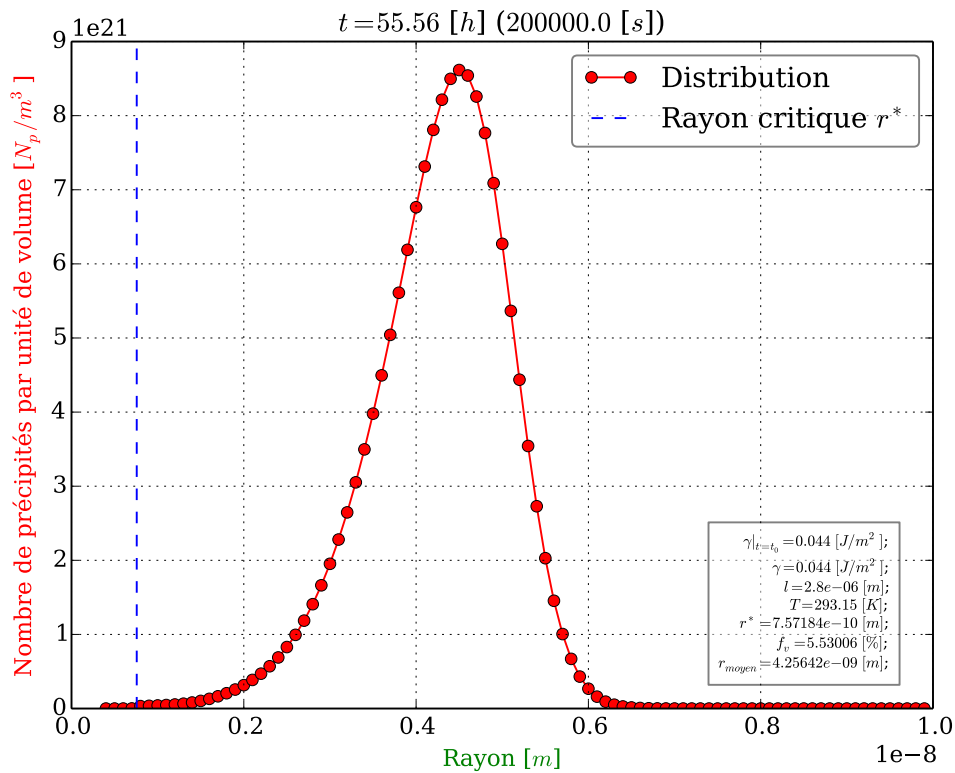


Figure 2.18: Distribution des précipités GP en fin de maturation

Une trempe suivie d'une maturation sont effectuées sur un échantillon d'AA2024, et des essais de dureté sont réalisés périodiquement au cours du temps, pendant une durée de 80h. Les résultats montrent qu'entre 35h, 51 h et 55 h, la population de précipité est stable (figure 2.19), avec un rayon, une fraction volumique et une distribution qui restent pratiquement constants. Ainsi, la population au bout de 55 h sera considérée comme celle au bout de 80 h. Les résultats sont comparés avec ceux issus du modèle de durcissement structural (figure 2.20), et montrent une bonne adéquation entre les résultats obtenus grâce à la simulation numérique et les mesures de dureté.

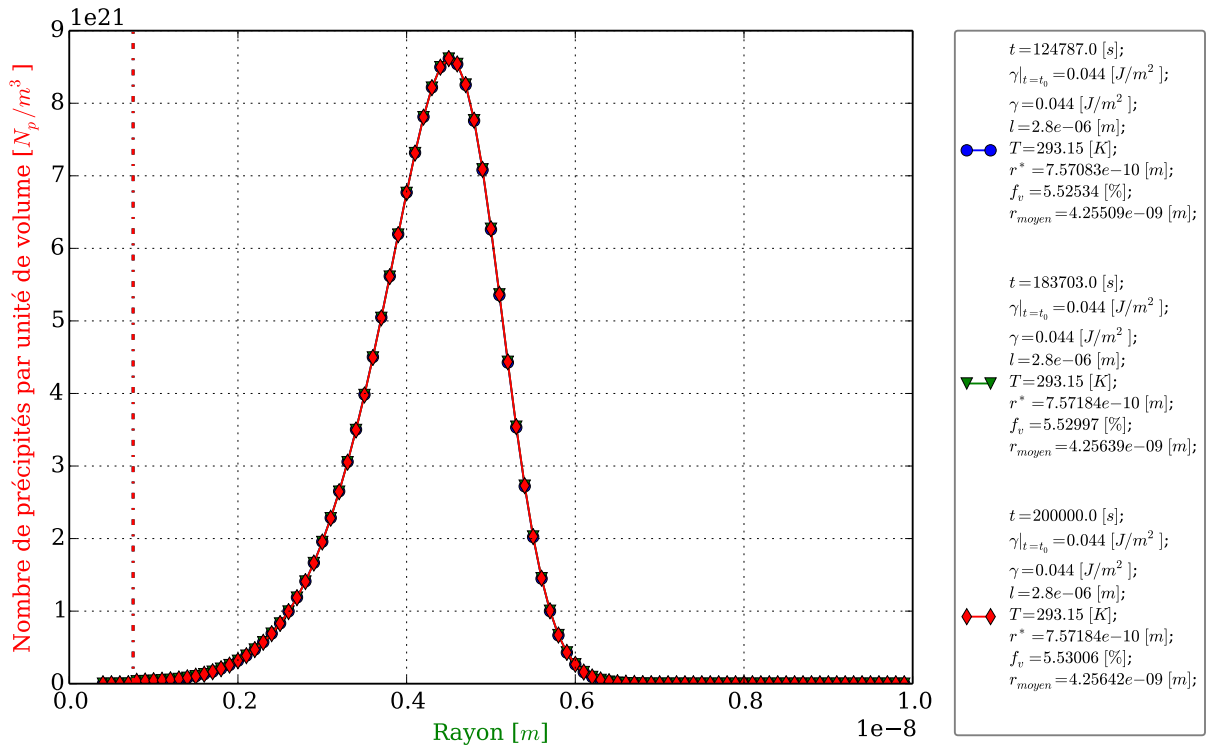


Figure 2.19: Population de précipités GP à 35 h (124787 s), 51h (183703 s) et à 55 h (200000 s)

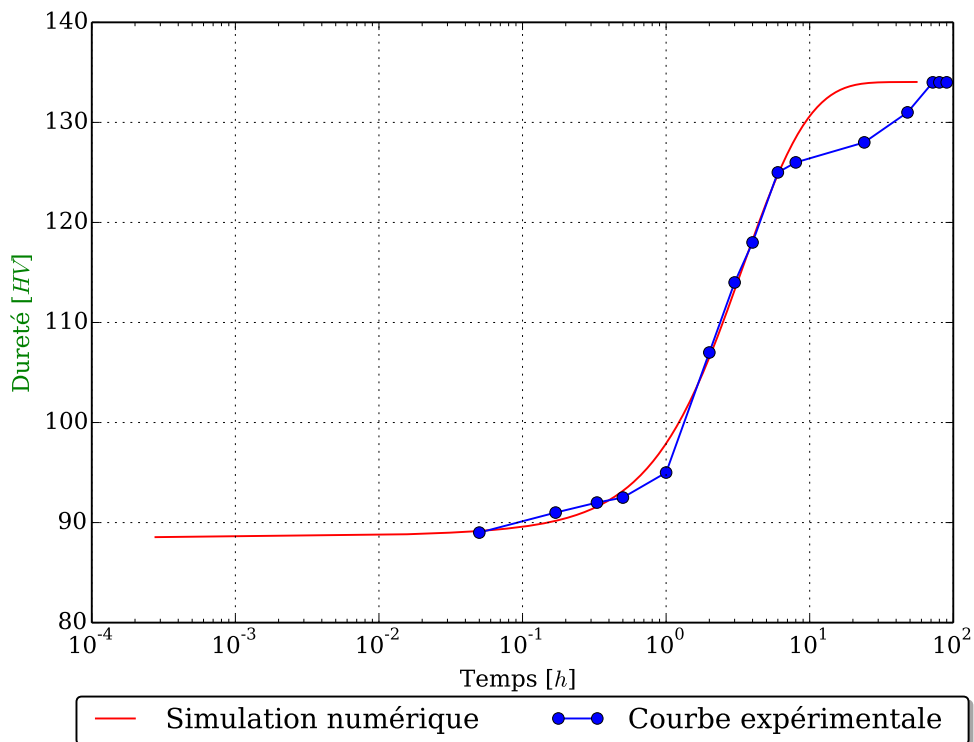


Figure 2.20: Comparaison courbe de dureté expérimentale et numérique

## 2.5.2 DANS LE CAS D'UN CYCLE THERMIQUE

Afin de valider les modèles développés lors d'un cycle thermique, des mesures de températures réalisées lors d'une opération de soudage FSW dans une plaque d'aluminium 2024-T351 sont utilisées. Ces mesures sont issues de campagnes expérimentales instrumentées effectuées antérieurement aux travaux développés dans cette thèse [92], et ont été obtenues grâce à des thermocouples disposés à mi-épaisseur, à différentes positions de la plaque.

Des calculs de précipitation sont effectués sur un cycle de température que nous nommerons TKA (figure 2.21) avec un pic à 218° C (491 K). Ce cycle correspond à un point mesuré dans la ZAT à environ 28 mm de l'axe de soudage (figure 2.22). De plus, ce cycle permet d'obtenir des résultats avec des temps de calcul raisonnables, car pour des températures plus élevées, les vitesses de dissolution/croissance deviennent très importantes et réduisent très fortement le pas de temps (voir section 2.2.4.2).

Les résultats obtenus montrent comme attendu une baisse (5.53% à 5.1%) de la fraction volumique des précipités GP (figure 2.23). Cette dissolution est confirmée par le profil de dureté qui présente une chute au début de la ZAT (figure 2.22). En effet, comme le montre Genevois (2004) [140], les précipités présents dans cette zone de la ZAT sont de type GP, et le principal phénomène s'y produisant est leur légère dissolution, ce qui entraîne une légère baisse de dureté.

Néanmoins, la dissolution obtenue reste faible relativement aux valeurs suggérées par les travaux de Genevois. Selon ces travaux, dans la zone de la ZAT considérée, la fraction volumique des précipités GP passe de 5.5% à 4.8%. Cette différence peut s'expliquer par le fait que la distribution de précipités GP au début de cycle thermique, à savoir celle obtenue en fin de maturation (figure 2.18), est très stable. En effet, la distribution des précipités GP en fin de maturation est située fortement à droite du rayon critique ( $r^*$ ) ce qui implique une dissolution beaucoup plus lente lors de la montée en température.

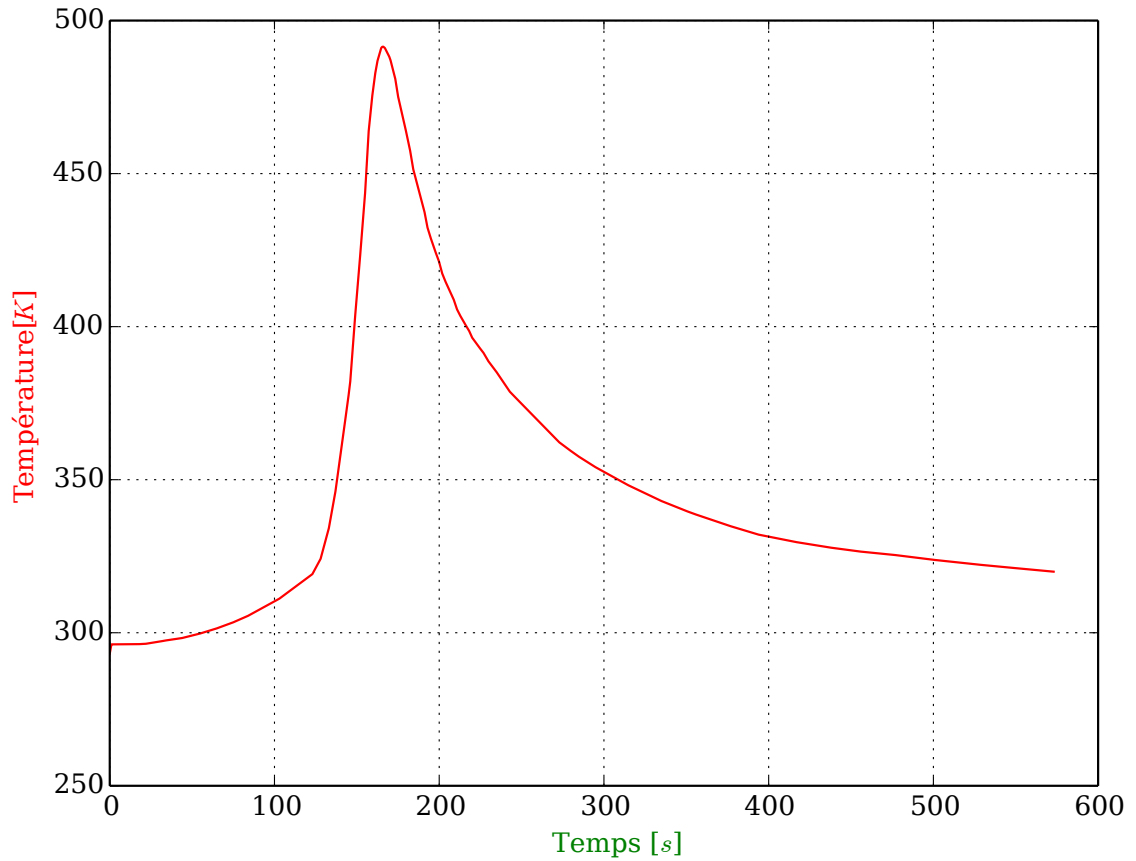


Figure 2.21: Cycle thermique TKA mesuré en un point situé au début de la ZAT

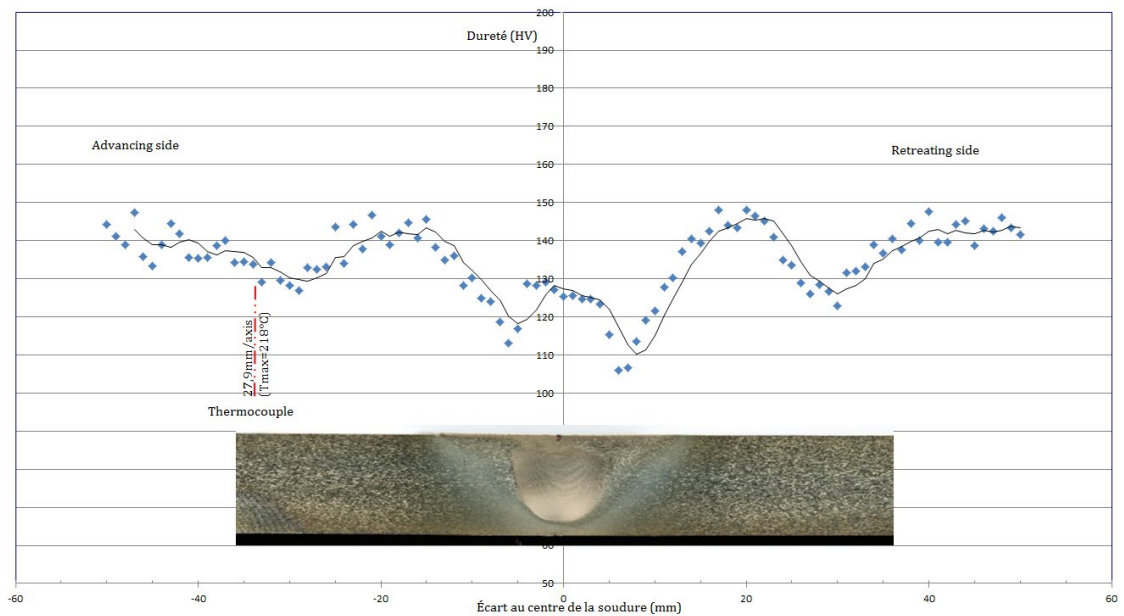


Figure 2.22: Profil de dureté HV1 dans le cordon de soudure

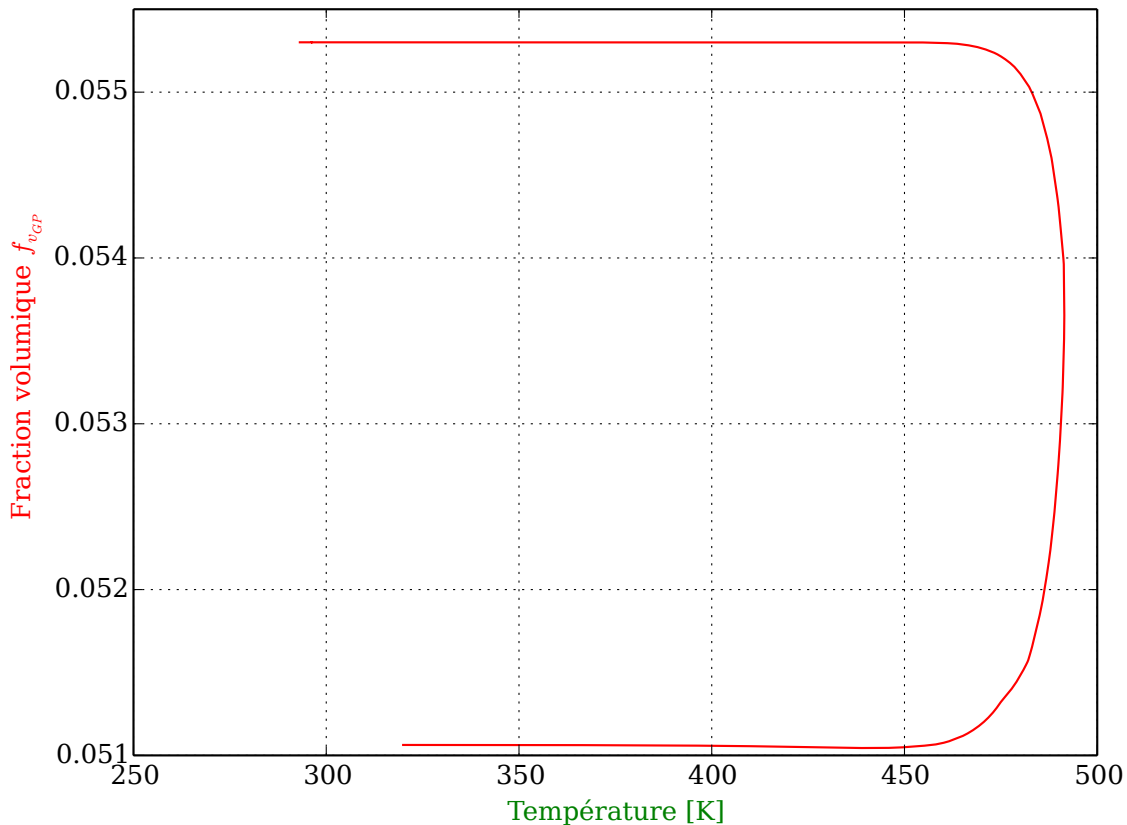


Figure 2.23: Évolution de la fraction volumique des précipités GP lors du cycle thermique TKA

## 2.6 CONCLUSION

Un modèle métallurgique dont l'objectif est la prédiction de l'évolution de la distribution de tailles de précipités existants au cours du temps, en fonction de la température, a été présenté. Ce modèle a ensuite servi à la mise en place d'une plateforme autonome de calcul et de simulation métallurgique dédiée à la précipitation. Afin d'assurer l'évolutivité du modèle et une intégration aisée dans une plateforme de simulation multiphysique, notamment celle utilisée pour la modélisation mécanique, le code de calcul dédié à la précipitation a été conçu suivant une approche orientée objet, en langages C++ et Python. Le modèle développé a été validé dans le cas d'une maturation et a permis d'obtenir des résultats conformes aux mesures de dureté. Dans le cas d'un cycle thermique (au début de la ZAT), le modèle a permis de reproduire le début de dissolution des précipités GP attendu dans cette zone. Toutefois, des travaux supplémentaires sont nécessaires pour des calculs sur des cycles présentant des températures plus élevées ( $> 218^{\circ}\text{C}$ ).



*Learn from yesterday, live for today, hope for tomorrow.  
The important thing is not to stop questioning.*

— Albert Einstein

L'objectif de ce chapitre est de présenter les développements d'un modèle par éléments discrets permettant de représenter le comportement mécanique d'un alliage d'aluminium lorsqu'il est soumis à des conditions de grandes déformations et vitesses de déformation telles qu'elles peuvent être rencontrées dans le cas d'un procédé comme le FSW.

## Sommaire

3.1	Problème des grandes déformations . . . . .	70
3.2	Loi de comportement . . . . .	70
3.2.1	Description du modèle . . . . .	70
3.2.2	Méthode par potentiel: identification du comportement élastique . . . . .	76
3.3	Construction de la loi basée sur les potentiels . . . . .	89
3.3.1	Présentation du modèle- loi de comportement à seuil . . . . .	89
3.3.2	Étude du comportement macroscopique émergent . . . . .	89
3.3.3	Méthode de calibration . . . . .	94
3.4	Conclusion . . . . .	99

### 3.1 PROBLÈME DES GRANDES DÉFORMATIONS

Un des avantages de la DEM est de pouvoir combiner les avantages de la formulation eulérienne (pas de distorsion du maillage) et de la formulation lagrangienne (historique de chaque particule). Dans un procédé tel que le FSW, la matière subit d'importantes déformations dans la zone malaxée. Ainsi, dans le cadre de la simulation numérique du FSW, bien que la méthode DEM permette d'éviter les problèmes de distorsions de maillage, les modèles par éléments discrets développés doivent pouvoir prendre en compte ces grandes déformations et être capable de représenter le malaxage de la matière.

#### Pistes pour modéliser les grandes déformations et choix de l'approche

Tout d'abord, pour représenter le comportement d'un matériau continu (non granulaire), les modèles doivent prendre en compte les forces de cohésion de la matière. Nous avons vu (chapitre 1) que deux approches principales émergent :

- une approche basée sur les forces issues de liens poutres entre éléments discrets,
- une approche basée sur les potentiels d'interaction.

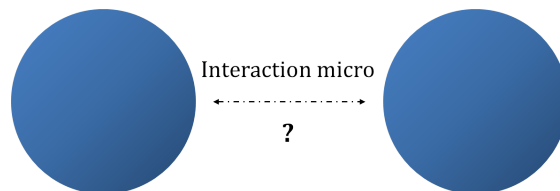


Figure 3.1: Interaction au niveau des éléments discrets

Cependant, dans notre cas, le choix de l'approche doit aussi être guidé par la facilité et la flexibilité à représenter le comportement mécanique en grandes déformations. Ainsi, pour prendre en compte ce comportement lors du malaxage, l'approche privilégiée est l'approche par potentiels. En effet, même si des liens de type poutres en grandes déformations peuvent être utilisés, la gestion des interactions, la construction et la suppression des poutres posent des difficultés dans le cas du malaxage. De plus, un des avantages du choix de l'approche par potentiels est que le "maillage" représentant toutes les interactions entre les éléments discrets n'est pas fixe, mais est déterminé automatiquement en fonction de la position des particules. Le choix que nous avons fait de l'approche par potentiel découle principalement de cette raison.

## 3.2 LOI DE COMPORTEMENT

### 3.2.1 DESCRIPTION DU MODÈLE

#### 3.2.1.1 Forces exercées sur un système de particules discrètes - Loi de comportement

La méthode des éléments discrets est une méthode où, à la différence des méthodes continues, la loi de comportement est définie à l'échelle microscopique; les forces d'interactions caractérisant la loi de comportement doivent donc être définies à l'échelle des éléments discrets.

Deux types de forces sont considérées :

- les forces conservatives  $F^C$ . Elles peuvent se classer en 2 groupes : les forces conservatives purement répulsives  $F^{CR}$ ; et les forces conservatives purement attractives  $F^{CA}$ ;



- les forces dissipatives  $F^D$  qui réduisent la différence de vitesse entre les particules.

Ces forces sont analogues à celles utilisées dans la méthode DPD (dissipative particle dynamics) où, un autre type de force, les forces stochastiques  $F^S$ , sont considérées en plus des forces conservatives et des forces dissipatives ( $F^C$  et  $F^D$ ) [141, 142].

### Choix du potentiel et définition des forces conservatives

Les forces conservatives s'exerçant entre 2 éléments discrets  $i$  et  $j$   $F_{ij}^{\text{Conservative}}$  dérivent d'un potentiel d'interaction  $\Phi_{ij}$ . Le choix du potentiel d'interaction s'est porté vers des potentiels de type Lennard-Jones, aussi utilisés en dynamique moléculaire, d'une part pour des raisons de simplicité, et, d'autre part, car ce type de potentiel est largement documenté.

$$\Phi_{ij}(\delta) = \epsilon \left[ \left( \frac{n}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-m} - \left( \frac{m}{m-n} \right) \left( \frac{\delta}{\delta_{eq}} \right)^{-n} \right] \quad (3.1)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^{\text{Conservative}} = \frac{m n \epsilon}{(m-n)\delta_{eq}} \left[ \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{m+1} - \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{n+1} \right] \mathbf{u} \quad (3.2)$$

- avec  $\delta$  distance entre les deux particules  $i$  et  $j$   
 $\delta_{eq}$  distance d'équilibre entre deux particules  
 $\epsilon$  valeur absolue du potentiel à la distance d'équilibre  
 $m$  exposant représentant la partie répulsive de la force  
 $n$  exposant représentant la partie attractive de la force  
 $\mathbf{u}$  le vecteur unitaire selon la direction de l'interaction, dans le sens  $j$  vers  $i$

Les paramètres  $m$  et  $n$  définissent la forme et l'amplitude des courbes de potentiels ou de forces. Des exemples sont illustrés sur la figure 3.2 avec quelques couples de paramètres  $m$  et  $n$ .

Dans certains cas, afin de permettre, d'une part la modulation de la raideur de la force en attraction et en repulsion (par exemple, une force derivant d'un potentiel très raide en repulsion et très souple en attraction), et d'autre part la réduction du nombre de paramètres, le paramètre  $m$  représentant la partie répulsive de la force sera défini en fonction du paramètre  $n$  représentant sa partie attractive:

$$m = t n$$

avec  $t$  entier positif modulant la partie répulsive en fonction de la partie attractive ( $t = m/n$ )

Ainsi, pour modéliser une force très raide en répulsion et très souple en attraction, le paramètre  $t$  peut être modulé pour obtenir une valeur de l'exposant  $m$  grande par rapport à  $n$ .

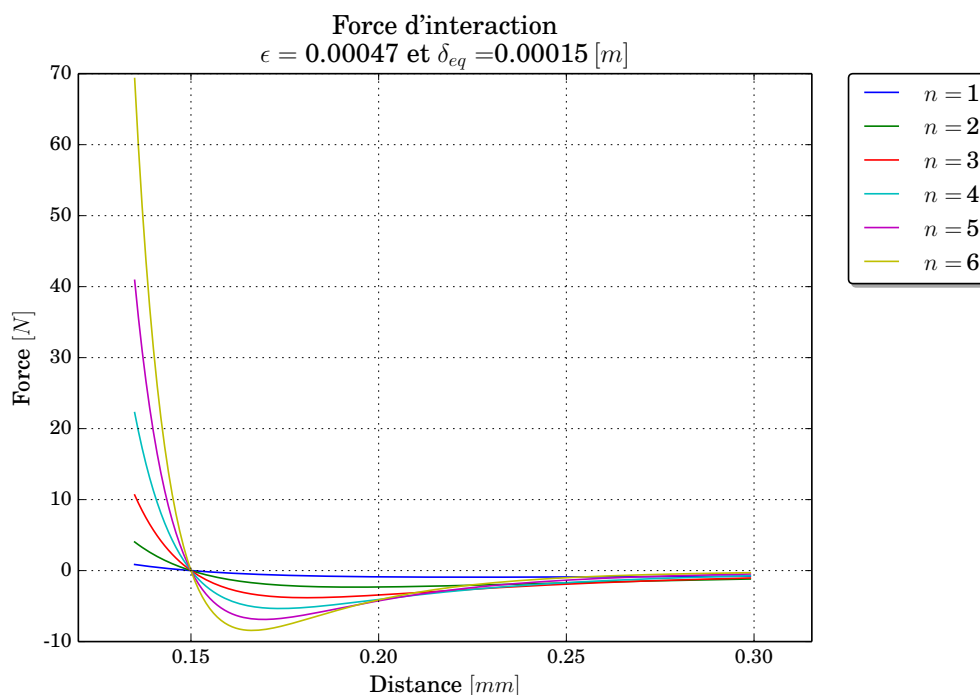


Figure 3.2: Forme de la courbe force-distance en fonction des couples de paramètres (m,n) avec  $m=2n$ : (m,n)= (2,1), (4,2), (6,3), (8,4), (10,5), (12,6)

### Forces dissipatives

Les forces dissipatives sont exprimées comme suit:

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma (\mathbf{u} \cdot \Delta \mathbf{V}_{ij}) \mathbf{u} & , \delta \leq \delta_{lim} \\ \mathbf{F}_{ij}^D = 0 & , \delta > \delta_{lim} \end{cases} \quad (3.3)$$

avec	$\mathbf{F}_{ij}^D$	la force dissipative;
	$\delta$	distance entre les deux particules i et j;
	$\gamma$	coefficient caractérisant la viscosité de l'interaction;
	$\Delta \mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j$	avec $\mathbf{V}_i$ et $\mathbf{V}_j$ les vitesses respectives de i et j;
	$\delta_{lim}$	distance maximale d'interaction;
	$\mathbf{u}$	le vecteur unitaire suivant la direction de l'interaction, dans le sens j vers i.

#### 3.2.1.2 Distance d'équilibre

La distance d'équilibre  $\delta_{eq}$  ne dépend que de la distance entre deux éléments discrets en contact. Cette distance d'équilibre devrait être égale à la distance entre deux éléments lorsqu'ils présentent un seul point de contact (voir figure 3.3). Cependant, en pratique, lors de la construction d'un domaine discret, tous les éléments discrets ne sont pas parfaitement en contact. Ils sont donc toujours très légèrement interpénétrés ou espacés. En conséquence, définir la distance d'équilibre comme  $\delta_{eq} = R_i + R_j$

impliquerait un domaine initial instable (hors-équilibre) dû à l'existence de forces non nulles. Pour palier à ce problème de stabilité initiale du domaine, une autre approche a été utilisée pour la définition de la distance d'équilibre: au début de la simulation, pour chaque élément discret  $j$ , une zone initiale naturelle d'interaction  $Z_j$  est définie (figure 3.4). Pour chaque éléments discrets  $k$  contenu dans  $Z_j$ , la paire d'interaction  $\{ED_j, ED_k\}$  est sauvegardée, et la distance d'équilibre entre  $j$  et  $k$  est définie comme étant la distance initiale entre  $j$  et  $k$  juste après la construction du domaine discret ( $\delta_{eq} = O_j O_k$ ). Cela permet d'assurer un système stable au tout début d'une simulation. Au cours d'une simulation, pour toute nouvelle interaction créée entre l'élément discret  $j$  et un autre élément discret  $m$  n'appartenant pas à  $Z_j$ , la distance d'équilibre est définie comme étant  $R_j + R_m$  ( $\delta_{eq} = R_j + R_m$ ).

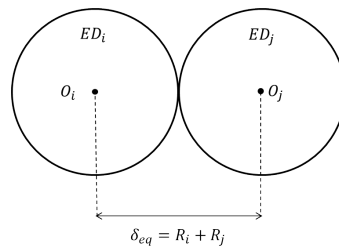


Figure 3.3: Éléments discrets en équilibre parfait

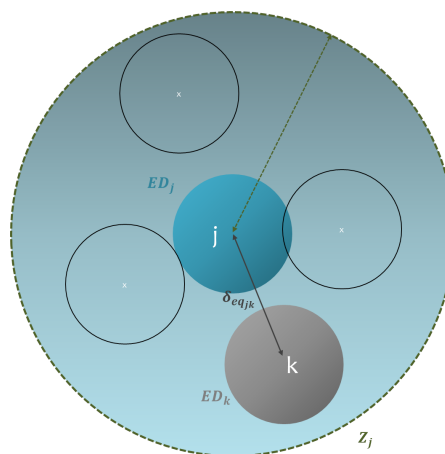


Figure 3.4: État d'équilibre initial

### 3.2.1.3 Distance maximale d'interaction entre deux éléments discrets

Pour obtenir des temps de calcul raisonnables, il est nécessaire d'introduire une distance maximale d'interaction entre deux éléments discrets (figure 3.5). Si la distance entre deux éléments discrets est supérieure à la distance maximale d'interaction, ils n'interagissent pas. Cette distance, notée  $\delta_{lim}$ , dépend du rayon des éléments discrets en interaction.

En pratique, cette distance de coupure a été défini en fonction du rayon moyen  $R_{moyen}$  calculé sur l'ensemble du domaine discret et d'un paramètre  $\alpha$ . La distance lorsque deux éléments discrets sont en contact est approximativement égale à  $2R_{moyen}$ .

Pour cette raison, le paramètre  $\alpha$  sera toujours choisi supérieur ou égal à deux ( $\alpha \geq 2$ ).

$$\delta_{\text{lim}} = \alpha R_{\text{moyen}} \quad (3.4)$$

avec  $\alpha$  un réel positif;

$R_{\text{moyen}}$  défini comme  $\frac{\sum_{i=1}^n R_i}{N_T}$  avec  $N_T$  le nombre total d'éléments discrets.

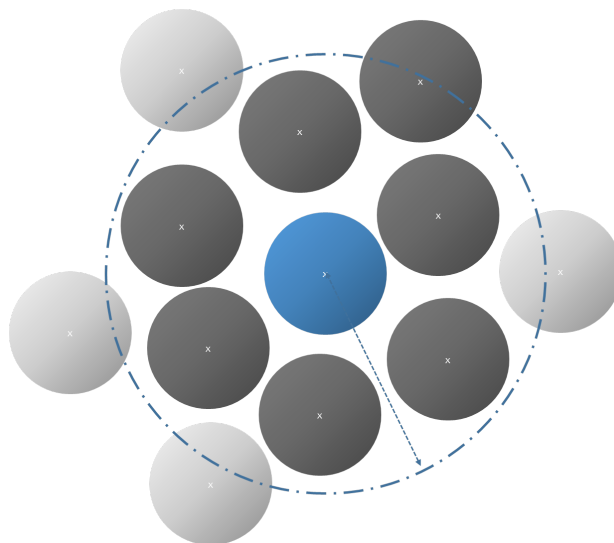


Figure 3.5: Distance maximale d'interaction

### 3.2.1.4 Calcul du pas de temps

Lors des calculs DEM, une étape importante est le choix du pas de temps d'intégration, car le schéma d'intégration utilisé est un schéma explicite, caractérisé par un pas de temps critique  $\Delta t_{\text{critique}}$ , en dessous duquel les calculs peuvent devenir instables.

De manière générale, ce pas de temps critique  $\Delta t_{\text{critique}}$  est défini selon la relation:

$$\Delta t_{\text{critique}} \propto \sqrt{\frac{\min_i M_{ij}}{\max_j K_{ij}}} \quad (3.5)$$

avec  $K_{ij}$  la raideur équivalente de l'interaction entre deux particules  $i$  et  $j$

$M_{ij}$  masse équivalente des particules  $i$  et  $j$  ( $\frac{M_i M_j}{M_i + M_j}$ )

Dans le cas de la formulation proposée pour les forces conservatives, la raideur s'exprime comme suit:

$$K(\delta) = \frac{dF}{d\delta} = -\frac{d^2\Phi}{d\delta^2} \quad (3.6)$$

$$= -\frac{\epsilon m n}{(m-n)\delta^2} \left[ (m+1) \left( \frac{\delta_{\text{eq}}}{\delta} \right)^m - (n+1) \left( \frac{\delta_{\text{eq}}}{\delta} \right)^n \right] \quad (3.7)$$

Ainsi, la raideur varie nettement en fonction de la distance entre les deux éléments discrets. Par exemple, dès lors que deux éléments discrets sont en répulsion, la variation de la raideur s'effectue en puissance  $m$ , et tend vers l'infini lorsque les éléments discrets se rapprochent. Étant donné que la raideur dépend de la distance entre les éléments discrets, une valeur d'interpénétration maximale  $\delta_{ij}^{\text{interMax}}$  peut être définie, ce qui permet aussi de définir une raideur maximale.

Une valeur d'interpénétration maximale  $\delta_{ij}^{\text{interMax}}$  peut être définie en fonction d'un coefficient  $\alpha^{\text{interMax}}$  et des rayons  $R_i$  et  $R_j$  des éléments discrets en interaction telle que:

$$\delta_{ij}^{\text{interMax}} = \alpha^{\text{interMax}}(R_i + R_j)$$

avec  $\alpha^{\text{interMax}}$  un coefficient  $\in [0,1[$   
 $\delta_{ij}^{\text{interMax}}$  interpénétration maximale entre deux éléments discrets

Par conséquent, la raideur maximale d'interaction  $K^{\text{max}}$  est:

$$K^{\text{max}} = K(\delta_{\text{min}}) \quad (3.8)$$

avec  $\delta_{\text{min}} = R_i + R_j - \delta_{ij}^{\text{interMax}}$  distance minimum autorisée

Ainsi pour une interaction entre deux éléments discrets  $ED_i$  et  $ED_j$ , le pas de temps critique est:

$$\Delta t_{ij\text{critique}} \propto \min \left( \sqrt{M_i/K_{ij}^{\text{max}}}, \sqrt{M_j/K_{ij}^{\text{max}}} \right) \quad (3.9)$$

Le pas de temps critique du calcul est donc le plus petit pas de temps de toutes les interactions du domaine discret.

En pratique, la valeur du coefficient  $\delta_{ij}^{\text{interMax}}$  et donc du pas de temps est fixé a priori, en supposant une limite d'interpénétration pour chaque paire d'éléments discrets. La valeur de  $\delta_{ij}^{\text{interMax}}$  influence fortement les temps de calcul. Pour les calculs ayant conduit aux résultats exposés par la suite, le pas de temps a été déterminé en supposant un coefficient  $\alpha^{\text{interMax}} = 0.3$ , ce qui implique que les éléments discrets ne pouvaient pas s'interpénétrer de plus de 30%. Cette valeur a été choisie pour des raisons de robustesse. En effet, pour des valeurs plus faibles, les calculs étaient généralement mal conditionnés (explosion du domaine discret), tandis que pour des valeurs plus grandes, les pas de temps étaient généralement trop faibles et donc les temps de calculs trop importants. Des tests préliminaires ont montré que cette valeur représente de manière générale un bon compromis qui permet d'assurer le bon conditionnement de la plupart des calculs. Cependant, nous notons que d'autres valeurs peuvent être choisies, et qu'une étude plus approfondie sur ce point mériterait d'être effectuée.

### 3.2.1.5 Relation entre les paramètres du potentiel et la constante de raideur élastique

La dérivée première de la force par rapport à la distance est exprimée par la relation 3.6. Par conséquent, au voisinage de la distance d'équilibre ( $\delta \rightarrow \delta_{eq}$ ), la raideur est quasi constante et égale à  $|K(\delta_{eq})|$ . Ainsi, il existe un intervalle dans lequel l'interaction

entre 2 éléments discrets peut être supposée élastique. Dans cet intervalle, la raideur élastique est constante et s'exprime comme suit:

$$K_{el} = \frac{\epsilon m n}{\delta_{eq}^2} \quad (3.10)$$

### 3.2.2 MÉTHODE PAR POTENTIEL: IDENTIFICATION DU COMPORTEMENT ÉLASTIQUE

Le modèle des potentiels est d'abord utilisé dans le cas élastique afin d'identifier le comportement macroscopique émergent, et de déterminer une méthode de calibration.

#### 3.2.2.1 Comportement émergent dans le cas d'un essai de traction

Des essais de traction ont été menés avec une sélection de valeurs représentatives des paramètres microscopiques  $\epsilon$ ,  $m$ ,  $n$  et  $\alpha$ . Tous les essais ont été réalisés avec la plateforme de calcul GranOO ([www.granoo.org](http://www.granoo.org)).

Les résultats obtenus avec deux couples de paramètres différents (voir table 3.1) sont présentés ci-après. Les conditions limites sont mentionnées dans la table 3.2. Pour les potentiels de type Lennard-Jones, les exposants  $m = 12$  et  $n = 6$  sont ceux généralement utilisés respectivement pour représenter les interactions atomiques. Cependant, l'échelle considérée ici étant beaucoup plus grande (mésoscopique ou microscopique), les exposants représentant les forces attractives et répulsives seront supposés beaucoup plus faibles. En gardant de plus un ratio  $m/n=2$ , les couples de paramètres  $(m, n)$  peuvent donc être (10,5), (8,4), (6,3), (4,2) ou (2,1). Le couple  $(m,n)$  choisi pour les résultats présentés ici est (8,4). Le paramètre  $\alpha$  a été choisi égal à 3 car cette valeur représente un bon compromis entre des temps de calcul acceptables et la prise en compte d'un très grand nombre d'interactions. Le paramètre  $\epsilon$  a été choisi pour obtenir un module de Young macroscopique proche de l'aluminium. L'objectif des essais numériques qualitatifs est dans un premier temps d'identifier le comportement macroscopique émergent.

Les éprouvettes numériques sont cylindriques avec 0.02m de diamètre et 0.1m de longueur, et, sont constituées de 2000 éléments discrets.

Table 3.1: Valeur des paramètres pour les différentes courbes

FIGURE	$\epsilon$	$n$	$\alpha$	$m$
cas 1: figure 3.6	100	4	3	8
cas 2: figure 3.7	130	4	3	8

Table 3.2: Conditions limites

ESSAI	CONDITION LIMITE	VALEUR TOTALE	UNITÉ
Traction uniaxiale	vitesse imposée	0.2	m/s
Traction cyclique	déplacement imposé	$0.004 \sin(9.66 \cdot 10^5 t)$	m

Les résultats obtenus, représentés sur les figures 3.6 et 3.7, montrent que lorsque la déformation macroscopique est inférieure à 1%, le comportement macroscopique émergent est similaire à un comportement élastique. Les oscillations observées au début du calcul sont inhérentes à l'algorithme de calcul DEM de la plate-forme GranOO

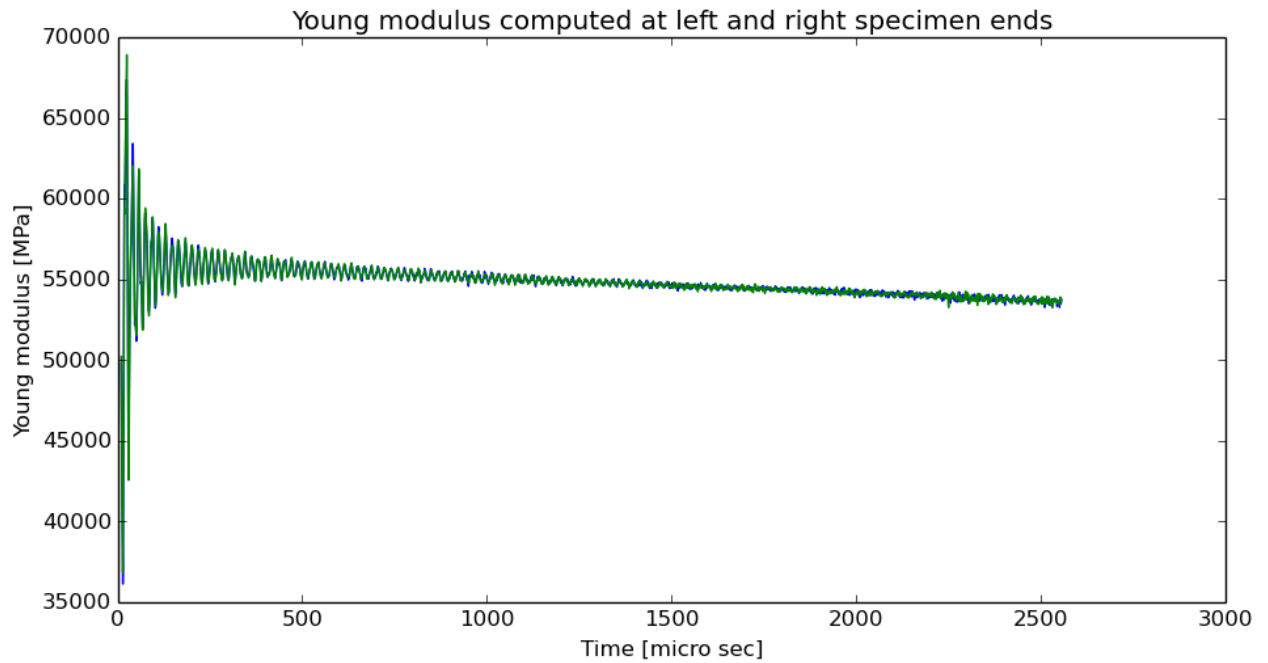
(dynamique explicite). De plus, la baisse du module de Young s'explique par le fait que, quand la déformation augmente, les forces microscopiques diminuent progressivement et ne sont plus linéaires. En effet, comme expliqué plus haut (voir 3.2.1.5), pour des déformations très faibles, la force d'interaction entre éléments est élastique linéaire.

Le module de Young macroscopique obtenu dans le cas 2 (figure 3.7a), correspond au module d'Young de l'alliage d'aluminium 2024-T351 dont les caractéristiques sont représentées dans la table 3.3.

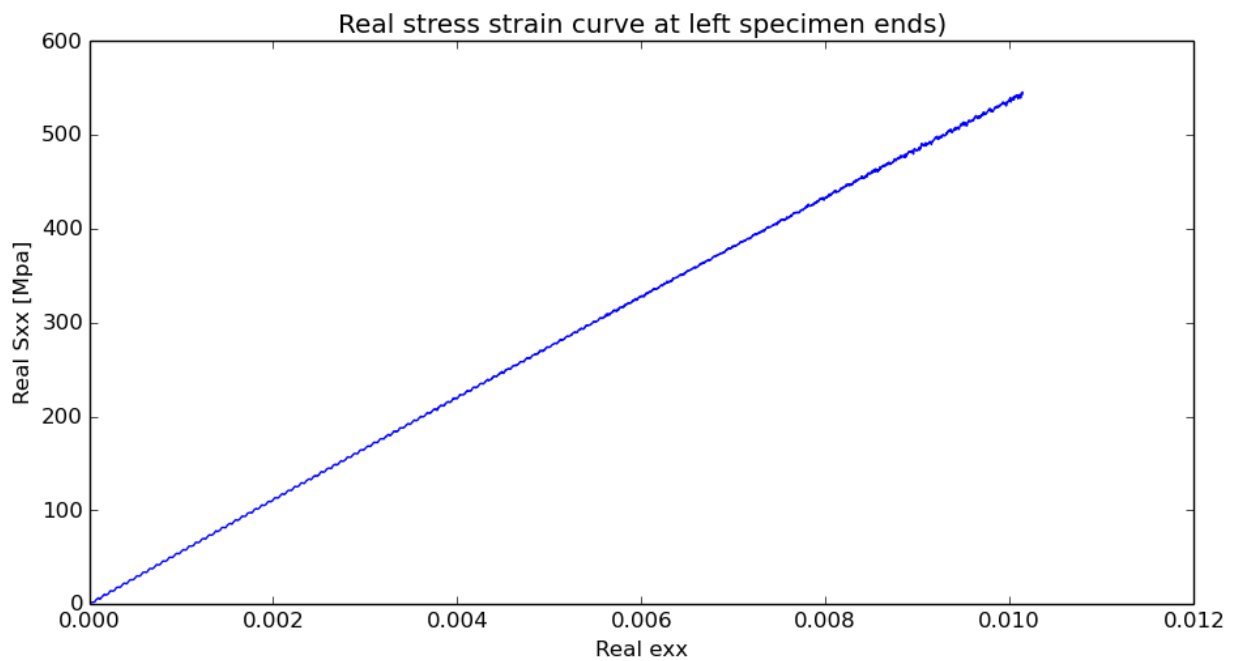
Table 3.3: Caractéristiques mécaniques de l'alliage d'aluminium 2024-T351

Propriété	Valeur	Unité
E	73	GPa
$\nu$	0.34	[-]
$\sigma_y$	290	MPa
$\sigma_{rupt}$	441	MPa
$\epsilon_{rupt}$	4%-19%	[-]

En gardant le couple de paramètres défini dans le cas 2 (voir table 3.1), la courbe contrainte-déformation obtenue si l'éprouvette est sollicitée avec une déformation plus importante est présentée sur la figure 3.8. La rupture ou "pseudo rupture" du matériau est représentée sur la figure 3.10. La courbe contrainte-déformation obtenue (figure 3.9) dans le cas d'un chargement cyclique montre que le comportement macroscopique émergent est plutôt un comportement élastique non linéaire. Cela est étonnant par rapport à l'hypothèse selon laquelle de la plasticité émergerait à l'échelle macroscopique du réarrangement à l'échelle microscopique des éléments discrets. La non émergence de cette irréversibilité au niveau macroscopique peut provenir du fait que le réarrangement des éléments discrets n'est significatif que pour une certaine échelle et dépendrait par conséquent de la taille des éléments discrets. Une autre hypothèse est le fait que la structure cristallographique du matériau n'est pas prise en compte, comme c'est le cas pour des simulations par dynamique modéculaire, dans la représentation du domaine avec la méthode des éléments discrets.



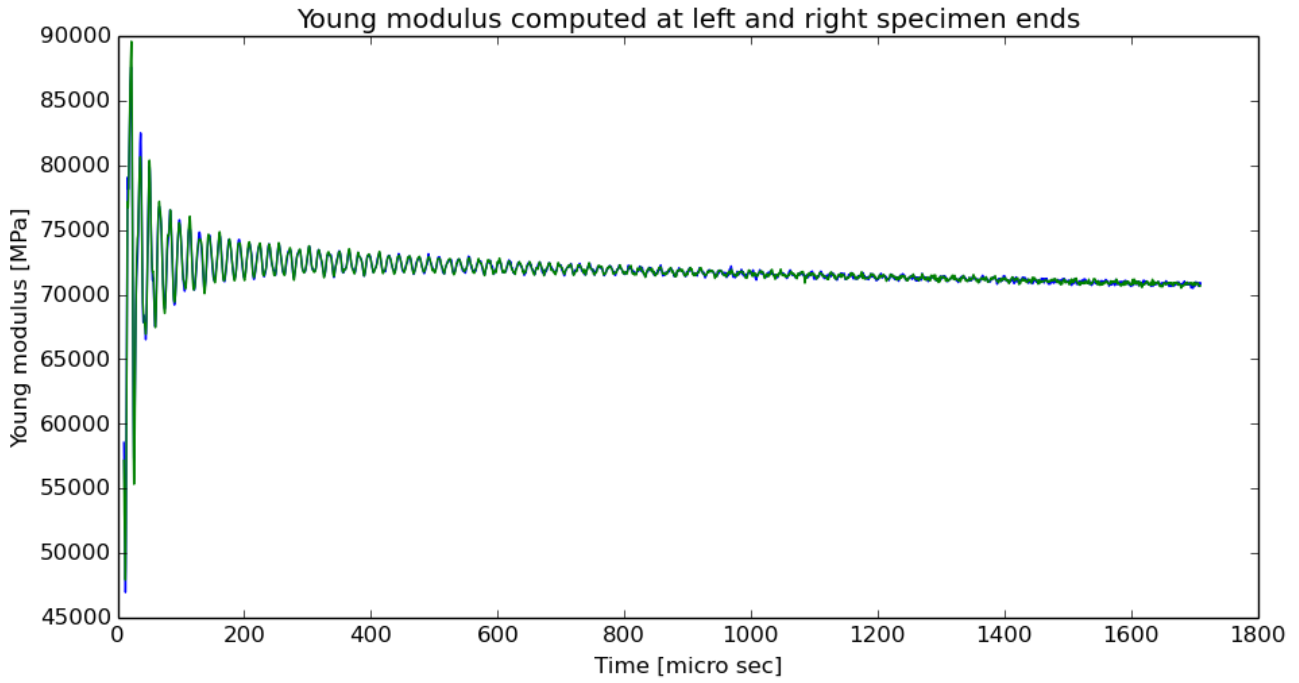
(a) Module de Young



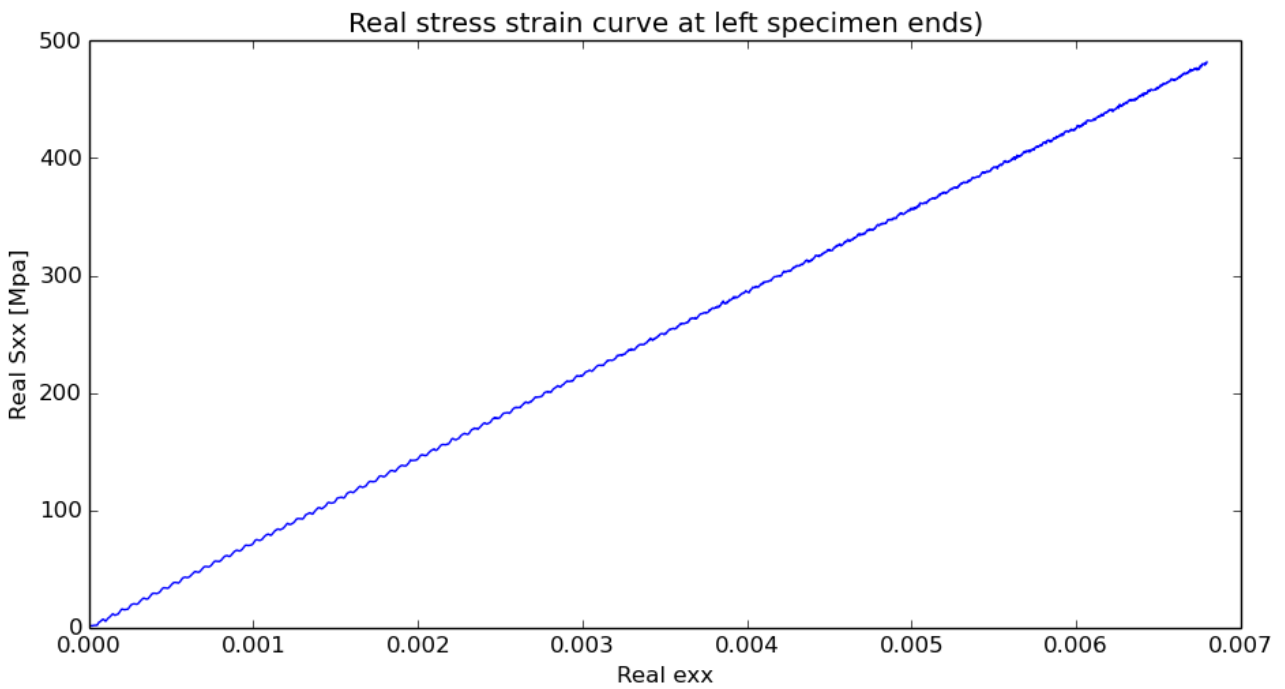
(b) Courbe Contrainte-Déformation

Figure 3.6: Cas avec  $(\epsilon, n, \alpha) = (100, 4, 3)$





(a) Module de Young



(b) Courbe Contrainte-Déformation

Figure 3.7: Cas avec  $(\epsilon, n, \alpha) = (130, 4, 3)$

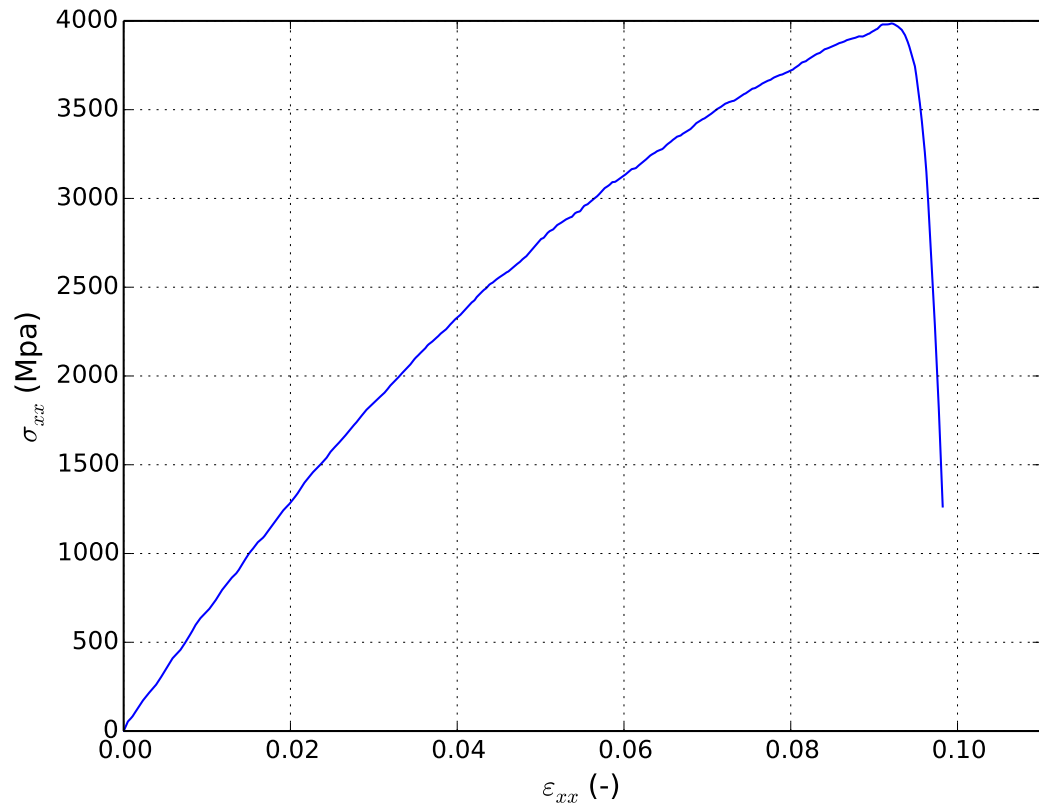


Figure 3.8: Courbe contrainte-déformation

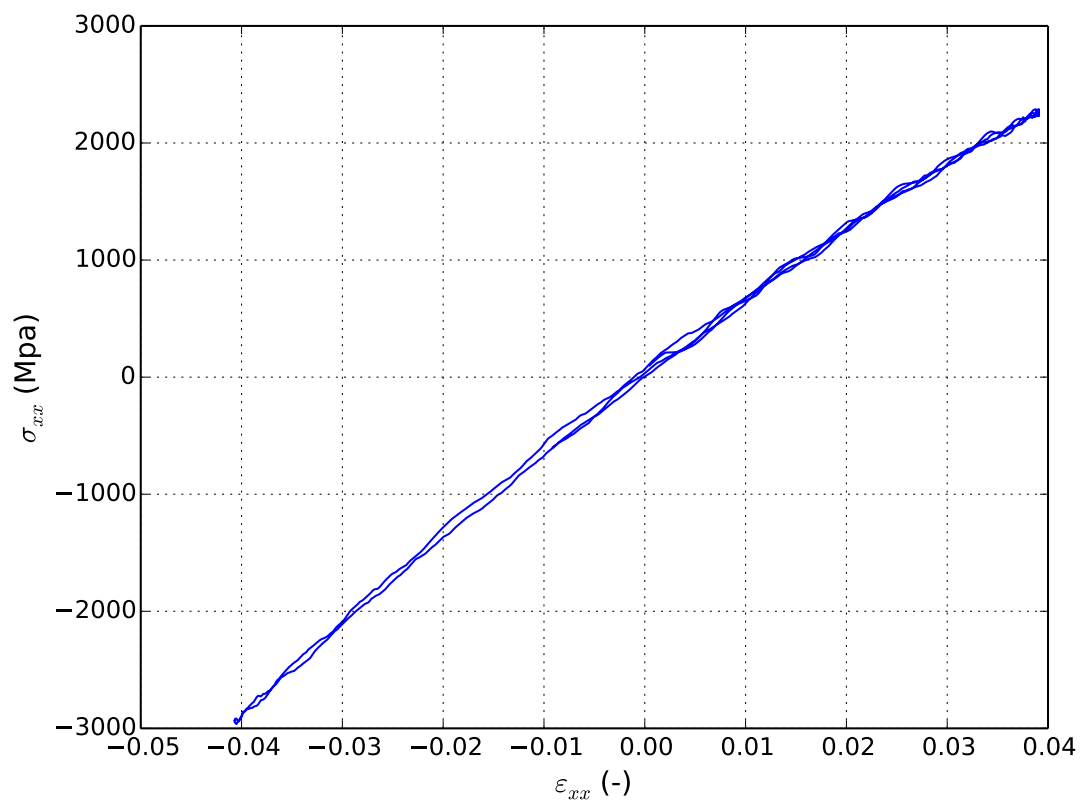


Figure 3.9: Courbe contrainte-Déformation: chargement cyclique

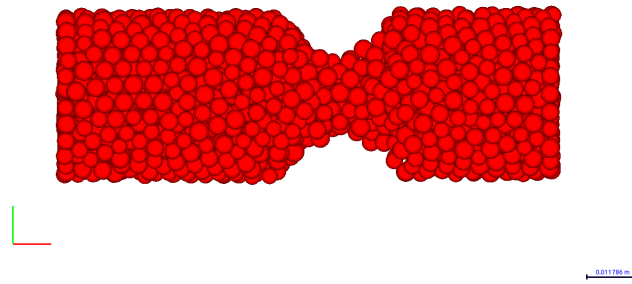


Figure 3.10: Rupture du matériau

### 3.2.2.2 Étude paramétrique- Influence des paramètres du potentiel

Dans cette section, l'influence des paramètres définissant la force d'interaction microscopique sur le comportement élastique macroscopique sera investiguée. Les paramètres investigués sont  $\epsilon$ ,  $n$  et  $t$  ( $t$  étant le rapport  $m/n$ ). Des essais de traction ont été menés en faisant une étude paramétrique basée sur ces paramètres microscopiques.

#### Influence sur le module de Young : effet du paramètre $\epsilon$

Les paramètres  $n$  et  $t$  sont fixés, et des essais numériques de traction sont réalisés avec différentes valeurs de  $\epsilon$ .

Table 3.4: Valeurs des paramètres

$\epsilon$	$n = 8$	$t = 2$
1	-	-
5	-	-
10	-	-
20	-	-
40	-	-
60	-	-
80	-	-
500	-	-

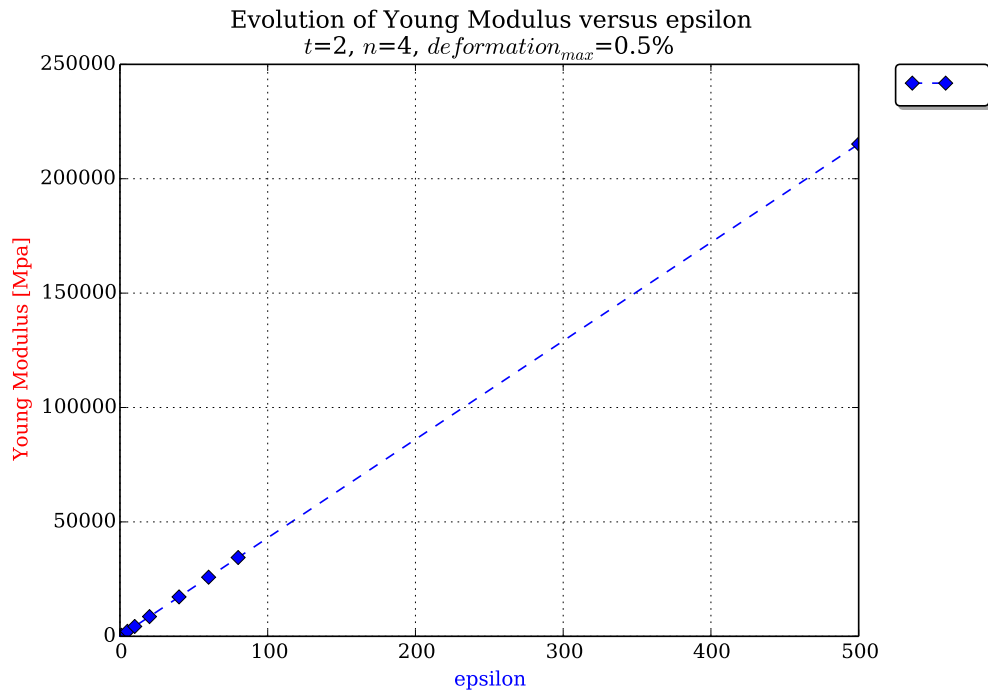
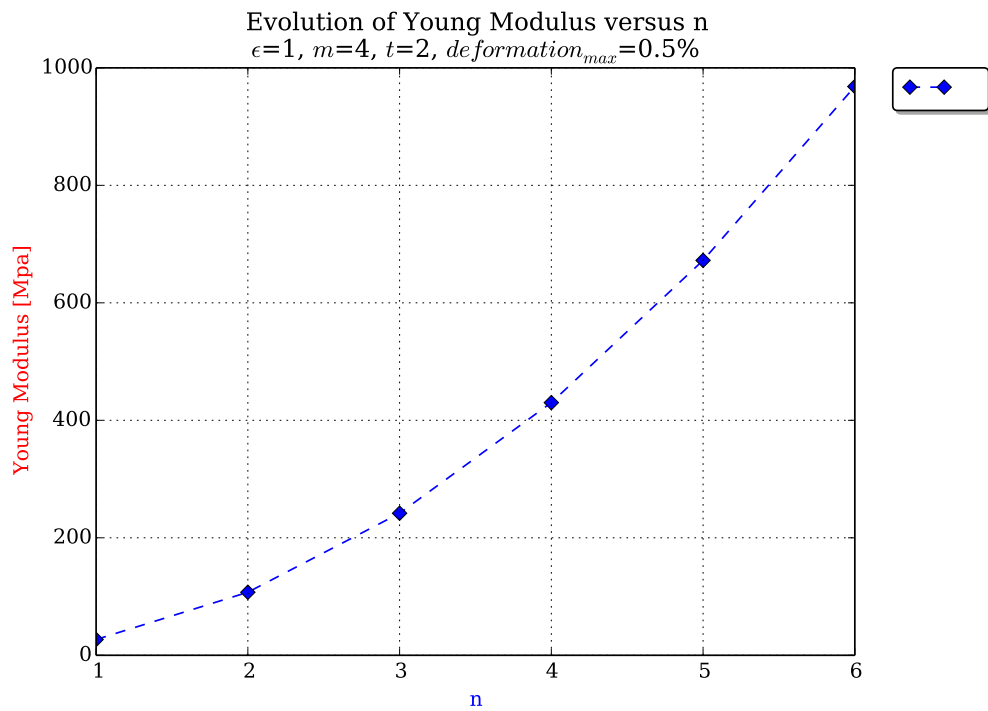
Les résultats obtenus (figure 3.11) montrent que le module de Young évolue linéairement en fonction du paramètre  $\epsilon$ .

#### Influence sur le module de Young : effet du paramètre $n$

Des essais numériques de traction sont réalisés avec différentes valeurs de  $n$ , les paramètres  $\epsilon$  et  $t$  étant fixés.

Table 3.5: Valeurs des paramètres

$n$	1	2	3	4	5	6
$\epsilon = 1$	-	-	-	-	-	-
$t = 2$	-	-	-	-	-	-

Figure 3.11: Évolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre  $\epsilon$ Figure 3.12: Evolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre  $n$

La résultats obtenus (figure 3.12) montrent que le module de Young évolue quadratiquement en fonction du paramètre  $n$ .

#### Influence sur le module de Young: effet du paramètre $t$

Des essais numériques de traction sont réalisés avec différentes valeurs de  $t$ , les paramètres  $\epsilon$  et  $n$  étant fixés.

Table 3.6: Valeurs des paramètres

$t$	2	3	4
$\epsilon$	1	1	1
$n$	4	4	4

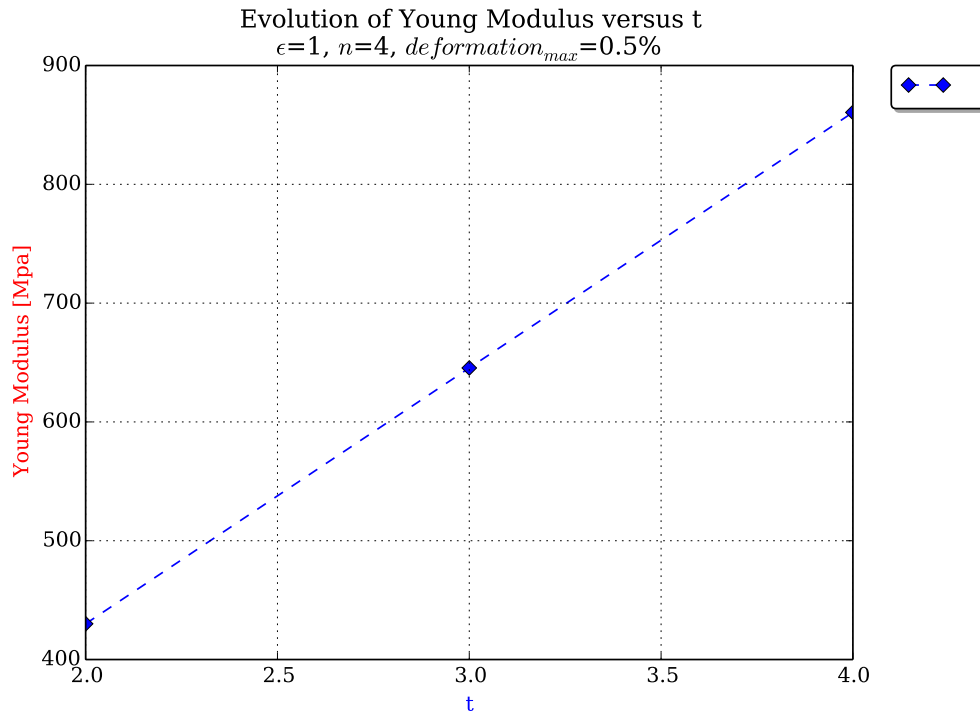


Figure 3.13: Évolution du module de Young macroscopique en fonction du paramètre  $t$

La résultats obtenus (figure 3.13) montrent que le module de Young évolue linéairement en fonction du paramètre  $t$ .

#### Influence sur le module de Young: interprétation des résultats obtenus

Les résultats obtenus montrent que dans le cas élastique, les paramètres microscopiques ( $\epsilon$ ,  $m$ ,  $n$ ) et le module de Young macroscopique sont reliés par une loi bien déterminée en fonction de chaque paramètre. Nous avons déjà vu que dans le cas élastique, et lorsque les déplacements sont faibles, la raideur microscopique peut être considérée comme constante et est égale à  $K_{el} = \frac{\epsilon m n}{\delta_{eq}^2}$  (voir paragraphe 3.2.1.5).

Ainsi, dans le cas d'un jeu de paramètre  $\epsilon, n, t$ , pour une même interaction et pour deux couples différents de paramètres microscopiques  $(\epsilon_1, t_1, n_1)$  et  $(\epsilon_2, t_2, n_2)$ , la relation suivante peut être déduite:

$$\frac{K_1^{\text{micro}}}{K_2^{\text{micro}}} = \frac{\epsilon_1 t_1 n_1^2}{\epsilon_2 t_2 n_2^2} \quad (3.11)$$

Par conséquent, si de plus la raideur élastique est supposée linéairement dépendante du module de Young ( $E = KL/S$  dans le cas d'une poutre de longueur  $L$  et de section  $S$ ), la relation 3.11 montre que le module de Young microscopique dépend linéairement du paramètre  $\epsilon$ , linéairement du paramètre  $t$  et quadratiquement du paramètre  $n$ . Notons par ailleurs que dans le cas d'un jeu de paramètres  $(\epsilon, n, m)$ , la relation 3.11 devient:

$$\frac{K_1^{\text{micro}}}{K_2^{\text{micro}}} = \frac{\epsilon_1 m_1 n_1}{\epsilon_2 m_2 n_2}$$

d'où une évolution linéaire du module de Young pour tous les paramètres (linéaire pour  $\epsilon$ , linéaire pour  $m$  mais aussi linéaire pour  $n$ ).

En conclusion, cette évolution microscopique est aussi retrouvée dans le comportement macroscopique émergent, ce qui explique les résultats obtenus.

#### **Influence sur le coefficient de Poisson**

Lors d'essais de traction numérique, le coefficient de Poisson macroscopique est déterminé et l'influence des paramètres du potentiel ( $\epsilon, m, n$ ) sur ce coefficient macroscopique est étudiée. Les résultats présentés sur la figure 3.14, montrent que les paramètres du potentiel n'influencent pas sur le coefficient de Poisson. En effet, quels que soient les paramètres utilisés, le coefficient de Poisson reste pratiquement constant (varie entre 0.2303 et 0.231).

Cela s'explique par le fait qu'à l'échelle des éléments discrets, les forces d'interactions qui dérivent de potentiels sont axiales et ne définissent que des efforts en traction ou compression.

En conclusion, les paramètres  $\epsilon, m$  ou  $n$  n'ont pas d'influence directe sur le coefficient de Poisson macroscopique. Pour mieux prendre en compte les effets d'élasticité transversaux, et ne plus dépendre de la structure, des efforts de torsion et de flexion à l'échelle des éléments discrets devraient aussi être pris en compte. Nous avons choisi, pour le reste de l'étude, de poursuivre tout de même avec la formulation par potentiel ne générant que des forces axiales. Cela reste une première approche et le modèle pourra être enrichi par la suite.

#### **Influence sur le module de Young: effet du nombre d'éléments discrets**

Un point important nécessaire pour valider la formulation utilisée est la dépendance au nombre d'éléments discrets. Les paramètres microscopiques définis jusqu'ici ne prenaient pas en compte la variation du nombre ou de la taille des particules. En conséquence, pour un domaine ayant une taille fixe, lorsque le nombre de particules augmente, les propriétés macroscopiques obtenues ne convergent pas. C'est ce qui est montré sur la figure 3.15 où l'influence du nombre d'éléments discrets sur le module de Young macroscopique est illustrée. Pour obtenir ces résultats, des essais de traction ont été effectués en variant le nombre de particules sur un domaine discret ayant une taille fixe. Les valeurs des paramètres utilisés sont présentées dans le tableau 3.7.

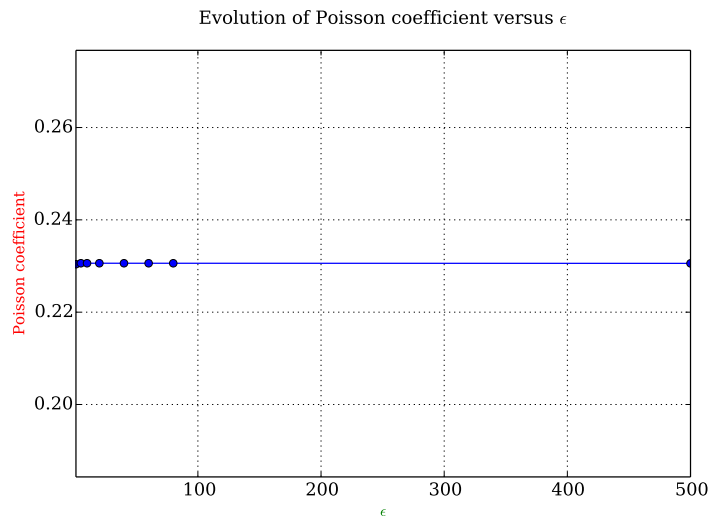
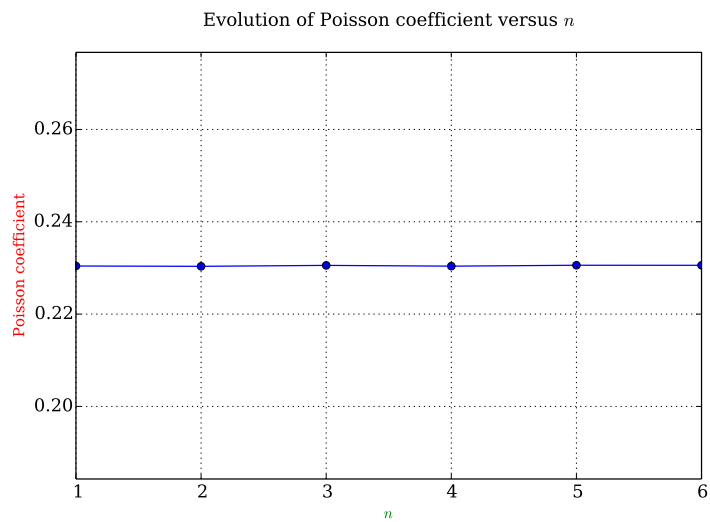
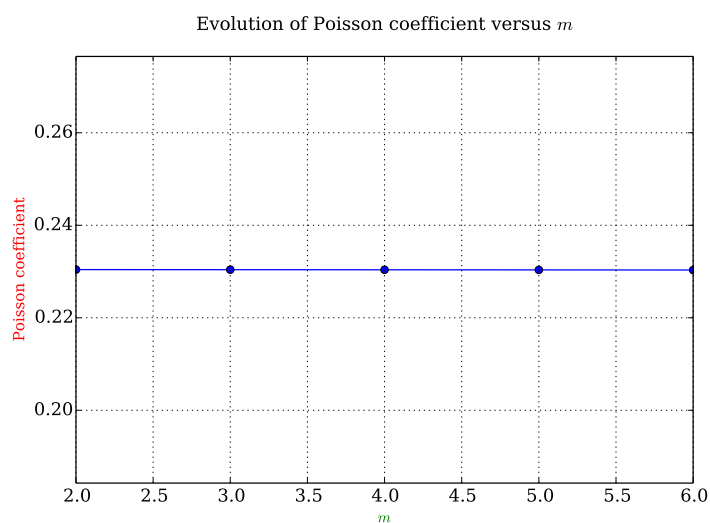
(a) Effet du paramètre  $\epsilon$ (b) Effet du paramètre  $n$ (c) Effet du paramètre  $m$ 

Figure 3.14: Effet des paramètres du potentiel sur le coefficient de Poisson macroscopique

Table 3.7: Valeurs des paramètres

$\epsilon$	$n$	$t$
1	4	2

Table 3.8: Nombres d'éléments discrets

nombre d'éléments	500	1000	2000	10000
-------------------	-----	------	------	-------

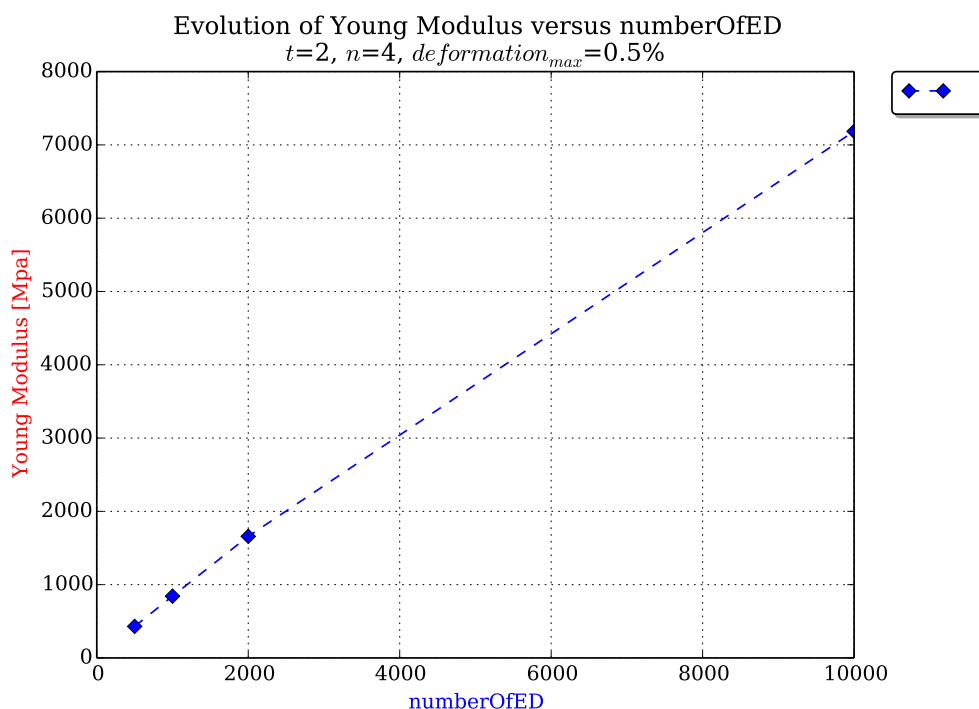


Figure 3.15: Effet du nombre de particules sur le module de Young macroscopique

La non-convergence des propriétés macroscopiques en fonction du nombre de particules nous a conduit à proposer une nouvelle expression des paramètres microscopiques afin d'assurer l'indépendance des propriétés macroscopiques au nombre des particules.

### 3.2.2.3 Reformulation des paramètres microscopiques- Nouvelle étude paramétrique

Afin de prendre en compte le nombre des particules, les paramètres caractérisant l'interaction entre 2 éléments doivent être redéfinis. Nous avons choisi pour cela de redéfinir le paramètre  $\epsilon$ , paramètre physique caractérisant l'énergie minimum d'interaction, les autres paramètres influençant surtout la forme du potentiel. Le paramètre  $\epsilon$  est calculé pour chaque interaction entre 2 particules  $i$  et  $j$ , et est défini comme suit:

$$\epsilon = \frac{E_{\text{micro}} \delta_{\text{eq}} S^*}{mn} \quad (3.12)$$



où  $S^*$  est défini comme  $S^* = \pi \left( \frac{R_i + R_j}{2} \right)^2$  et par conséquent prend en compte la taille des particules.

avec	$E_{\text{micro}}$	un paramètre pouvant être assimilé au module de Young microscopique
	$S^*$	la section équivalente de l'interaction
	$\delta_{\text{eq}}$	distance d'équilibre entre deux particules
	$m$	exposant représentant la partie répulsive de la force
	$n$	exposant représentant la partie attractive de la force
	$R_i$	le rayon de l'élément discret $i$
	$R_j$	le rayon de l'élément discret $j$

Ainsi, les nouveaux paramètres définissant l'interaction par potentiel sont  $E_{\text{micro}}$ ,  $m$  et  $n$

#### Effet du nombre d'éléments discrets (effet du "maillage")

Les nouveaux paramètres microscopiques prennent en compte la variation de la taille des particules. Afin de vérifier que cela se traduit à l'échelle macroscopique, des essais de traction ont été effectués en variant le nombre de particules sur un domaine discret ayant une taille fixe. Les valeurs des paramètres utilisés sont présentées dans le tableau 3.9. Les résultats obtenus (figure 3.16) montrent que le module de Young macroscopique ne dépend pratiquement plus du nombre d'éléments à partir d'un certain seuil. En conséquence, pour un domaine ayant une taille fixe, lorsque le nombre de particules augmente, les propriétés macroscopiques obtenues convergent, et le domaine peut être supposé indépendant du nombre d'éléments discrets à partir d'une certaine valeur, typiquement 5000 dans l'étude présentée.

Table 3.9: Valeurs des paramètres

$E_{\text{micro}}$	$n$	$t$
30.e9	4	2

Table 3.10: Nombre d'éléments discrets

nombre d'éléments	500	1000	2000	5000	10000	20000

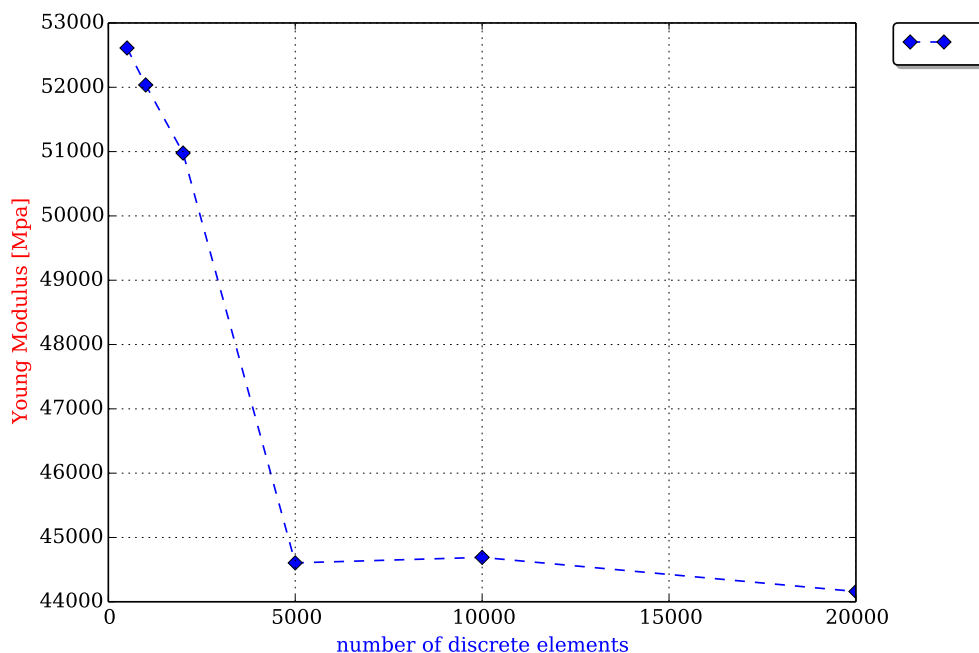


Figure 3.16: Effet du nombre de particules sur le module de Young macroscopique avec la nouvelle formulation

### Justifications

Soit  $\Phi$ , l'énergie entre 2 particules, et  $V$ , le volume de matière équivalent représenté entre les 2 particules. Supposons  $V = \delta S^*$ , où  $S^*$  représente la section équivalente, et  $\delta$  la distance entre les particules. La densité d'énergie  $\frac{d\Phi}{dV}$  s'exprime comme suit:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dV} &= \frac{d\Phi}{d\delta} \frac{d\delta}{dV} \\ &= -F(\delta) \frac{1}{S^*} \\ &= -\frac{m n \epsilon}{(m - n) \delta_{eq} S^*} \left[ \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{m+1} - \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

Soit 2 interactions différentes devant représenter le comportement d'un même matériau. L'une entre 2 éléments discrets  $i$  et  $j$  ayant comme rayons  $R_i$  et  $R_j$ , et l'autre entre 2 éléments discrets  $i'$  et  $j'$  ayant des rayons  $R_{i'}$  et  $R_{j'}$ , différents de ceux de la première. Si le matériau représenté est le même, la densité d'énergie ne doit pas être influencée par le changement d'échelle et doit être équivalente pour les 2 interactions considérées. Or, en définissant le paramètre  $\epsilon$  tel que  $\epsilon = \frac{E_{micro} \delta_{eq} S^*}{m n}$ , l'équation 3.13 devient:

$$\frac{d\Phi}{dV} = -\frac{E_{micro}}{m - n} \left[ \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{m+1} - \left( \frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{n+1} \right] \quad (3.14)$$

Ainsi, avec la nouvelle expression de  $\epsilon$  (voir equation 3.12), et pour un même niveau de déformation, la densité d'énergie est constante et ne dépend que de  $E_{micro}$  quelque

soit la taille des particules considérée. En effet, les paramètres  $m$ ,  $n$  et le rapport  $\frac{\delta_{eq}}{\delta}$  sont sans dimension. Ceci peut expliquer pourquoi la nouvelle expression de  $\epsilon$  permet de tendre vers des domaines indépendants du nombre d'éléments discrets au fur et à mesure que ce dernier augmente.

### 3.3 CONSTRUCTION DE LA LOI BASÉE SUR LES POTENTIELS

#### 3.3.1 PRÉSENTATION DU MODÈLE- LOI DE COMPORTEMENT À SEUIL

Afin de prendre en compte un comportement différent entre 2 éléments discrets en fonction d'une force d'interaction seuil ou d'une distance seuil, les forces conservatives peuvent dériver de deux types de potentiels différents. Cela permet notamment d'avoir un changement de pente plus pilotable. Ainsi, deux forces  $F^I$  et  $F^{II}$  peuvent être utilisées:

$$F_{ij} \begin{cases} F_{ij}^I(\delta) = F_{\epsilon_1, m_1, n_1}(\delta) & , \text{ si } \xi = \frac{|\delta - \delta_{eq}|}{\delta_{eq}} \leq \xi_s \\ F_{ij}^{II}(\delta) = F_{\epsilon_2, m_2, n_2}(\delta - \delta_s + \delta_{eq}) + F^I(\delta_s) & , \text{ si } \xi = \frac{|\delta - \delta_{eq}|}{\delta_{eq}} > \xi_s \end{cases} \quad (3.15)$$

où  $\xi_s$  représente la déformation seuil à partir de laquelle s'effectue le changement de la force d'interaction et la distance seuil  $\delta_s$   $\begin{cases} (1 + \xi_s) \delta_{eq} & , \text{ si } \delta \geq \delta_{eq} \\ (1 - \xi_s) \delta_{eq} & , \text{ si } \delta < \delta_{eq} \end{cases}$

Il est à noter que pour la forme de potentiel choisi, il existe une partie linéaire, notamment lorsque la distance entre 2 particules tend vers la distance d'équilibre. De ce fait, jusqu'à certaines valeurs de  $\xi$ , la force  $F^I$  est linéairement dépendante (quasiment) de la distance. Ainsi, avec deux lois qui sont basées sur la même formulation, un comportement linéaire pour la première et non linéaire pour la seconde peut être obtenu.

#### 3.3.2 ÉTUDE DU COMPORTEMENT MACROSCOPIQUE ÉMERGENT

Dans cette section, le comportement macroscopique émergent obtenu en utilisant le modèle à seuil sera étudié.

##### 3.3.2.1 Comportement macroscopique émergent

Afin d'identifier les comportements macroscopiques obtenus, des simulations d'essais de traction uniaxiale ont été effectuées numériquement. Les résultats montrent que la loi de comportement à seuil permet de représenter un comportement macroscopique émergent élastique puis plastique (voir figure 3.17). Le comportement macroscopique obtenu avec une éprouvette cylindrique avec 500 éléments discrets, de longueur 0.05cm et de rayon 0.02cm est illustré sur la figure 3.17. Pour ce cas de simulation, les paramètres ont été choisis pour obtenir un module de Young qui soit du même ordre de grandeur que les matériaux métalliques. Pour les mêmes raisons que celle évoquées précédemment (voir section 3.2.2.1), le couple choisi pour les paramètres  $(m_1, n_1)$  et  $(m_2, n_2)$  est (8,4), et le paramètre  $\alpha$  qui détermine la distance de coupure est choisi égale à 3 ( $\alpha=3$ ). Concernant la force  $F^{II}$ , les essais numériques étant en première approche qualitatifs, le paramètre  $\epsilon_2$  est choisi en fonction de  $\epsilon_1$  de manière à représenter un

écrouissage du même ordre de grandeur que les matériaux métalliques. Le paramètre  $\xi_s$  est choisi de manière à ce que la force  $F^I$  puisse être considérée linéaire et compte tenu du choix effectué pour les paramètres  $\epsilon_1, m_1$  et  $n_1$ . Par ailleurs, ce paramètre peut être adapté à chaque matériau et déterminé à partir d'essais expérimentaux.

Pour le cas de simulation présenté ici, les paramètres utilisés pour définir les interactions microscopiques entre les éléments discrets sont résumés dans le tableau 3.11.

Plusieurs observations peuvent être faites:

- sur les courbes de traction macroscopique obtenues (figure 3.17), le comportement émergent est linéaire puis non linéaire tout comme la loi d'interaction définie à l'échelle des éléments discrets (figure 3.18).
- se premier changement de la force  $F^I$  à la force  $F^{II}$  à l'échelle des éléments discrets intervient aux alentours d'une déformation et d'une contrainte macroscopique  $(\epsilon_{xx}, \sigma_{xx}) = (0.00109, 37.2 \text{ MPa})$  (figure 3.17). Or le comportement macroscopique est à cet instant toujours élastique. Ainsi, l'apparition ou l'initiation microscopique de la plasticité apparaît bien avant les effets macroscopiques.
- se début de la non-linéarité ou de la plasticité macroscopique s'effectue lorsqu'environ 50% des éléments discrets passent à une interaction plastique  $((\epsilon_{xx}, \sigma_{xx}) = (0.00479, 155.8 \text{ MPa}))$ , figure 3.17).
- par ailleurs, tous les éléments discrets passent d'une interaction  $F^I$  à une interaction  $F^{II}$  aux alentours de  $(\epsilon_{xx}, \sigma_{xx}) = (0.003123, 254.7 \text{ MPa})$ .
- la non-linéarité macroscopique émergente observée est donc due à la non-linéarité de la force  $F^{II}$  à l'échelle des éléments discrets mais aussi à l'augmentation du nombre d'éléments discrets passant d'une interaction par la force  $F^I$  à une interaction par la force  $F^{II}$

Il convient de mentionner que pour des essais quantitatifs, une calibration des forces  $F^I$  et  $F^{II}$  doit être effectuée par la suite.

Table 3.11: Valeurs des paramètres utilisés pour les essais de traction uniaxiale sans forces dissipatives

$\epsilon_1$	$m_1$	$n_1$	$\epsilon_2$	$m_2$	$n_2$	$\xi_s$	$\gamma$	$\alpha$
80	8	4	3	8	4	0.005	0	3

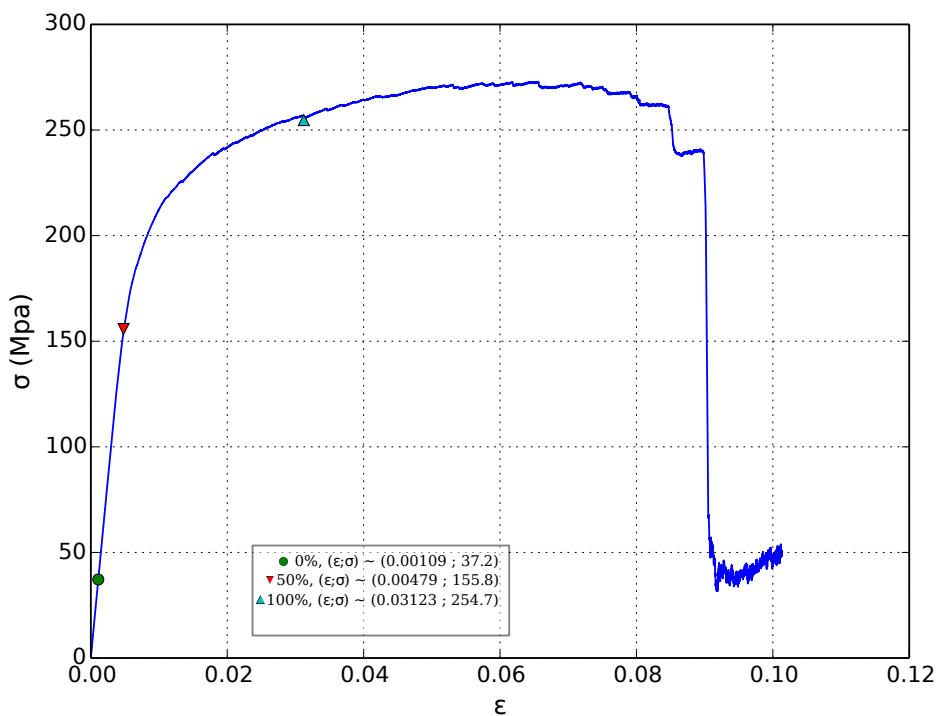


Figure 3.17: Échelle macroscopique: Comportement macroscopique émergent

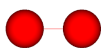
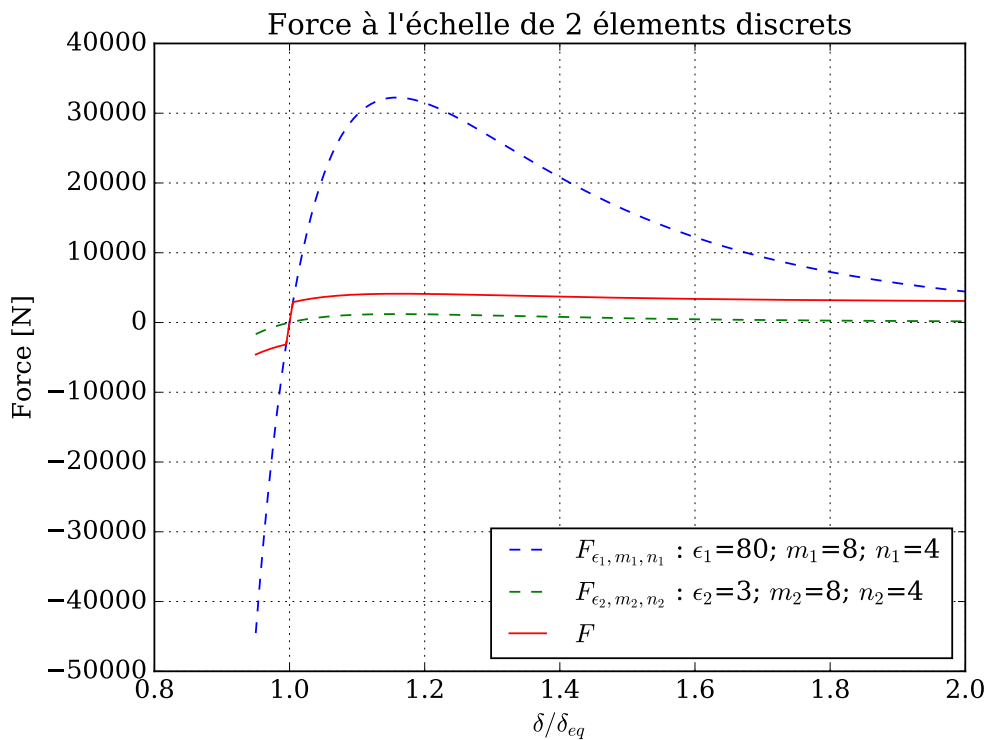


Figure 3.18: Échelle de deux éléments discrets: force à seuil

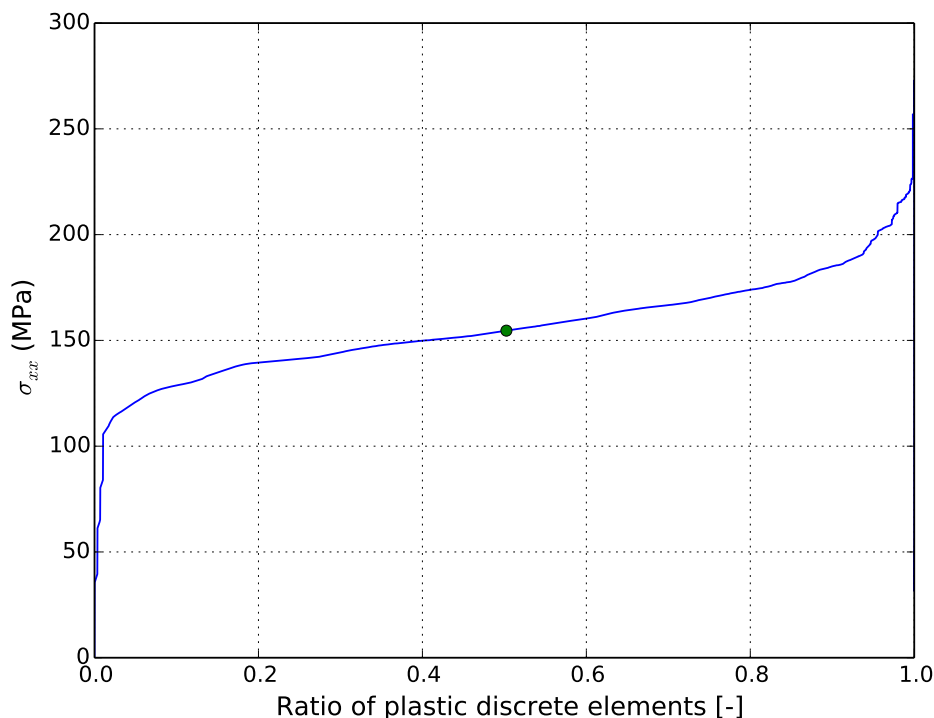


Figure 3.19: Évolution de la contrainte en fonction du ratio d'éléments discrets en interaction "plastique"  $F^{II}$

### 3.3.2.2 Effet de la viscosité

Afin de montrer l'effet des forces dissipatives et du coefficient de viscosité  $\gamma$ , les forces dissipatives sont introduites lors d'essais numériques de traction et l'éprouvette sollicitée à différentes vitesses de déformation ( $1 \text{ s}^{-1}$  et  $10 \text{ s}^{-1}$ ). Les valeurs des paramètres utilisés sont indiquées dans le tableau 3.12. L'effet de la viscosité sur la courbe de traction est illustré sur la figure 3.20. Sur cette figure, une augmentation de la contrainte avec la vitesse de sollicitation peut être remarquée. Cela montre que la prise en compte des forces dissipatives à l'échelle des éléments discrets, permet, qualitativement, de représenter l'effet visqueux d'un matériau sur le comportement mécanique macroscopique.

Table 3.12: Valeurs des paramètres utilisés pour les essais de traction uniaxiale avec forces dissipatives

$\epsilon_1$	$m_1$	$n_1$	$\epsilon_2$	$m_2$	$n_2$	$\xi_s$	$\gamma$	$\alpha$
80	8	4	3	8	4	0.005	1000	3

Par ailleurs, le coefficient de viscosité  $\gamma$  peut aussi s'exprimer en fonction d'un coefficient d'amortissement  $\theta$  (relation 3.16), et, dans ce cas, nous notons que l'effet de la viscosité reste relativement faible (figure 3.21) même pour des valeurs de gamma telles que le coefficient d'amortissement est proche de l'amortissement critique ( $\theta = 1$ ). Toutefois, une étude plus approfondie doit être effectuée pour mieux comprendre

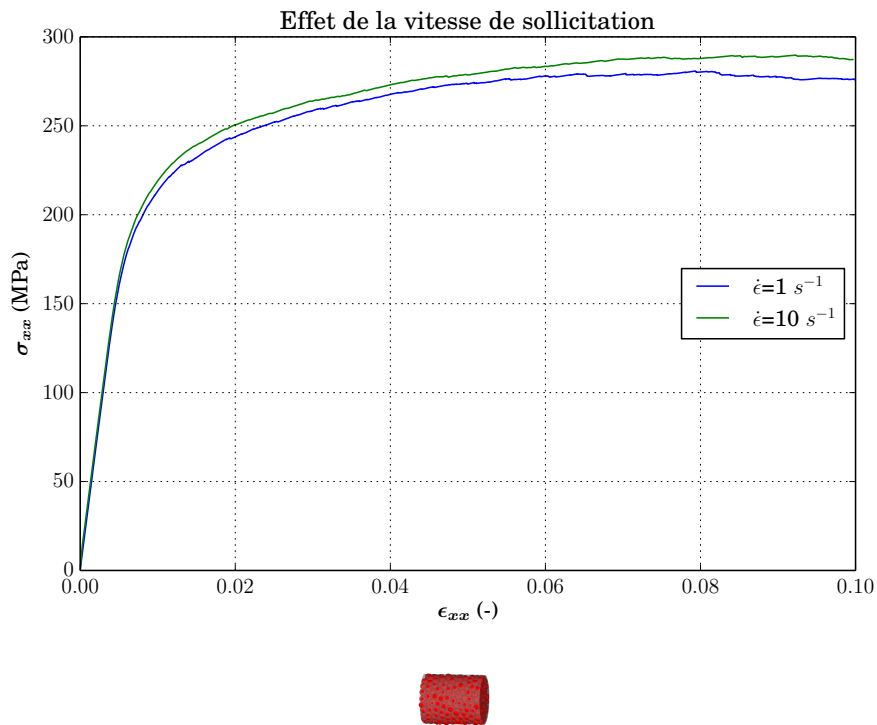


Figure 3.20: Echelle macroscopique: Comportement macroscopique émergent

l'effet de la viscosité microscopique et des forces dissipatives sur le comportement macroscopique.

$$\gamma = 2\theta\sqrt{K_{ij}M^*} \quad (3.16)$$

avec  $K_{ij}$  la raideur entre deux particules  $i$  et  $j$   
 $M^* = \frac{M_i M_j}{M_i + M_j}$  la masse réduite, calculée à partir des masses  $M_i$  et  $M_j$   
 des particules  $i$  et  $j$   
 $\theta$  le coefficient d'amortissement ( $\theta \in [0, 1]$ )

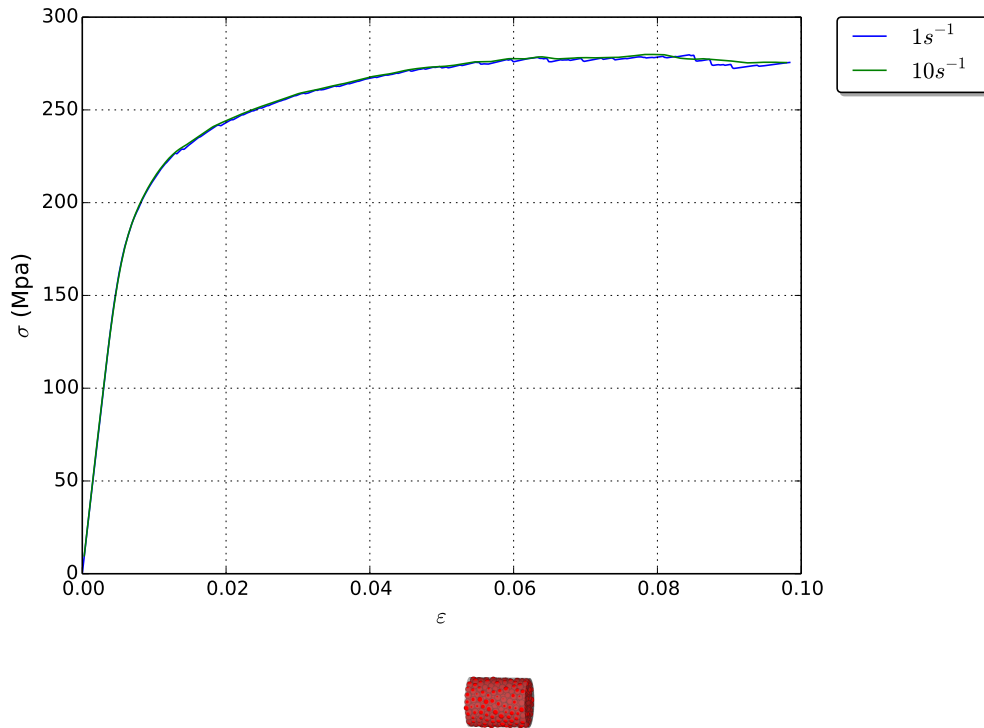


Figure 3.21: Influence de la vitesse de sollicitation sur le comportement macroscopique: coefficient d'amortissement proche de 1 ( $\theta \approx 1$ )

### 3.3.3 MÉTHODE DE CALIBRATION

#### 3.3.3.1 Identification du comportement macroscopique dans la zone plastique

Le comportement émergent est composé de deux parties: une partie linéaire, et une partie non linéaire. Afin de déterminer plus tard une méthode de calibration, la loi de comportement macroscopique dans la zone non linéaire doit être identifiée.

Lorsqu'un matériau métallique est soumis à un chargement hors de son domaine élastique, sa réponse devient non-linéaire. L'évolution de ses propriétés dans le domaine plastique est décrite par des lois d'écrouissages. Plusieurs lois d'écrouissage peuvent être distinguées:

- isotrope: la limite d'élasticité augmente lors d'essais de charge décharge et l'évolution de la surface de plasticité est supposée homothétique.
- cinématique: ce type de loi a été introduit pour représenter le comportement particulier de certains matériaux après un changement du sens de chargement. La surface de plasticité est supposée de taille constante, mais se déplace par translation dans l'espace des contraintes. Ce type d'écrouissage permet par exemple de représenter la diminution de la limite d'élasticité ou effet Baushinger, observé pour certains matériaux
- mixte: ce type de lois consiste à combiner des lois d'écrouissage isotrope et cinématique, permettant ainsi de définir lois plus générales

Afin d'identifier la loi d'écrouissage qui se rapproche le plus du comportement macroscopique obtenu, la courbe de traction macroscopique sera comparée à certaines lois d'écrouissage phénoménologiques. Concernant le modèle par éléments discrets, la loi de comportement à seuil introduite microscopiquement est une loi où le centre de la surface de charge ne se déplace pas. Pour cette raison, les lois d'écrouissage isotrope seront choisies pour l'identification aux courbes macroscopique de traction monotone.



Cependant, notons que les parties répulsives et attractives de la force étant différentes, les limites en traction et en compression ne sont pas forcément égales.

La courbe de traction macroscopique obtenue sera comparée à deux types de loi d'érouissage:

- une loi d'érouissage de type puissance (voir figure 3.22). La loi phénoménologique de Ludwik sera utilisée:

$$\sigma = \sigma_Y + K\varepsilon_p^n \quad (3.17)$$

où  $\sigma_Y$  est la limite d'élasticité initiale,  $\varepsilon_p$  la déformation plastique,  $K$  et  $n(< 1)$  sont des constantes à déterminer.

- une loi d'érouissage de type exponentielle (voir figure 3.23). La loi de Voce sera utilisée.

$$\frac{\sigma}{\sigma_s} = 1 - \exp(-b\varepsilon_p) \quad (3.18)$$

où  $\sigma_s$  et  $b$  sont des constantes à déterminer,  $\varepsilon_p$  représente la déformation plastique.

Pour identifier les paramètres des lois mentionnées ci-dessus dans la partie non-linéaire de la courbe de traction, la déformation élastique sera supposée faible devant la déformation plastique, si bien que la déformation totale est supposée égale à la déformation plastique.

La comparaison avec des lois d'érouissage de type puissance et de type exponentielle suggère que le comportement macroscopique émergent est plus proche d'une loi d'érouissage de type exponentielle. En effet, un comportement macroscopique émergent dans la zone plastique s'apparenterait à une loi d'érouissage de type puissance si dans un repère logarithmique et dans la zone plastique ( $-5 < \log(\varepsilon) < 0$  sur la figure 3.22), la contrainte était linéairement dépendante de la déformation. Or, la figure 3.22 montre que ce n'est pas le cas.

La figure 3.23 montre que dans la zone plastique, les courbes de traction s'identifient bien à une loi d'érouissage exponentielle lorsque la déformation et la contrainte restent éloignés de la zone de rupture.

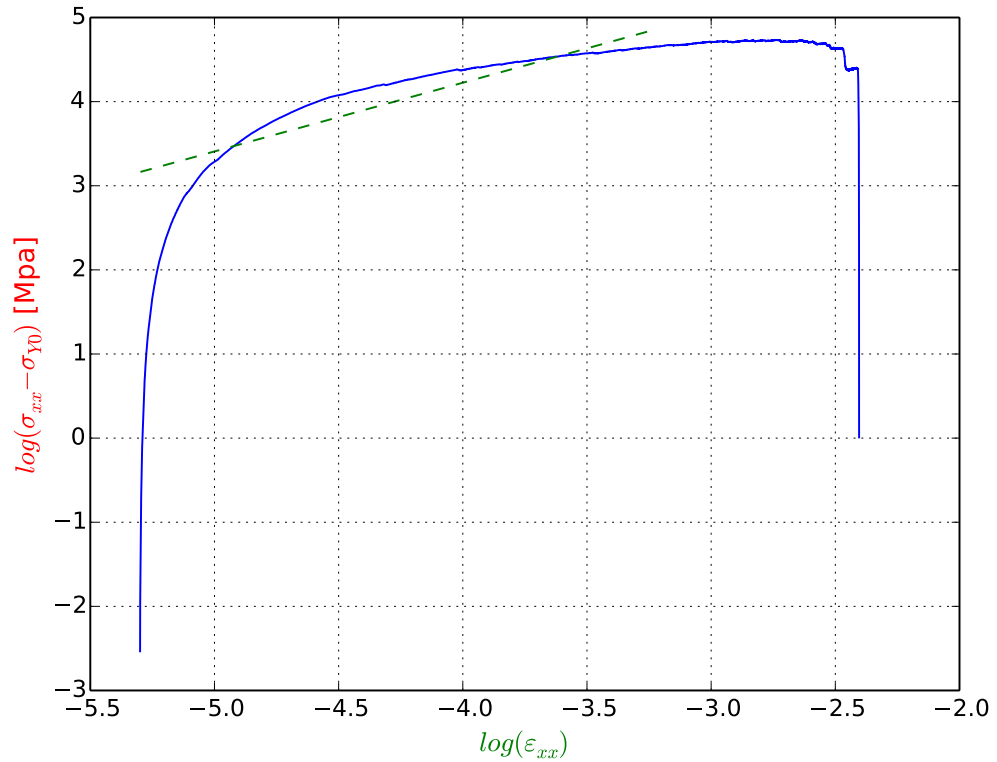


Figure 3.22: Comparaison à une loi d'écroutissage de type puissance (loi de Ludwik)

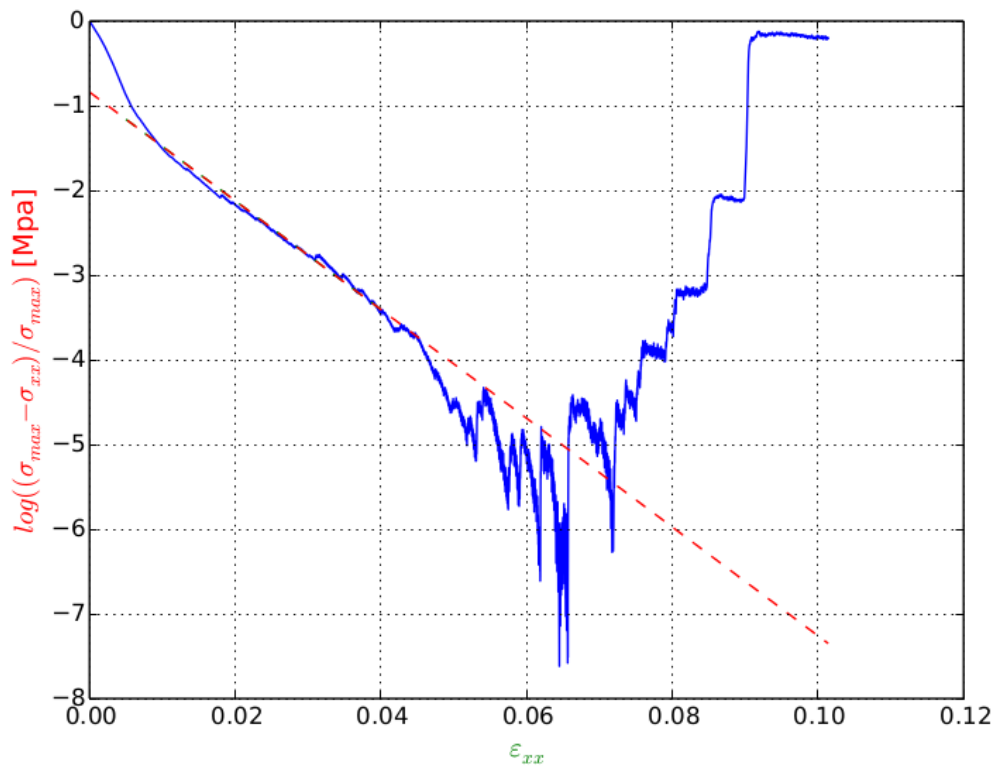


Figure 3.23: Comparaison à une loi d'écroutissage de type exponentielle (loi de Voce)

### 3.3.3.2 Étude paramétrique

Des essais de traction monotone sont menés afin d'étudier l'effet des paramètres microscopiques sur comportement émergent dans la partie non linéaire. Pour cela,

la force microscopique  $F^I$  de la loi de comportement à seuil est fixée et les forces dissipatives sont désactivées. Les paramètres microscopiques  $\epsilon_1$ ,  $m_1$ ,  $n_1$ ,  $\xi_s$ , et  $\alpha$  sont constants et les valeurs choisies sont résumées dans le tableau 3.13.

Table 3.13: Valeurs des paramètres

$\epsilon_1$	$m_1$	$n_1$	$\xi_s$	$\alpha$	$\gamma$
80	8	4	0.005	3	0

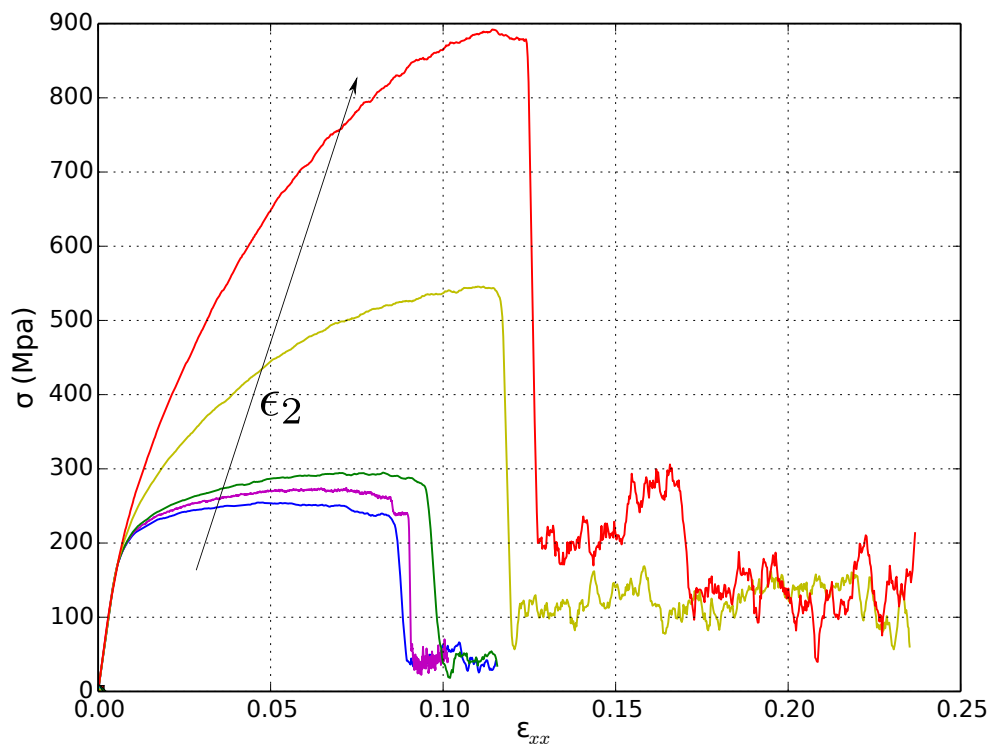
#### Effet du paramètre $\epsilon_2$

Une étude paramétrique est menée sur  $\epsilon_2$ , les paramètres  $m_2$  et  $n_2$  étant fixés. Les valeurs sont résumées dans le tableau 3.14.

Table 3.14: Valeurs des paramètres choisis pour étudier l'effet de  $\epsilon_2$ 

$\epsilon_2$	2	3	4	15	30
$m_2 = 8$	-	-	-	-	-
$n_2 = 4$	-	-	-	-	-

Les courbes de traction macroscopiques obtenues sont comparées sur la figure 3.24. En supposant le comportement macroscopique dans la zone plastique de type exponentiel suivant une loi de Voce, l'influence du paramètre  $\epsilon_2$  est illustré sur la figure 3.25. La figure 3.27 montre que le paramètre  $b$  de la loi de Voce décroît lorsque le paramètre  $\epsilon_2$  du potentiel augmente. De plus, la contrainte maximale  $\sigma_{\max}$  évolue linéairement en fonction du paramètre  $\epsilon_2$  (voir figure 3.26).

Figure 3.24: Effet de  $\epsilon_2$  sur les courbes macroscopiques de traction monotone

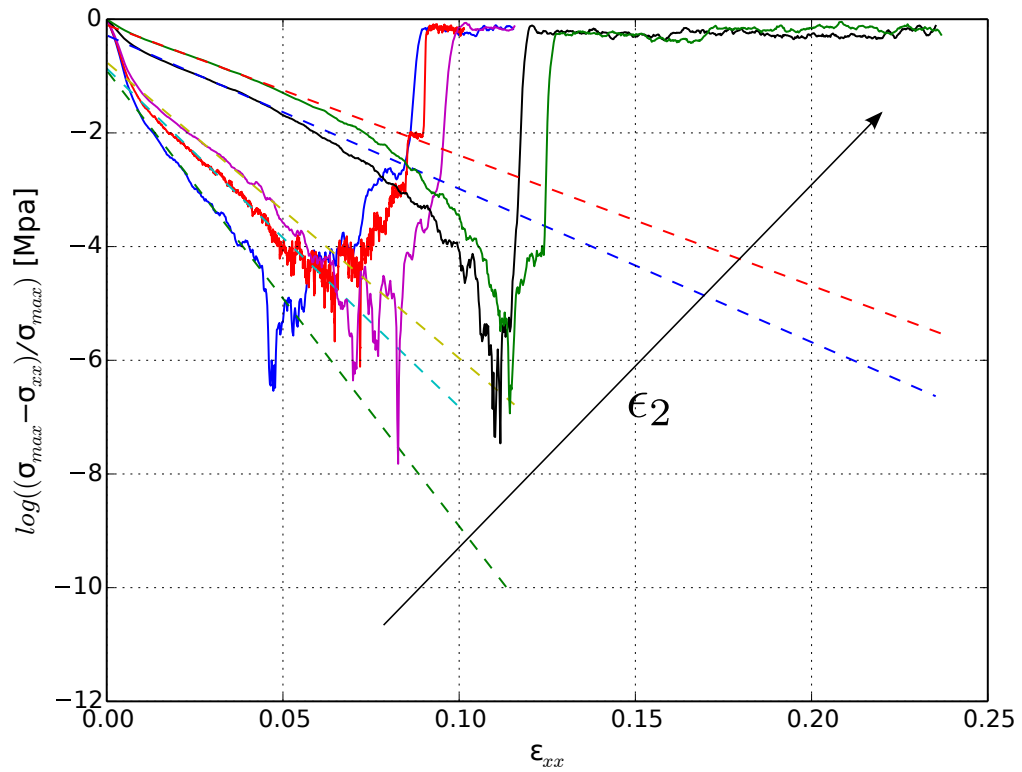


Figure 3.25: Effet de  $\epsilon_2$  : comparaison à une loi d'érouissage de type exponentielle

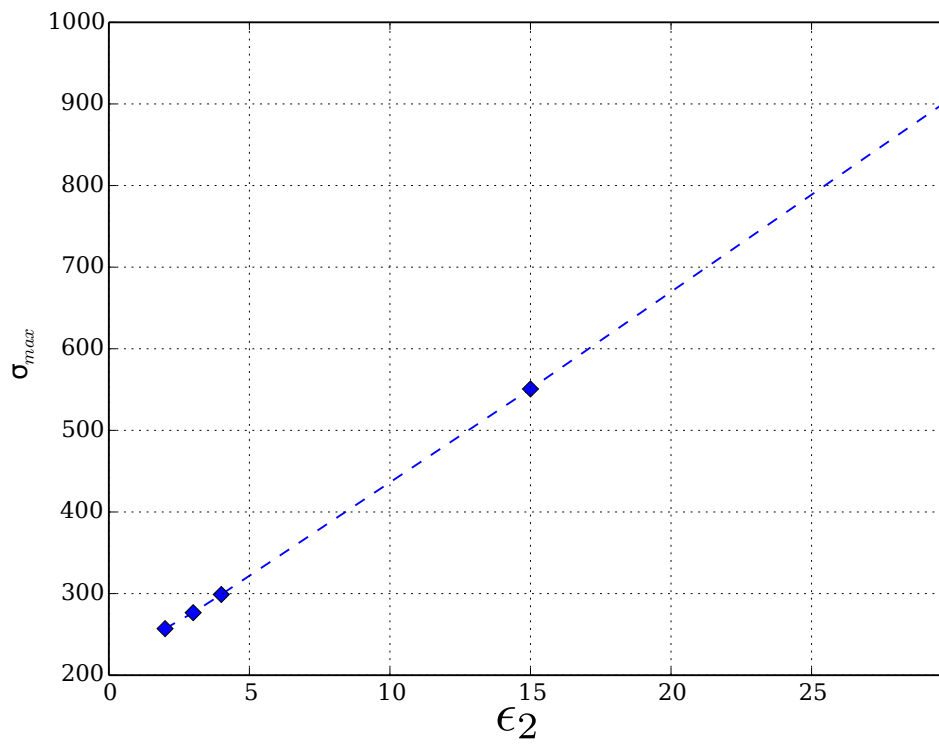


Figure 3.26: Effet de  $\epsilon_2$  sur la contrainte maximale  $\sigma_{max}$

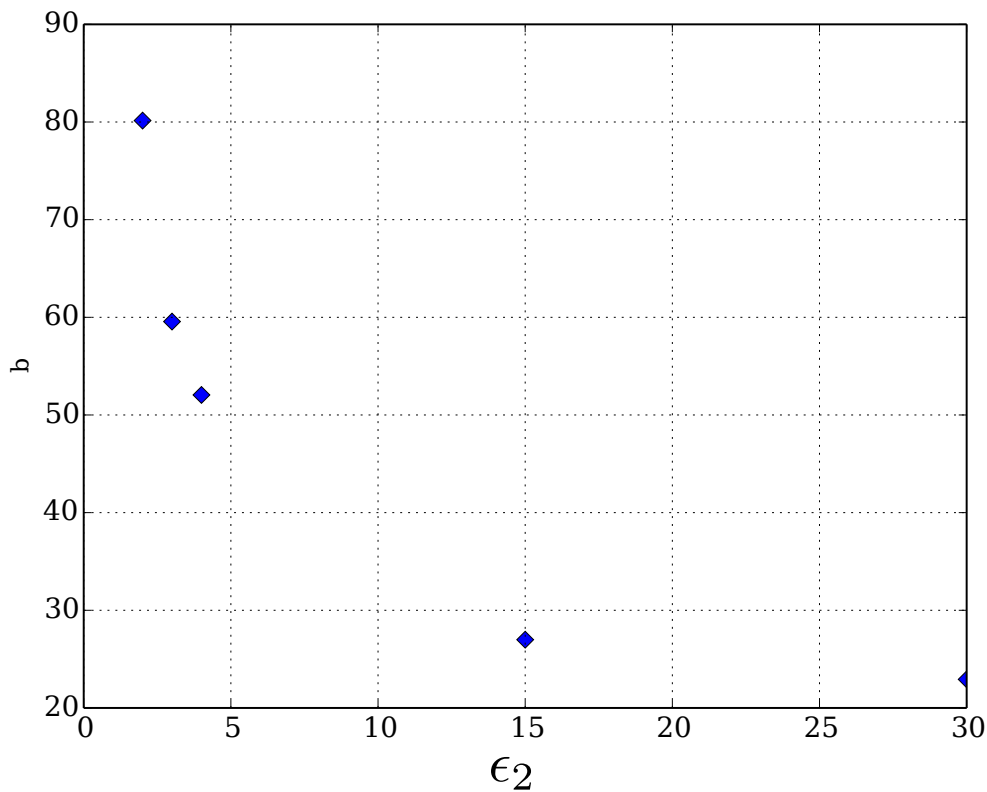


Figure 3.27: Effet de  $\epsilon_2$  : paramètre  $b$  de la loi exponentielle de Voce

### 3.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre, dans l'optique de pouvoir représenter le comportement d'un alliage d'aluminium lorsqu'il est soumis à des conditions de grandes déformations et vitesses de déformation, telles qu'elles peuvent être rencontrées dans le cas du FSW, un modèle mécanique par éléments discrets basé sur des potentiels d'interaction a été proposé.

L'utilisation du modèle basé sur des forces à seuil et présenté dans la section 3.3.1 rend possible la représentation d'un comportement macroscopique émergent présentant une partie linéaire et une partie non-linéaire.

Les corrélations décrites dans la section 3.2.2.2, entre le module de Young macroscopique et les paramètres du potentiel, permettent de pouvoir déterminer indépendamment du nombre d'éléments discrets, les paramètres  $\epsilon_1$ ,  $m_1$  et  $n_1$  appropriés pour représenter le module de Young d'un matériau connu.

Les travaux présentés dans la section 3.3.1 montrent par ailleurs qu'avant la zone de rupture, la loi de comportement émergente dans la partie non-linéaire se rapproche d'une loi d'écroutissement de type exponentielle de Voce. Les constantes ( $\sigma_s$  et  $b$ ) qui caractérisent cette loi dépendent des paramètres de la force d'interaction  $F^{II}$  et plus particulièrement du  $\epsilon_2$ . L'étude de sensibilité menée montre que la constante  $b$  décroît lorsque  $\epsilon_2$  augmente et que la contrainte maximale  $\sigma_{max}$  dépend linéairement du paramètre  $\epsilon_2$ . Ainsi, si la constante  $\sigma_s$  est supposée sensiblement égale à  $\sigma_{max}$ , une relation linéaire entre  $\sigma_s$  et  $\epsilon_2$  peut être déduite. Ainsi, en vue de reproduire une loi de comportement élastoplastique ayant un écroutissement de type exponentiel (Loi de Voce) donné, la connaissance de la constante  $\sigma_s$  peut permettre de déduire le paramètre associé  $\epsilon_2$  à introduire à l'échelle des éléments discrets. Néanmoins, le modèle présenté reste une première approche et des travaux supplémentaires sont nécessaires afin de

représenter n'importe quelle loi de comportement élastoplastique. En effet, le modèle proposé ne permet que de reproduire des comportements élastoplastique ayant une loi d'écroutissement exponentielle de Voce. Par ailleurs, la mise en place de l'irréversibilité est également nécessaire mais n'a pas été effectuée dans les travaux présentés. Pour ce faire, la mémoire des interactions doit être gérée numériquement de manière à pouvoir effectuer les déchargements élastiques et les passages à des écoulements plastiques.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

---

*Success is the sum of small efforts, repeated day in and day out*

– Robert Collier

L'objectif de ce chapitre est de présenter les conclusions des travaux effectués et les développements futurs qui peuvent être envisagés.

**Sommaire**

---

4.1	Synthèse . . . . .	<b>102</b>
4.2	Perspectives . . . . .	<b>103</b>
4.2.1	Modèle Mécanique . . . . .	103
4.2.2	Modèle Métallurgique . . . . .	104
4.2.3	Couplage thermo-mécano-métallurgique . . . . .	105

---

## 4.1 SYNTHÈSE

Les travaux présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans le cadre de modélisation du FSW ou des procédés de transformation de la matière dans lesquels la matière subit de grandes déformations et est dans un état pâteux.

Le premier chapitre nous a permis de présenter les motivations de ce travail de recherche. Nous y avons vu l'intérêt de procédés comme le FSW et la mise en place d'outils numériques adaptés pour leur optimisation. En effet, un procédé comme le FSW est très attrayant pour différents secteurs industriels car il offre la possibilité de souder certains alliages d'aluminium des séries 2XXX et 7XXX, réputés difficiles à souder pour d'autres procédés. Pour ces alliages d'aluminium, leurs propriétés sont liées à leur état métallurgique, notamment de précipitation. Les outils numériques peuvent permettre de mieux comprendre l'influence des paramètres du procédé sur les phénomènes qui interviennent lors du FSW, tout en tenant compte des changements microstructuraux importants. La méthode des éléments discrets présente de nombreux avantages (simplicité lagrangienne, gestion des aspects tribologiques) pour simuler des procédés où la matière subit de grandes déformations et vitesses de déformation tel que le FSW. De plus, sa description lagrangienne naturelle permet à chaque élément de transporter sa propre histoire et facilite la gestion des aspects multiphysiques (notamment métallurgique).

Toutefois, la mise en place d'une modélisation complète mécano-thermo-métallurgique, basée sur la méthode des éléments discrets, nécessite, compte tenu des travaux antérieurs déjà effectués sur la partie thermique, de mettre en place un modèle métallurgique et un modèle DEM mécanique valable en grandes déformations.

Le deuxième chapitre a ainsi été consacré à la présentation d'un modèle métallurgique ayant pour objectif la prédiction de l'évolution de la distribution des précipités, au cours du temps et en fonction de la température. Ce modèle a ensuite servi à la mise en place d'une plate-forme robuste de calcul métallurgique dédiée à la précipitation tout en garantissant son intégration future dans une plate-forme de simulation multiphysique afin de permettre le couplage mécano-thermo-métallurgique.

Le troisième chapitre a porté sur la présentation d'un modèle mécanique par éléments discrets basé sur des potentiels d'interaction, dans l'optique de pouvoir représenter le comportement d'un alliage d'aluminium lorsqu'il est soumis à des conditions de grandes déformations et/ou vitesses de déformation. Ce modèle tient compte du nombre d'éléments discrets et permet de représenter un comportement émergent macroscopique présentant une partie linéaire (élastique) et non-linéaire (plastique). Une méthode de calibration a également été proposée afin de piloter les parties linéaires et non-linéaires. De plus, les limitations de cette approche ont été discutées, et des études supplémentaires sont nécessaires afin de mettre en place l'irréversibilité. Ce dernier point ne présente a priori pas de difficultés théoriques mais plutôt informatique, comme la gestion de la mémoire des interactions lors des chargements et déchargements.



## 4.2 PERSPECTIVES

### 4.2.1 MODÈLE MÉCANIQUE

L'objectif initial était de mettre en place des modèles par éléments discrets capables de représenter le comportement mécanique de matériaux métalliques (plus particulièrement des alliages d'aluminium), et pouvant être utilisés pour simuler le malaxage dans le cas d'un procédé en grande déformation et vitesses de déformation tel que le FSW. Basé sur l'utilisation de potentiels d'interaction, le modèle que nous avons développé permet de reproduire un comportement élastoplastique et de tenir compte de la vitesse de sollicitation.

Cependant, plusieurs travaux doivent encore être effectués pour compléter le modèle développé.

- Avec la méthode basée sur les potentiels, la plasticité n'émerge pas naturellement du réarrangement microscopique des éléments discrets. Cela nous a conduit à mettre en place un modèle basé sur des forces à seuil afin de mieux piloter le comportement dans la zone plastique et de pouvoir introduire directement le comportement plastique à l'échelle des éléments discrets. Toutefois, une étude approfondie mérite d'être menée sur la modélisation numérique des mécanismes de plasticité avec une approche par potentiel. C'est en effet un point intéressant à analyser afin de mieux comprendre les raisons pour lesquelles l'irréversibilité n'émerge pas (forme des éprouvettes testées? nombre d'éléments discrets insuffisant? non prise en compte du réseau cristallin? etc.).

Par ailleurs, si la plasticité macroscopique émergente peut provenir du réarrangement microscopique des éléments discrets, quelle échelle doit avoir le volume représentatif pour que cela reste valable? Ce volume représentatif est-il compatible avec une échelle mécanique? Si le comportement plastique doit être introduit à l'échelle des éléments discrets, quel comportement macroscopique donnerait l'utilisation de lois de plasticité phénoménologiques à l'échelle des éléments discrets?

- Le modèle développé ne prend en compte, à l'échelle des éléments discrets, que les efforts axiaux (en traction ou en compression), et ne considère pas les rotations des éléments discrets. Il est cependant nécessaire de tenir également compte des efforts en flexion et en torsion, notamment pour aborder les phénomènes d'endommagements et de ruptures. En restant sur une approche par potentiels d'interaction, des potentiels en flexion et en torsion qui intègrent les efforts engendrés par les rotations pourraient être introduits;
- Le passage à des modèles basés sur des critères tensoriels (contrainte virielle). L'introduction de la plasticité directement à l'échelle des éléments discrets est une approche naturelle pour modéliser le comportement plastique émergent. L'utilisation de modèles basés sur des critères tensoriels pourrait ainsi simplifier la prise en compte avec la méthode des éléments discrets des phénomènes de plasticité. Une des grandes difficultés et un important challenge que connaissent les développements avec la méthode des éléments discrets est, de nos jours, le passage d'une échelle discrète à une échelle continue, c'est à dire la modélisation avec la méthode des éléments discrets de milieux supposés continus. Or, les connaissances théoriques basées sur la mécanique des milieux continus sont assez importantes. De très nombreux travaux dans le domaine de la mécanique des milieux continus ont déjà été effectués, et il existe un grand nombre de

modèles qui permettent d'obtenir des résultats satisfaisants, notamment pour la modélisation de la plasticité. La possibilité de s'inspirer de ces modèles bien connus pour mettre en place des modèles par éléments discrets pourrait donc présenter de nombreux avantages. Pour ce faire, il est nécessaire de connaître des relations entre des propriétés microscopiques à l'échelle des éléments discrets, et des propriétés macroscopiques à une échelle pouvant être supposée continue. Plusieurs auteurs ont proposé des relations permettant de déterminer le tenseur des contraintes en fonction des forces entre les particules. Le tenseur viriel [143], très utilisé en dynamique moléculaire, fait partie de ces relations. Il est par ailleurs de plus en plus utilisé pour des approches comme la méthode des éléments discrets. Jebahi et al. [109, 144] ont par exemple utilisé le tenseur viriel (équivalent au tenseur des contraintes de Cauchy) pour modéliser la rupture et pour représenter la densification du verre silice sous choc laser. Ainsi, par le biais du tenseur viriel, des modèles basés sur des critères tensoriels de plasticité pourraient être développés;

- Enrichir le modèle de viscosité avec des lois plus complexes. Afin de représenter le comportement de matériaux pâteux et qui peuvent être assimilés à des fluides visqueux (comme la matière proche de l'outil lors du FSW), les forces dissipatives entre deux éléments discrets pourront prendre des formes plus complexes. Par exemple, la force dissipative se décomposerait en une partie normale  $F_{ij}^{Dn}$  et en une partie tangentielle  $F_{ij}^{Dt}$ , où les coefficients de viscosités dépendront aussi de la vitesse.

$$F_{ij}^D \begin{cases} F_{ij}^{Dt} = -\eta_1 (\Delta V_t) \Delta V_t \\ F_{ij}^{Dn} = -\eta_2 (\Delta V_n) \Delta V_n \end{cases}$$

où  $\eta_1$  et  $\eta_2$  sont des coefficients de viscosité,  $\Delta V_t$ ,  $\Delta V_n$  sont respectivement les vitesses relatives tangentielles et normales.

#### 4.2.2 MODÈLE MÉTALLURGIQUE

Le modèle métallurgique a été validé en maturation et permet de bien reproduire le début de la dissolution des précipités GP. Les résultats obtenus dépendent surtout de deux paramètres qui ne sont pas bien connus: l'énergie de surface ( $\gamma$ ) et de la demi-distance ( $l$ ) entre puits de lacunes. Face au manque de données expérimentales et à la difficulté de déterminer ces 2 paramètres, une calibration numérique est nécessaire. Cependant, pour des cycles thermiques plus élevées (à partir de 150 °C), une bonne prise en compte de certains paramètres est nécessaire.

- Pour les précipités S' par exemple, seule la germination sur les précipités GP existants est actuellement prise en compte. Or, à partir d'une certaine température, les précipités GP se dissolvent. Par conséquent, dans le cas de certains cycles à haute température où les précipités GP seront dissous, la germination des précipités S' ne pourra être possible. Il est donc aussi nécessaire de prendre en compte la germination sur les dislocations et les joints de grains;
- L'énergie de germination tient aussi compte de l'énergie élastique de distorsion entre le précipité et la solution solide. Pour le calcul de l'énergie élastique, nous avons supposé que les précipités S' sont cohérents. Toutefois, le calcul de

l'énergie élastique en tenant compte de la structure et de l'interface réelle (plutôt semi-cohérente) des précipités  $S'$  serait plus pertinent;

- Lors des calculs de précipitation, les concentrations d'interfaces jouent un rôle important dans la cinétique de précipitation, car elles définissent les vitesses de croissance ou de dissolution; Or, ces concentrations et vitesses de croissance ont été déterminées, pour des raisons de simplicité, en supposant que les précipités étaient sphériques. Ce point pourrait être amélioré en déterminant des relations entre la vitesses de croissance et les concentrations interfaciales adaptées à la morphologie de chaque précipité étudié. Par exemple, Ferrante and Doherty, Liu et al. (1979, 2003) [145, 146] ont proposé une expression pour des précipités de forme cylindrique, ainsi que, Bardel et al. (2014) [147] pour des précipités en forme de bâtonnet. Dans notre cas, pour les précipités cylindriques ou en forme de bâtonnets, les concentrations d'interfaces pourraient aussi être déterminées de manière similaire à partir de relations issues de ces travaux.
- Les paramètres utilisés sont déterminés par calibration. Pour valider les résultats, il serait nécessaire d'avoir plus de données expérimentales qui peuvent être utilisées en guise de comparaison, notamment sur les fractions volumiques, sur la taille des précipités ou sur leur distribution. Pour déterminer les fractions volumiques et la taille moyenne des précipités, des mesures de diffusion de neutrons aux petits angles (DNPA) pourraient éventuellement être effectuées.

### 4.2.3 COUPLAGE THERMO-MÉCANO-MÉTALLURGIQUE

Les travaux effectués ont permis de mettre en place des modèles mécaniques et métallurgiques. Des travaux antérieurs [112] avaient donné lieu à un modèle thermique, notamment une méthode pour la simulation de la conduction de la chaleur à partir d'une formulation discrète. La prochaine étape devra être le couplage de ces différents modèles (mécanique, thermique et métallurgique). Dans les travaux futurs, la modification du comportement mécanique par la température devra être prise en compte. Si les travaux se focalisent sur une méthode basée sur les potentiels d'interaction, les paramètres  $\epsilon_1$ ,  $m_1$ ,  $n_1$ ,  $\epsilon_2$ ,  $m_2$  et  $n_2$  devront dépendre de la température. Une des pistes que nous proposons est d'identifier, grâce à des essais à chaud (par exemple des essais de traction uniaxiale à chaud), et, grâce à la calibration numérique, l'évolution des paramètres en fonction de la température. Dans un premier temps, l'étude de l'influence de la température pourra porter sur les paramètres  $\epsilon_1$  et  $\epsilon_2$  qui définissent l'énergie minimale entre chaque interaction et dont les influences pourront être considérées du premier ordre. Des lois d'évolutions  $\epsilon_{1T} = \epsilon_1(T)$  et  $\epsilon_{2T} = \epsilon_2(T)$  basées sur des courbes expérimentales à différentes températures pourront être proposées. Ensuite, en fonction d'une source de chaleur (contact outil/matière et chaleur dissipée par déformation plastique), un couplage thermo-mécanique pourra être mis en place. Pour un problème tel que le FSW, l'utilisation de la méthode par éléments discrets est particulièrement adaptée pour la gestion des aspects tribologiques, notamment du contact outil/matière.

D'autre part, le modèle métallurgique de précipitation permet de déterminer l'évolution de la taille et de la fraction volumique des précipités en fonction de la température. Le modèle métallurgique pourra être utilisé pour déterminer l'état de précipitation à la fin du cycle thermique. Pour des alliages à durcissement structuraux et particulièrement pour l'alliage d'aluminium 2024, il est généralement admis

que, concernant l'influence de la microstructure sur la modification des propriétés mécaniques, la précipitation a un effet prépondérant. Par ailleurs, des modèles de durcissement adaptés au matériau et permettant de déterminer les propriétés mécaniques en fonction de l'état de précipitation sont à définir. En effet, dans le cadre des travaux effectués, les modèles de durcissement structural n'ont pas été étudiés. Une fois le modèle de durcissement structural défini, pour chaque incrément de température, un couplage thermo-métallo-mécanique pourra être effectué.

# ANNEXES





## RELATIONS IMPORTANTES POUR LES CALCULS DE PRÉCIPITATION

---

Plusieurs relations sont utilisées pour déterminer les valeurs numériques de certaines variables nécessaires au bon déroulement du calcul de précipitation. Les relations les plus importantes sont présentées ici.

### Sommaire

---

A.1	Calcul du Volume molaire . . . . .	<b>110</b>
A.1.1	Solution solide . . . . .	110
A.1.2	Volume molaire des précipités . . . . .	110
A.2	Rayon minimum des précipités . . . . .	<b>111</b>
A.2.1	Précipités GP . . . . .	111
A.2.2	Precipité S' . . . . .	111
A.3	Actualisation des concentrations volumiques dans la solution solide	<b>111</b>
A.4	Rayon moyen d'un précipité à partir d'une distribution . . . . .	<b>112</b>
A.5	Nombre de sites de germination . . . . .	<b>112</b>
A.5.1	Précipités GP . . . . .	112
A.5.2	Précipités S' . . . . .	113

---

## A.1 CALCUL DU VOLUME MOLAIRE

### A.1.1 SOLUTION SOLIDE

La solution solide d'aluminium a une structure cristallographique cubique face centrée (CFC), donc 4 atomes par maille, avec un paramètre de maille supposée égale à celui de l'aluminium pure ( $a_{mAl} = 4.0412 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ ). Le volume atomique moyen  $V_{at-moySS}$  de la solution solide est :

$$V_{at-moySS} = \frac{a_{mAl}^3}{4} = 1.65 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3 \quad (\text{A.1})$$

Le volume molaire de la solution solide d'aluminium est par conséquent:

$$V_{m-SS} = N_A V_{at-moySS} \approx 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mole} \quad (\text{A.2})$$

### A.1.2 VOLUME MOLAIRE DES PRÉCIPITÉS

#### A.1.2.1 Précipités GP

Le volume molaire des précipités GP ne peut être déterminé que sous certaines hypothèses car leur structure cristallographique reste encore inconnu. En effet, différentes structures cristallographiques ont été proposées et font encore l'objet de controverses.

Nous avons fait l'hypothèse que le volume atomique moyen  $V_{at-moyGP}$  (volume moyen d'un atome dans une maille) des précipités GP est proche de celui de la solution solide. Cette hypothèse découle du fait qu'indépendamment de la stoechiométrie et de la structure cristallographique proposée dans la littérature, le volume atomique moyen du précipité GP reste proche de celui de la solution solide d'aluminium [22, 124]. Or, dans notre modèle, la composition choisie pour les précipités GP est  $Al_8CuMg$ , donc, 10 atomes par maille. Ainsi, le volume molaire du précipité ( $V_{m-GP}$ ) sera le décuple de celui de la solution solide d'aluminium ( $V_{m-SS}$ ). Le volume molaire du précipité est alors:

$$V_{m-GP} = V_{m-Al_8CuMg} = (8 + 1 + 1) V_{m-SS} = 10 V_{m-SS} \quad (\text{A.3})$$

#### A.1.2.2 Précipités S'

Il est généralement admis que les précipités S' ont une cristallisation selon une structure orthorhombique avec 16 atomes par maille (4 précipités par maille) de paramètres  $a=0.40 \text{ nm}$ ,  $b=0.923 \text{ nm}$ , et  $c=0.714 \text{ nm}$  (voir 2.2.1.2). Le volume atomique moyen  $\left(\frac{abc}{16} = 1.6510^{-29} \text{ m}^3\right)$  des précipités S' est donc comparable à celui de la solution solide d'aluminium ( $1.6610^{-29} \text{ m}^3$ ). Ainsi le volume molaire  $V_{m-S'}$  des précipités S' est:

$$V_{m-S'} = V_{m-Al_2CuMg} = (2 + 1 + 1) V_{m-SS} = 4 V_{m-SS} \quad (\text{A.4})$$



## A.2 RAYON MINIMUM DES PRÉCIPITÉS

### A.2.1 PRÉCIPITÉS GP

Pour déterminer le rayon minimum  $r_{0GP}$  des précipités GP, une sphère dont le volume est égale au volume d'un précipité GP est utilisée. Ainsi,  $r_{0GP}$  est défini comme le rayon d'une sphère équivalente au volume  $V_{\text{molécule-GP}}$  d'une molécule de précipité.

$$r_{0GP} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi V_{\text{molécule-GP}}}} \quad (\text{A.5})$$

$$r_{0GP} \approx 0.4 \text{ nm} \quad (\text{A.6})$$

### A.2.2 PRÉCIPITÉ S'

Pour déterminer le rayon minimum des précipités, une sphère dont le volume est égale au volume d'une maille conventionnel du précipité S' (structure orthorhombique de paramètres  $a=0.40 \text{ nm}$ ,  $b=0.923 \text{ nm}$ , et  $c=0.714 \text{ nm}$ ) est utilisée. Ainsi  $r_{0S'}$  est défini comme suit:

$$r_{0S'} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi V_{\text{maille-S}'}}} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi a b c}} \quad (\text{A.7})$$

$$r_{0S'} \approx 0.4 \text{ nm} \quad (\text{A.8})$$

## A.3 ACTUALISATION DES CONCENTRATIONS VOLUMIQUES DANS LA SOLUTION SOLIDE

La concentration volumique  $X_{V_{ss-sol_i}}$  en soluté  $sol_i$  dans la solution solide (ss) à un instant donné est calculée comme suit:

$$X_{V_{ss-sol_i}} = \frac{X_{V_{0-sol_i}} - \sum_p f_{vp} X_{V_{sol_i-p}}}{1 - \sum_p f_{vp}} \quad (\text{A.9})$$

avec	$X_{V_{0-sol_i}}$	concentration volumique initiale en soluté $sol_i$ dans la solution solide
	$f_{vp}$	fraction volumique du précipité p dans la solution solide
	$X_{V_{sol_i-p}}$	concentration volumique en soluté $sol_i$ dans le précipité

## A.4 RAYON MOYEN D'UN PRÉCIPITÉ À PARTIR D'UNE DISTRIBUTION

Le rayon moyen  $R_{\text{moyen}_P}$  d'un précipité  $P$  compte tenu de sa distribution à un instant  $t$  donné s'exprime comme suit:

$$R_{\text{moyen}_P} = \frac{\sum_i N_i r_i}{\sum_i N_i} \quad (\text{A.10})$$

avec  $r_i$  classe de rayon  $r_i$   
 $N_i$  le nombre de précipité par unité de volume dans la classe de rayon  $r_i$

## A.5 NOMBRE DE SITES DE GERMINATION

### A.5.1 PRÉCIPITÉS GP

Dans le cas d'une germination homogène, le nombre initial de sites potentiels de germination est classiquement déterminé en considérant qu'il est égal au nombre total d'atomes par unité de volume. La solution solide d'aluminium étant diluée, le nombre d'atomes solutés est faible par rapport à celui des atomes d'aluminium. Par conséquent, pratiquement tous les atomes peuvent être considérées comme des atomes d'aluminium, et le nombre totale  $N_{0-\text{at}}$  d'atome se calcule comme suit:

$$N_{0-\text{at}} = N_{0-\text{Al}} = \frac{N_A}{V_{\text{Al}}} \quad (\text{A.11})$$

La germination des précipité GP étant considérée homogène, le nombre initial  $N_{0s-\text{GP}}$  de sites potentiels de germination par unité de volume est donc:

$$N_{0s-\text{GP}} = N_{0-\text{at}} = 6.02214 \cdot 10^{28} \text{ sites/m}^3 \quad (\text{A.12})$$

Par ailleurs, étant donné la structure CFC de la solution solide d'aluminium, nous savons que 4 atomes occupent un volume  $a_{\text{mAl}}^3$  ( $a_{\text{mAl}}$  étant le paramètre de maille) de solution solide. Or, en tenant compte du volume  $V_{\text{GP}}$  d'un précipité GP, le nombre de site  $N_{\text{occ-GP}|_{1p}}$  occupé par ce précipité s'estime comme suit:

$$N_{\text{occ-GP}|_{1p}} = \frac{4 V_{\text{GP}}}{a_{\text{mAl}}^3} \quad (\text{A.13})$$

Ainsi, à un instant donné, le nombre  $N_{\text{occ-GP}}$  de sites occupés par tous les précipités GP présents dans la solution solide s'exprime alors en fonction de leur fraction volumique  $f_{V_{\text{GP}}}$  (nombre de précipités par unité de volume) comme suit:

$$N_{\text{occ-GP}} = \frac{4 f_{V_{\text{GP}}}}{a_{\text{mAl}}^3} \quad (\text{A.14})$$

Dès lors, à un instant donné, en tenant compte des sites déjà occupés et nombre de sites initial, le nombre par unité de volume de sites de germination potentiellement disponible est:

$$N_{s-GP} = N_{0s-GP} - N_{occ-GP} = N_{0s-GP} - \frac{4 f_{vGP}}{a_{mAl}^3} \quad (A.15)$$

### A.5.2 PRÉCIPITÉS S'

Seule la germination hétérogène des précipités S' sur les précipité GP existants a été considérée.

Soit  $N_{GP}$  le nombre par unité de volume de précipité GP et  $N_{S'}$  le nombre par unité de volume de précipité S' présents dans la solution solide. Le nombre  $N_{s-S'}$  par unité de volume de sites de germination potentiellement disponible des précipités S' est donc déterminé comme suit:

$$N_{s-S'} = N_{GP} - N_{S'} \quad (A.16)$$



## FICHIERS D'ENTRÉES POUR LE PROGRAMME DE PRÉCIPITATION

---

Les fichiers d'entrées (en langage Python) pour les calculs de précipitation sont présentés ici.

### Sommaire

---

B.1	Fichier matériau pour l'alliage d'aluminium 2024 . . . . .	116
B.2	Fichier pour l'initialisation du calcul . . . . .	118

---



```

        "nature": "DiffusionParam", #Important
"preExpDiffusionCoef": (6.5E-5, "m^2.s^-1"), #Atomic diffusion:
    initial diffusion value for copper, pre-exponential
    diffusion coeffcient. Mandatory!
45         "Q": (135000, "J.mol^-1"), #Atomic diffusion:
    Activation energy of diffusion for copper. Mandatory!
        "EVac": (None, None)

Mg={
        "nature": "DiffusionParam", #Important
50 "preExpDiffusionCoef": (1.2E-4, "m^2.s^-1"), #initial diffusion
    value for magnesium, pre-exponential diffusion coeffcient
        "Q": (131000, "J.mol^-1"), #Activation energy
    of diffusion for magnesium
        "EVac": (None, None)
}

55 ##### Guinier-Preston DATA #####
GP={
    "nature": "GuinierPreston",
    "chemicalComposition": ("Al8Cu1Mg1", "") , #Chemical
        composition, will be used to find stoichiometric coefs and
        then compute volumic concentration of elements
60 "initialNucleationSitesNb": (6.02214E28, "at.m^-3") , # initial
    Number of nucleation sites at beginning of hardening, was
    Ns0P1. Is assumed to be the initial number of aluminium
    atoms/volum unit
    "preExpTermForSolvus": (0.992, "m^6.m^-6"), # was K_GP
    "molarVolume": (1E-4 , "m^3.mol^-1"), #volume of one mole of
        precipitates,
    "solvusActivationEnergy": (36000, "J.mol^-1"), # DeltaH_GP
    "surfaceEnergyPolynomialModel": ([0.044], "J.m^-2"), # for
        example, if degree of polynom is 3: ([a0,a1,a2,a3], "J.m
        ^-2")
65 "shapeFactor": (0, "m.m^-1"), #ratio between lenght to radius.
    (0 for spherical shape)
    "deltaCell": (1/100, "m.m^-1") , # difference between precipitate
        and solid solution cell size
}

70 ##### Sprime DATA #####
Sprime={
    "nature": "Sprime",
    "chemicalComposition": ("Al2CuMg", "") , #Chemical composition,
        will be used to find stoichiometric coefs and then compute
        volumic concentration of elements
    "preExpTermForSolvus": (49.746, "m^6.m^-6"), # K_Sprime
75 "solvusActivationEnergy": (76000, "J.mol^-1"), #DeltaH_Sprime
    "molarVolume": (4E-5 , "m^3.mol^-1"),

```

```

"surfaceEnergyPolynomialModel":([-0.10985+0.1,8.31E-4,-8.71E
-7],"J.m^-2"), # for example, if degree of polynom is 3
then we write: ([a0,a1,a2,a3],"J.m^-2")
"shapeFactor":(20,"m.m^-1"), #ratio between lenght to radius.
If 0, shape is spherical. was alphaP2
"deltaCell":(1/100,"m.m^-1") , #difference between precipitate
and solid solution cell size , was deltamailleP2
80 "wettingAngle":(30*math.pi/180,"rad") # wetting angle of Sprime
precipitates on GP precipitates, was thetaP2
}

```

## B.2 FICHER POUR L'INITIALISATION DU CALCUL

```

# -*- coding: utf-8 -*-

from __future__ import division, print_function
from MetalUtils.PhysicalConstants import Dict as
PhysicalConstantsDict
5 from MetalUtils.ElementsData import Dict as ElementsDataDict

import os
dir_path = os.path.dirname(os.path.realpath(__file__))

10 NuGroDisVersion="1.0"

savePath=""

ComputationParam={
15 "Type": "Hardening>ThermalLoading", #Quenching,Hardening,
ThermalLoading or mix(example: Quenching>Hardening) .
Hardening=maturation or tempering
"Material": "M2024",
"initialTimeStep" : (1,"s") #default Time step for the first
iteration
}

20
QuenchingParam={
"v": (50,"Celsius degree.s^-1"), # v is the cooling rate
"totIterationNumber":(None,""), # user can replace None by a
value which must be superior to a computed value ... ,
unitless
"Tfinal":(20,"Celsius degree") # Final temperature
25 }

HardeningParam={
"duration": (200000,"s"), # hardening duration
30 "temperature": (293.15,"K") #hardening temperature
"initialClassNumber" : (20, "") # Initial number for hardening
radiusDistribution Class , unitless.
}

```







## BIBLIOGRAPHIE

---

- [1] Leonardo Da Vinci. *The notebooks of Leonardo da Vinci*. Vol. 1. Courier Corporation, 2012.
- [2] W.M. Thomas, E.D. Nicholas, J.C. Needham, M.G. Murch, P. Temple-Smith, and C.J. Dawes. *Improvements relating to friction welding*. 1991.
- [3] Christopher B. Smith and Rajiv S. Mishra. *Friction Stir Processing for Enhanced Low Temperature Formability*. 2014, pp. 1–135. ISBN: 9780124201132. DOI: 10.1016/B978-0-12-420113-2.00004-0. URL: <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84903654951&partnerID=tZOtx3y1>.
- [4] TWI. *TWI: friction stir welding of aluminium alloys*. URL: <http://www.twi-global.com/technical-knowledge/published-papers/friction-stir-welding-of-aluminium-alloys/>.
- [5] Yu E. Ma, Z.C. Xia, R.R. Jiang, and WenYa Li. “Effect of welding parameters on mechanical and fatigue properties of friction stir welded 2198 T8 aluminum–lithium alloy joints.” In: *Engineering Fracture Mechanics* 114 (2013), pp. 1–11. ISSN: 00137944. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2013.10.010. URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0013794413003287>.
- [6] S. Lomolino, R. Tovo, and J. dos Santos. “On the fatigue behaviour and design curves of friction stir butt-welded Al alloys.” In: *International Journal of Fatigue* 27:3 (2005), pp. 305–316. ISSN: 01421123. DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2004.06.013.
- [7] CETIM. *Soudage par friction-malaxage : une technologie mature*. 2015. URL: <http://www.cetim.fr/fr/Actualites/En-France/A-la-une/Soudage-par-friction-malaxage-une-technologie-mature>.
- [8] Daniela Lohwasser and Zhan Chen. *Friction stir welding*. Vol. 80. 2. Woodhead Publishing Limited, 2010, pp. 55–7. ISBN: 978-1-84569-450-0. DOI: 10.1533/9781845697716. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/book/9781845694500>.
- [9] F. Gemme. “Modélisation Numérique Des Phénomènes Physiques Du Soudage Par Friction-Malaxage Et Comportement En Fatigue De Joints Soudés En Aluminium 7075-T6.” PhD thesis. 2011.
- [10] J. A. Schneider and Jr. Nunes, A. C. “Characterization of plastic flow and resulting microtextures in a friction stir weld.” In: *Metallurgical and Materials Transactions B* 35:8 (2004), pp. 777–783. ISSN: 1073-5615. DOI: 10.1007/s11663-004-0018-4.
- [11] Rajiv S. Mishra Sidhar and Harpreet. “Physical Metallurgy of 2XXX Aluminum Alloys.” In: *Friction Stir Welding of 2XXX Aluminum Alloys Including Al-Li Alloys, A Volume in the Friction Stir Welding and Processing Book Series*. Chap. Physical M.

- [12] S P Ringer and K Hono. "Microstructural evolution and age hardening in aluminium alloys: Atom probe field-ion microscopy and transmission electron microscopy studies." In: *Materials Characterization* 44.1 (2000), pp. 101–131.
- [13] S P Ringer, K Hono, I J Polmear, and T Sakurai. "Precipitation processes during the early stages of ageing in Al-Cu-Mg alloys." In: *Applied surface science* 94 (1996), pp. 253–260.
- [14] S P Ringer, K Hono, I J Polmear, and T Sakurai. "Nucleation of precipitates in aged Al Cu Mg (Ag) alloys with high Cu: Mg ratios." In: *Acta Materialia* 44.5 (1996), pp. 1883–1898.
- [15] Simon P Ringer, Kazuhiro Hono, Toshio Sakurai, and Ian J Polmear. "Cluster hardening in an aged Al-Cu-Mg alloy." In: *Scripta Materialia* 36.5 (1997), pp. 517–521.
- [16] S P Ringer, T Sakurai, and I J Polmear. "Origins of hardening in aged Al-Cu-Mg(Ag) alloys." In: *Acta Materialia* 45.9 (1997), pp. 3731–3744.
- [17] A Charai, T Walther, C Alfonso, A-M Zahra, and C Y Zahra. "Coexistence of clusters, GPB zones, S<sup>''</sup>-, S'-and S-phases in an Al-0.9% Cu-1.4% Mg alloy." In: *Acta Materialia* 48.10 (2000), pp. 2751–2764.
- [18] Simon P Ringer, Sally K Caraher, and Ian J Polmear. "Response to comments on cluster hardening in an aged Al-Cu-Mg alloy." In: *Scripta materialia* 39.11 (1998), pp. 1559–1567.
- [19] Petar Ratchev, Bert Verlinden, Peter De Smet, and Paul Van Houtte. "Precipitation hardening of an Al-4.2 wt% Mg-0.6 wt% Cu alloy." In: *Acta materialia* 46.10 (1998), pp. 3523–3533.
- [20] S Abis, M Massazza, P Mengucci, and G Riontino. "Early ageing mechanisms in a high-copper AlCuMg alloy." In: *Scripta Materialia* 45.6 (2001), pp. 685–691.
- [21] S C Wang and M J Starink. "Precipitates and intermetallic phases in precipitation hardening Al-Cu-Mg-(Li) based alloys." In: *International Materials Reviews* 50.4 (2005), pp. 193–215.
- [22] C Wolverton. "Crystal structure and stability of complex precipitate phases in Al-Cu-Mg-(Si) and Al-Zn-Mg alloys." In: *Acta Materialia* 49.16 (2001), pp. 3129–3142.
- [23] Yu A Bagaryatsky. "Mechanism of Artificial Aging of Al-Cu-Mg Alloy." In: *Doklady Akad Nauk SSSR*. Vol. 87. 1952, pp. 397–400.
- [24] S C Wang and M J Starink. "The assessment of GPB<sub>2</sub>/S<sup>''</sup> structures in Al-Cu-Mg alloys." In: *Materials Science and Engineering: A* 386.1 (2004), pp. 156–163.
- [25] M.J.a Russell, H.R.b Shercliff, and P.L.a Threadgill. "Development and application of an analytical process model for friction stir welding." In: *TMS Annual Meeting*. Ed. by Lienert T J Das S.K. Kaufman J.G. New Orleans, LA, 2001, pp. 225–234. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-6444244929{\&}partnerID=40{\&}md5=ec37ac9307b9c5676b1b3e9f5b94582a>.
- [26] JERRY E. GOULD and ZHILI FENG. "Heat Flow Model for Friction Stir Welding of Aluminum Alloys." In: *Journal of Materials Processing & Manufacturing Science* 7.2 (1998), pp. 185–194. ISSN: 10620656. DOI: 10.1106/648R-2CNE-2PD0-45L6. URL: <http://techpub.metapress.com/link.asp?target=contribution{\&}id=648R2CNE2PD045L6>.

- [27] P Dong, F Lu, J K Hong, and Z Cao. "Coupled thermomechanical analysis of friction stir welding process using simplified models." In: *Science and Technology of Welding and Joining* 6.5 (2001), pp. 281–287. ISSN: 13621718. DOI: [Doi10.1179/136217101101538884](https://doi.org/10.1179/136217101101538884).
- [28] P a Colegrove and H R Shercliff. "Development of Trivex friction stir welding tool Part 2 – three-dimensional flow modelling." In: *Science and Technology of Welding and Joining* 9.4 (2004), pp. 352–361. ISSN: 13621718. DOI: [10.1179/136217104225021661](https://doi.org/10.1179/136217104225021661). URL: <http://openurl.ingenta.com/content/xref?genre=article{\&}issn=1362-1718{\&}volume=9{\&}issue=4{\&}spage=345>.
- [29] Mir Zahedul H. Khandkar, Jamil A. Khan, Anthony P. Reynolds, and Michael A. Sutton. "Predicting residual thermal stresses in friction stir welded metals." In: *Journal of Materials Processing Technology* 174.1-3 (2006), pp. 195–203. ISSN: 09240136. DOI: [10.1016/j.jmatprotec.2005.12.013](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2005.12.013). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0924013606000434>.
- [30] H Schmidt, J Hattel, and J Wert. "An analytical model for the heat generation in friction stir welding." In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 12.1 (2004), pp. 143–157. ISSN: 0965-0393. DOI: [10.1088/0965-0393/12/1/013](https://doi.org/10.1088/0965-0393/12/1/013). URL: <http://stacks.iop.org/0965-0393/12/i=1/a=013?key=crossref.ae9ff7d425370c56fab88d43733205ba>.
- [31] JERRY E. GOULD and ZHILI FENG. "Heat Flow Model for Friction Stir Welding of Aluminum Alloys." In: *Journal of Materials Processing & Manufacturing Science* 7.2 (1998), pp. 185–194. ISSN: 10620656. DOI: [10.1106/648R-2CNE-2PD0-45L6](https://doi.org/10.1106/648R-2CNE-2PD0-45L6). URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0032230472{\&}doi=10.1106/648R-2CNE-2PD0-45L6{\&}partnerID=40{\&}md5=11db581daa329c3100b6cae202ae96afhttp://techpub.metapress.com/link.asp?target=contribution{\&}id=648R2CNE2PD045L6>.
- [32] C Chen and R Kovacevic. "Thermomechanical modelling and force analysis of friction stir welding by the finite element method." In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* 218.5 (2004), pp. 509–519. ISSN: 0954-4062. DOI: [10.1243/095440604323052292](https://doi.org/10.1243/095440604323052292). URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-2542506423{\&}doi=10.1243/095440604323052292{\&}partnerID=40{\&}md5=8c7116742fcc8750c5f7d984529a8d58http://pic.sagepub.com/lookup/doi/10.1243/095440604323052292>.
- [33] M. Song and R. Kovacevic. "Thermal modeling of friction stir welding in a moving coordinate system and its validation." In: *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 43.6 (2003), pp. 605–615. ISSN: 08906955. DOI: [10.1016/S0890-6955\(03\)00022-1](https://doi.org/10.1016/S0890-6955(03)00022-1). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0890695503000221>.

- [34] P.a Heurtier, M.J.b Jones, C.a Desrayaud, J.H.a Driver, F.a Montheillet, and D.c Allehaux. “Mechanical and thermal modelling of Friction Stir Welding.” In: *Journal of Materials Processing Technology* 171.3 (2006), pp. 348–357. ISSN: 09240136. DOI: 10 . 1016 / j . jmatprotec . 2005 . 07 . 014. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-30944466676{\&}doi=10.1016/j.jmatprotec.2005.07.014{\&}partnerID=40{\&}md5=dc95a48dc4015825f007bd9ded33ebc3http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0924013605007570>.
- [35] A. Bastier, M. H. Maitournam, F. Roger, and K. Dang Van. “Modelling of the residual state of friction stir welded plates.” In: *Journal of Materials Processing Technology* 200.1-3 (2008), pp. 25–37. ISSN: 09240136. DOI: 10 . 1016 / j . jmatprotec . 2007 . 10 . 083.
- [36] J.C.a McClure, W.a Tang, L.E.a Murr, X.a Guo, Z.b Feng, and J.E.b Gould. “A Thermal Model of Friction Stir Welding.” In: *ASM Proceedings of the International Conference: Trends in Welding Research*. Ed. by Johnson J A Smartt H B DebRoy T Vitek J.M. David S.A. Pine Mountain, GA, 1998, pp. 590–595. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-1442331394{\&}partnerID=40{\&}md5=15c12d415866b86327c781320b44386c>.
- [37] M Z H Khandkar, J A Khan, and A P Reynolds. “Prediction of temperature distribution and thermal history during friction stir welding: input torque based model.” In: *Science and Technology of Welding and Joining* 8.3 (2003), pp. 165–174. ISSN: 1362-1718. DOI: 10 . 1179 / 136217103225010943. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0043200975{\&}doi=10.1179/136217103225010943{\&}partnerID=40{\&}md5=50f54d563bd1c1146f5fc30381878ce2http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1179/136217103225010943>.
- [38] abdelaziz Timelsi. “Simulation du soudage par friction et malaxage à l’aide de méthodes sans maillage.” PhD thesis. Université de Lorraine, 2013.
- [39] A.a b Simar, J.c Lecomte-Beckers, T.b Pardoën, and B.a De Meester. “Effect of boundary conditions and heat source distribution on temperature distribution in friction stir welding.” In: *Science and Technology of Welding and Joining* 11.2 (2006), pp. 170–177. ISSN: 13621718. DOI: 10 . 1179 / 174329306X84409. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-36448935206{\&}doi=10.1179{\%}252f174329306X84409{\&}partnerID=40{\&}md5=f39a22ce47f293747d95c194d95c507e>.
- [40] I J Polmear. *Light Alloys-Metallurgy of the Light Metals*. 3rd. Butterworth-Heinemann, 1995.
- [41] A K Vasudevan and R D Doherty. *Aluminium Alloys-Contemporary Research and Application*. Vol. 31. 1989.
- [42] J T Staley. “Metallurgical aspects affecting strength of heat-treatable alloy products used in the aerospace industry.” In: *Proc. 3rd Intl. Conf: Aluminium Alloys—Their Physical and Mechanical Properties (ICAA3)*. 1992, pp. 22–26.

- [43] H K Hardy and T J Heal. "Report on precipitation." In: *Progress in Metal Physics* 5 (1954), pp. 143–278.
- [44] A (Anthony) Kelly and R B Nicholson. *Precipitation hardening*. Oxford : Pergamon Press, 1963.
- [45] J W Martin. *Precipitation Hardening (Second Edition)*. Second Edi. 1998.
- [46] A J Ardell. "Precipitation hardening." In: *Metallurgical Transactions A* 16.12 (1985), pp. 2131–2165. ISSN: 0360-2133. DOI: [10 . 1007 / BF02670416](https://doi.org/10.1007/BF02670416). URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02670416>.
- [47] Mike F Ashby. "Physical modelling of materials problems." In: *Materials Science and Technology* 8.2 (1992), pp. 102–111.
- [48] Marco J Starink, I Sinclair, P A S Reed, and Peter J Gregson. "Predicting the structural performance of heat-treatable Al-alloys." In: *Materials science forum*. Vol. 331. Trans Tech Publ. 2000, pp. 97–110.
- [49] F L Kaufman. *Foreword CALPHAD*. 1977.
- [50] I Ansara. "Comparison of methods for thermodynamic calculation of phase diagrams." In: *International Metals Reviews* 24.1 (1979), pp. 20–53.
- [51] N Kamp, A Sullivan, and J D Robson. "Modelling of friction stir welding of 7xxx aluminium alloys." In: *Materials Science and Engineering: A* 466.1 (2007), pp. 246–255.
- [52] M J Starink and P J Gregson. "A quantitative interpretation of DSC experiments on quenched and aged SiC p reinforced 8090 alloys." In: *Scripta metallurgica et materialia* 33.6 (1995), pp. 893–900.
- [53] D H Bratland, Ø Grong, H Shercliff, O R Myhr, and S Tjøtta. "Overview No. 124 Modelling of precipitation reactions in industrial processing." In: *Acta Materialia* 45.1 (1997), pp. 1–22.
- [54] R H Brown and L A Willey. "Constitution of alloys." In: *Paper from Aluminium, V. 1. ASM, Metals Park, Ohio, 1967, P 31-54* (1967).
- [55] H I Aaronson. "Discussion of "on the growth kinetics of plate-shaped precipitates in aluminum-copper and aluminum-gold alloys" by Y.H. Chen and R.D. Doherty." In: *Scripta Metallurgica* 11.9 (1977), pp. 731–732. ISSN: 00369748. DOI: [10 . 1016 / 0036 - 9748 \(77 \) 90066 - 7](https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33845573912&doi=10.1016%252f0036-9748%252877%252990066-7%26partnerID=40&md5=dcc9f0252f165dc4a24d73c579947ff1). URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33845573912&doi=10.1016%252f0036-9748%252877%252990066-7%26partnerID=40&md5=dcc9f0252f165dc4a24d73c579947ff1>.
- [56] John Wyrill Christian. *The theory of transformations in metals and alloys*. Newnes, 2002.
- [57] Richard Wagner, Reinhard Kampmann, and Peter W. Voorhees. "Homogeneous Second-Phase Precipitation." In: *Phase Transformations in Materials*. Vol. 5. Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005, pp. 309–407. DOI: [10 . 1002 / 352760264X . ch5](https://doi.org/10.1002/352760264X.ch5). URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/352760264X.ch5>.
- [58] M J Starink and A-M Zahra. "An analysis method for nucleation and growth controlled reactions at constant heating rate." In: *Thermochimica acta* 292.1 (1997), pp. 159–168.

- [59] A Deschamps and Y Brechet. "Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-Mg alloy—II. Modeling of precipitation kinetics and yield stress." In: *Acta Materialia* 47.1 (1998), pp. 293–305.
- [60] O R Myhr and Øystein Grong. "Modelling of non-isothermal transformations in alloys containing a particle distribution." In: *Acta Materialia* 48.7 (2000), pp. 1605–1615.
- [61] J D Robson and P B Prangnell. "Dispersoid precipitation and process modelling in zirconium containing commercial aluminium alloys." In: *Acta Materialia* 49.4 (2001), pp. 599–613.
- [62] Christophe Sigli. "Nucleation, growth and coarsening of spherical precipitates in aluminum alloys." In: *Materials science forum*. Vol. 331. Trans Tech Publ. 2000, pp. 513–518.
- [63] H I Aaronson. "Phase Transformations." In: 1970, p. 219.
- [64] C.M. Chen and R. Kovacevic. "Finite element modeling of friction stir welding—thermal and thermomechanical analysis." In: *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 43.13 (2003), pp. 1319–1326. ISSN: 08906955. DOI: [10.1016/S0890-6955\(03\)00158-5](https://doi.org/10.1016/S0890-6955(03)00158-5).
- [65] D.a Lawrjaniec, A.b Abisoror, C.b Decker, M.c Koçak, and J.c Dos Santos. "Numerical simulation of friction stir welding." In: *Materials Science Forum* 426-432.4 (2003). Ed. by Sakai T Chandra T. Torralba J.M., pp. 2993–2998. ISSN: 02555476. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0037999872{\&}partnerID=40{\&}md5=8a2669c56f0c6909870903763dbe5623>.
- [66] Yuh J. Chao, X. Qi, and W. Tang. "Heat Transfer in Friction Stir Welding—Experimental and Numerical Studies." In: *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 125.1 (2003), p. 138. ISSN: 10871357. DOI: [10.1115/1.1537741](https://doi.org/10.1115/1.1537741).
- [67] X.K Zhu and Y.J Chao. "Numerical simulation of transient temperature and residual stresses in friction stir welding of 304L stainless steel." In: *Journal of Materials Processing Technology* 146.2 (2004), pp. 263–272. ISSN: 09240136. DOI: [10.1016/j.jmatprotec.2003.10.025](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2003.10.025). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0924013603010288>.
- [68] H.W. Zhang, Z. Zhang, and J.T. Chen. "The finite element simulation of the friction stir welding process." In: *Materials Science and Engineering: A* 403.1-2 (2005), pp. 340–348. ISSN: 09215093. DOI: [10.1016/j.msea.2005.05.052](https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.05.052). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0921509305005472>.
- [69] H Schmidt and J Hattel. "A local model for the thermomechanical conditions in friction stir welding." In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 13.1 (2005), pp. 77–93. ISSN: 09650393. DOI: [10.1088/0965-0393/13/1/006](https://doi.org/10.1088/0965-0393/13/1/006). URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-12344327272{\&}doi=10.1088{\%}2F0965-0393{\%}2F13{\%}2F1{\%}2F006{\&}partnerID=40{\&}md5=bc4a7a85a531fc8fbf6e33546ab3fdd>.



- [70] G.a b Buffa, J.a Hua, R.a Shivpuri, and L.b Fratini. "A continuum based fem model for friction stir welding - Model development." In: *Materials Science and Engineering A* 419.1-2 (2006), pp. 389–396. ISSN: 09215093. DOI: 10.1016/j.msea.2005.09.040. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33644929013{\&}doi=10.1016{\%}252fj.msea.2005.09.040{\&}partnerID=40{\&}md5=19875b53c1a4901e47d866a34d6fdf47>.
- [71] F.a Gemme, Y.a Verreman, L.b Dubourg, and P.b Wanjara. "Effect of welding parameters on microstructure and mechanical properties of AA7075-T6 friction stir welded joints." In: *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures* 34.11 (2011), pp. 877–886. ISSN: 8756758X. DOI: 10.1111/j.1460-2695.2011.01580.x. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-80054689374{\&}doi=10.1111{\%}252fj.1460-2695.2011.01580.x{\&}partnerID=40{\&}md5=29d067ca1aa38b03350df7b771561110>.
- [72] D.-Y.a b Yan, A.-P.a b Wu, J.c Silvanus, and Q.-Y.a b Shi. "Predicting residual distortion of aluminum alloy stiffened sheet after friction stir welding by numerical simulation." In: *Materials and Design* 32.4 (2011), pp. 2284–2291. ISSN: 02641275. DOI: 10.1016/j.matdes.2010.11.032. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-79251601838{\&}doi=10.1016{\%}252fj.matdes.2010.11.032{\&}partnerID=40{\&}md5=a042e6500cdc2227f7b613ad53d77cfd>.
- [73] M.a b Yu, W.Y.a Li, J.L.a Li, and Y.J.c Chao. "Modelling of entire friction stir welding process by explicit finite element method." In: *Materials Science and Technology (United Kingdom)* 28.7 (2012), pp. 812–817. ISSN: 02670836. DOI: 10.1179/1743284711Y.0000000087. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84863086672{\&}doi=10.1179{\%}252f1743284711Y.0000000087{\&}partnerID=40{\&}md5=3a2297d58b493f8ce13d6296a30a7c15>.
- [74] K.a Gök and M.b Aydin. "Investigations of friction stir welding process using finite element method." In: *International Journal of Advanced Manufacturing Technology* 68.1-4 (2013), pp. 775–780. ISSN: 02683768. DOI: 10.1007/s00170-013-4798-z. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84888366205{\&}doi=10.1007{\%}252fs00170-013-4798-z{\&}partnerID=40{\&}md5=87befe45782e8c1e2f17dcd1a9d5cf98>.
- [75] S Mandal, J Rice, and A A Elmustafa. "Experimental and numerical investigation of the plunge stage in friction stir welding." In: *Journal of Materials Processing Technology* 203.1-3 (2008), pp. 411–419. ISSN: 09240136. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2007.10.067. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-43849095497{\&}doi=10.1016{\%}252fj.jmatprotec.2007.10.067{\&}partnerID=40{\&}md5=2495bflc41e3b10379b7cf9798ba246c>.
- [76] J.-L. Chenot and E Massoni. "Finite element modelling and control of new metal forming processes." In: *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 46.11 SPEC. ISS. (2006), pp. 1194–1200. ISSN: 08906955. DOI: 10.1016/j.

- ijmachtools.2006.01.031. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33746227482{\&}doi=10.1016{\%}252fj.ijmachtools.2006.01.031{\&}partnerID=40{\&}md5=6036494314bbfe7a5bb3132a57f800ce>.
- [77] P. Ulysse. “Three-dimensional modeling of the friction stir-welding process.” In: *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 42.14 (2002), pp. 1549–1557. ISSN: 08906955. DOI: 10.1016/S0890-6955(02)00114-1. URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0890695502001141>.
- [78] Paul A. Colegrove and Hugh R. Shercliff. “3-Dimensional CFD modelling of flow round a threaded friction stir welding tool profile.” In: *Journal of Materials Processing Technology* 169.2 (2005), pp. 320–327. ISSN: 09240136. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2005.03.015. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-26444456571{\&}doi=10.1016/j.jmatprotec.2005.03.015{\&}partnerID=40{\&}md5=80c99e494bb30f726450660dfc782ddahttp://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0924013605004802>.
- [79] B Roy, A Chaudhuri, and S C Saha. “On the issues of asymmetry observed in heat transfer and material flow in friction stir welding.” In: *Advanced Materials Research* 622 (2013), pp. 289–293. ISSN: 10226680. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMR.622-623.289. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84872730575{\&}doi=10.4028{\%}252fwww.scientific.net{\%}252fAMR.622-623.289{\&}partnerID=40{\&}md5=d6f9b264649a84f2bafcf01a2b235bab>.
- [80] H.a Wang, P.A.a Colegrove, and J.F.b Dos Santos. “Numerical investigation of the tool contact condition during friction stir welding of aerospace aluminium alloy.” In: *Computational Materials Science* 71 (2013), pp. 101–108. ISSN: 09270256. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.01.021. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84873966802{\&}doi=10.1016{\%}252fj.commatsci.2013.01.021{\&}partnerID=40{\&}md5=76f157f452121d575e953b4e0dea1248>.
- [81] P.A.a A. Colegrove and H. R. Shercliff. “CFD modelling of friction stir welding of thick plate 7449 aluminium alloy.” In: *Science and Technology of Welding and Joining* 11.4 (2006), pp. 429–441. ISSN: 1362-1718. DOI: 10.1179/174329306X107700. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-34447628405{\&}doi=10.1179/174329306X107700{\&}partnerID=40{\&}md5=6ad70ba20d059a948cc4a0538ad277a0http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1179/174329306X107700>.
- [82] P. Ulysse. “Three-dimensional modeling of the friction stir-welding process.” In: *International Journal of Machine Tools and Manufacture* 42.14 (2002), pp. 1549–1557. ISSN: 08906955. DOI: 10.1016/S0890-6955(02)00114-1. URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0890695502001141>.

- [83] T.a Long, T.U.b Seidel, W.a Tang, and A.P.a Reynolds. “A friction stir welding model using computational fluid dynamics.” In: *TMS Annual Meeting*. Ed. by Bieler T A Radhakrishnan B Jin Z. Beaudoin A. San Diego, CA, 2003, pp. 299–312. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0038048387{\&}partnerID=40{\&}md5=bcf7e9372d6617b20cf9dea8a8c5bc16>.
- [84] T U Seidel and A P Reynolds. “Two-dimensional friction stir welding process model based on fluid mechanics.” In: *Science and Technology of Welding and Joining* 8.3 (2003), pp. 175–183. ISSN: 13621718. DOI: 10.1179/136217103225010952. URL: <http://www.ingentaconnect.com/content/maney/stwj/2003/00000008/00000003/art00003{\%}5Cnhttp://dx.doi.org/10.1179/136217103225010952>.
- [85] S Guerdoux and L Fourment. “A 3D numerical simulation of different phases of friction stir welding.” In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17.7 (2009), p. 75001. URL: <http://stacks.iop.org/0965-0393/17/i=7/a=075001>.
- [86] M.a Esmaily and A.b Shokuhfar. “Numerical simulation of heat transfer in friction stir welding of 7075-T6 aluminum alloy and high carbon steel using Arbitrary Lagrangian Eulerian technique.” In: *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 41.5 (2010), pp. 350–355. ISSN: 09335137. DOI: 10.1002/mawe.201000608. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-77953570007{\&}doi=10.1002{\%}252fmawe.201000608{\&}partnerID=40{\&}md5=efa1d6f3b8f10e467ad0e497b3a4fdb4>.
- [87] Shaowen Xu and Xiaomin Deng. “A study of texture patterns in friction stir welds.” In: *Acta Materialia* 56.6 (2008), pp. 1326–1341. ISSN: 13596454. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.11.016.
- [88] Youliang He, Donald E Boyce, and Paul R Dawson. “Three-Dimensional Modeling of Void Growth in Friction Stir Welding of Stainless Steel.” In: *AIP Conference Proceedings*. Vol. 908. Porto: AIP, 2007, pp. 25–34. DOI: 10.1063/1.2740787. URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-34547511865{\&}doi=10.1063/1.2740787{\&}partnerID=40{\&}md5=5c5a4fd09f56521a182e8c70caa8f734http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.2740787>.
- [89] Olivier Lorrain. “Analyses expérimentale et numérique du procédé de soudage par friction malaxage FSW.” PhD thesis. Arts et Métiers ParisTech, 2010. URL: <https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00515112>.
- [90] Wenxiao Pan, Dongsheng Li, Alexandre M. Tartakovsky, Said Ahzi, Marwan Khraisheh, and Moe Khaleel. “A new smoothed particle hydrodynamics non-Newtonian model for friction stir welding: Process modeling and simulation of microstructure evolution in a magnesium alloy.” In: *International Journal of Plasticity* 48 (2013), pp. 189–204. ISSN: 07496419. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.02.013. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749641913000582>.

- [91] I. Alfaro, L. Fratini, E. Cueto, and F. Chinesta. “Numerical Simulation of Friction Stir Welding by Natural Element Methods.” In: *International Journal of Material Forming* 1.SUPPL. 1 (2008), pp. 1079–1082. ISSN: 19606206. DOI: [10 . 1007 / s12289-008-0206-x](https://doi.org/10.1007/s12289-008-0206-x).
- [92] I Terreros. “Modélisation DEM thermo-mécanique d’un milieu continu. Vers la simulation du procédé FSW.” PhD thesis. Arts et Métiers ParisTech, 2013. URL: <http://hal.archives-ouvertes.fr/pastel-00996971/>.
- [93] Michal Krzyzanowski, Peter S. Davies, W. Mark Rainforth, and Bradley P. Wynne. “Combined Discrete/Finite Element Multiscale Approach for Modelling of the Tool/Workpiece Interface during High Shear Processing: Hot Rolling and Friction Stir Welding Applications.” In: *Materials Science Forum* 638-642 (2010), pp. 2622–2627. ISSN: 1662-9752. DOI: [10 . 4028 / www . scientific . net / MSF . 638 - 642 . 2622](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.638-642.2622). URL: [http : / / www . scientific.net/MSF.638-642.2622](http://www.scientific.net/MSF.638-642.2622).
- [94] Michal Krzyzanowski and Mark W. Rainforth. “Advances on Modelling of the Tool/Workpiece Interface during High Shear Processing.” In: *Materials Science Forum* 654-656 (2010), pp. 1634–1637. ISSN: 1662-9752. DOI: [10 . 4028 / www . scientific . net / MSF . 654 - 656 . 1634](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.654-656.1634). URL: [http : / / www . scientific.net/MSF.654-656.1634](http://www.scientific.net/MSF.654-656.1634).
- [95] R. a. Gingold and J. J. Monaghan. “Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars.” In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181.3 (1977), pp. 375–389. ISSN: 0035-8711. DOI: [10 . 1093/mnras/181.3.375](https://doi.org/10.1093/mnras/181.3.375). arXiv: [arXiv:1011.1669v3](https://arxiv.org/abs/1011.1669v3). URL: [http : / / adsabs . harvard . edu / abs / 1977MNRAS . 181 . . 375G{\ % }5Cnhttp : / / adsabs . harvard . edu / full / 1977MNRAS . 181 . . 375Ghttps : / / academic . oup . com / mnras / article - lookup / doi / 10 . 1093 / mnras / 181 . 3 . 375](http://adsabs.harvard.edu/abs/1977MNRAS.181..375G%5Cnhttp://adsabs.harvard.edu/full/1977MNRAS.181..375Ghttps://academic.oup.com/mnras/article-lookup/doi/10.1093/mnras/181.3.375).
- [96] J. Monaghan. “Smoothed Particle Hydrodynamics.” In: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 30.1 (1992), pp. 543–574. ISSN: 00664146. DOI: [10 . 1146 / annurev . astro . 30 . 1 . 543](https://doi.org/10.1146/annurev.astro.30.1.543). URL: [http : / / astro . annualreviews . org / cgi / doi / 10 . 1146 / annurev . astro . 30 . 1 . 543](http://astro.annualreviews.org/cgi/doi/10.1146/annurev.astro.30.1.543).
- [97] A Tartakovsky, G Grant, X Sun, and M Khaleel. “Modeling of Friction Stir Welding (FSW) process with Smooth Particle Hydrodynamics (SPH).” In: *SAE Technical Papers* (2006). DOI: [10 . 4271 / 2006 - 01 - 1394](https://doi.org/10.4271/2006-01-1394). URL: [https : / / www . scopus . com / inward / record . uri ? eid = 2 - s2 . 0 - 84877379703{\ & }doi = 10 . 4271{\ % }252f2006 - 01 - 1394{\ & }partnerID = 40{\ & }md5 = c4b057d148c14551aed98a899d9c44b5](https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84877379703&doi=10.4271%252f2006-01-1394&partnerID=40&md5=c4b057d148c14551aed98a899d9c44b5).
- [98] B. Braikat et H. Lahmam A. Timesli, H. Zahrouni, A. Moufki, V. Favier. “Modélisation du procédé de soudage FSW à l’aide de la méthode SPH.” In: *Colloque National en Calcul des Structures*. 2001.
- [99] N. Sukumar, B. Moran, and T. Belytschko. “The natural element method in solid mechanics.” In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 43.5 (1998), pp. 839–887. ISSN: 00295981. DOI: [10 . 1002 / \(SICI\) 1097 - 0207 \(19981115 \) 43 : 5 < 839 : : AID - NME423 > 3 . 0 . CO ; 2 - R](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19981115)43:5<839::AID-NME423>3.0.CO;2-R). arXiv: [arXiv:1011.1669v3](https://arxiv.org/abs/1011.1669v3). URL: [http : / / doi . wiley . com / 10 .](http://doi.wiley.com/10.1002/(SICI)1097-0207(19981115)43:5<839::AID-NME423>3.0.CO;2-R)

- 1002 / (SICI) 1097-0207(19981115) 43:5{\%}3C839::AID-NME423{\%}3E3.0.CO;2-R.
- [100] Peter A. Cundall. “A computer model for simulating progressive large-scale movements in blocky rock systems.” In: *Proceedings of the Symposium of the International Society of Rock Mechanics, Nancy 2*. 1971, No. 8.
- [101] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. “A discrete numerical model for granular assemblies.” In: *Géotechnique* 29.1 (1979), pp. 47–65. ISSN: 0016-8505. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47. URL: <http://www.icevirtuallibrary.com/doi/10.1680/geot.1979.29.1.47>.
- [102] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean-luc Charles, and Jérôme Néauport. “Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model.” In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 213–216 (2012), pp. 113–125. ISSN: 0045-7825. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2011.12.002>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782511003811>.
- [103] Mohamed Jebahi, Frédéric Dau, Jean-Luc Charles, and Ivan Iordanoff. *Discrete-continuum Coupling Method to Simulate Highly Dynamic Multi-scale Problems: Simulation of Laser-induced Damage in Silica Glass*. Vol. 2. John Wiley & Sons, 2015.
- [104] Patrice Chantrenne and Sebastian Volz. “Thermique à l’échelle submicronique Introduction à la dynamique moléculaire.” In: *Techniques de l’ingénieur Transferts thermiques* base docum.ref. article : be8290 (2002).
- [105] J. E. Jones. “On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas.” In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 106 (1924), pp. 463–477. ISSN: 1364-5021. DOI: 10.1098/rspa.1924.0082.
- [106] G Yoshikawa, F Miyasaka, Y Hirata, Y Katayama, and T Fuse. “Development of numerical simulation model for FSW employing particle method.” In: *Science and Technology of Welding and Joining* 17.4 (2012), pp. 255–263. ISSN: 1362-1718. DOI: 10.1179/1362171811Y.0000000099. URL: <http://www.maneyonline.com/doi/abs/10.1179/1362171811Y.0000000099>.
- [107] I. Terreros, I. Iordanoff, J. L. Charles, D. Coupard, and S. Tcherniaieff. “Discrete Element Method, a tool to investigate complex thermo mechanical behaviour: Application to friction stir welding.” In: *International Journal of Material Forming* 2 (2009), pp. 573–576. ISSN: 19606206. DOI: 10.1007/s12289-009-0433-9.
- [108] Damien André. “Modélisation par éléments discrets des phases d’ébauchage et de doucissage de la silice.” PhD thesis. Université de Bordeaux, 2012. URL: <http://www.theses.fr/2012BOR14501>.
- [109] Mohamed Jebahi. “Discrete-continuum coupling method for simulation of laser induced damage in silica glass.” PhD thesis. 2013. URL: [http://www.iut.univmed.fr/eams2/v2/IMG/pdf/These\\_{\\\_}2009\\_{\\\_}1.pdf](http://www.iut.univmed.fr/eams2/v2/IMG/pdf/These_{\_}2009_{\_}1.pdf).

- [110] Luc Scholtès and Frédéric-Victor Donzé. “A DEM model for soft and hard rocks: Role of grain interlocking on strength.” In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61.2 (2013), pp. 352–369. ISSN: 00225096. DOI: 10.1016/j.jmps.2012.10.005. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022509612002268><http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022509612002268>.
- [111] Taeyoung Lee, Melvin Leok, and N. Harris McClamroch. “Geometric Numerical Integration for Complex Dynamics of Tethered Spacecraft.” In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 70.4 (2010), pp. 379–404. ISSN: 00295981. DOI: 10.1002/nme.1881. arXiv: 1010.1724. URL: <http://arxiv.org/abs/1010.1724>.
- [112] I Terreros, I Iordanoff, and J L Charles. “Simulation of continuum heat conduction using DEM domains.” In: *Computational Materials Science* 69 (2013), pp. 46–52. ISSN: 0927-0256. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.11.021>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025612006805>.
- [113] R.E. Smallman and A.H.W. Ngan. “Precipitation Hardening.” In: *Modern Physical Metallurgy*. Vol. 37. 2. Elsevier, 2014, pp. 499–527. ISBN: 9780082036081. DOI: 10.1016/B978-0-08-098204-5.00013-4. URL: <http://joi.jlc.jst.go.jp/JST.Journalarchive/denkiseiko1925/37.65?from=CrossRef><http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780080982045000134>.
- [114] P. Combrade J. Philibert, A. Vignes, Y. Bréchet. *Métallurgie, du minerai au matériau*. Masson. Paris, 1998.
- [115] C Sigli, L Maenner, C Sztur, and R Shahani. “Phase diagram, solidification and heat treatment of aluminum alloys.” In: *ICAA-6: 6 th International Conference on Aluminium Alloys, Toyohashi, Japan, 5-10 Japan 1998*. 1998, pp. 87–98.
- [116] I N Khan, M J Starink, and J Ll Yan. “A model for precipitation kinetics and strengthening in Al–Cu–Mg alloys.” In: *Materials Science and Engineering: A* 472.1 (2008), pp. 66–74.
- [117] D M Barnett, J K Lee, H I Aaronson, and K C Russell. “The strain energy of a coherent ellipsoidal precipitate.” In: *Scripta Metallurgica* 8.12 (1974), pp. 1447–1450.
- [118] F R N Nabarro. “The influence of elastic strain on the shape of particles segregating in an alloy.” In: *Proceedings of the Physical Society* 52.1 (1940), p. 90.
- [119] Jialin Yan. “Strength Modelling of Al-Cu-Mg Type Alloys.” PhD thesis. University of southampton, 2006.
- [120] R Kilaas and V Radmilovic. “Structure determination and structure refinement of Al<sub>2</sub>CuMg precipitates by quantitative high-resolution electron microscopy.” In: *Ultramicroscopy* 88.1 (2001), pp. 63–72. ISSN: 0304-3991.
- [121] M J Starink, P Wang, I Sinclair, and P J Gregson. “Microstructure and strengthening of Al–Li–Cu–Mg alloys and MMCs: II. Modelling of yield strength.” In: *Acta materialia* 47.14 (1999), pp. 3855–3868.

- [122] M.J. Starink, N Gao, L Davin, J Yan, and A Cerezo. "Room temperature precipitation in quenched Al-Cu-Mg alloys: a model for the reaction kinetics and yield strength development." In: *Philosophical Magazine* 85.13 (2005), pp. 1395-1417. ISSN: 1478-6435. DOI: [10.1080/14786430412331333374](https://doi.org/10.1080/14786430412331333374). URL: <http://dx.doi.org/10.1080/14786430412331333374>.
- [123] E. Hersent, J. H. Driver, D. Piot, and C. Desrayaud. "Integrated modelling of precipitation during friction stir welding of 2024-T3 aluminium alloy." In: *Materials Science and Technology* 26.11 (2010), pp. 1345-1352. ISSN: 02670836. DOI: [10.1179/026708310X12798718274511](https://doi.org/10.1179/026708310X12798718274511).
- [124] S.C. Wang and M.J. Starink. "Precipitates and intermetallic phases in precipitation hardening Al-Cu-Mg-(Li) based alloys." In: 50.4 (2005), pp. 193-215. ISSN: 09506608. DOI: [10.1179/174328005X14357](https://doi.org/10.1179/174328005X14357). URL: <http://dx.doi.org/10.1179/174328005X14357>.
- [125] R. Kampmann and R. Wagner. "KINETICS OF PRECIPITATION IN METASTABLE BINARY ALLOYS -THEORY AND APPLICATION TO Cu-1.9 at % Ti AND Ni-14 at % Al." In: *Decomposition of Alloys: the Early Stages*. 1984, pp. 91-103. ISBN: 9780080316512. DOI: [10.1016/B978-0-08-031651-2.50018-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-031651-2.50018-5). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080316512500185>.
- [126] M Volmer and A Weber. "Nucleus formation in supersaturated systems." In: *Z. Phys. Chem* 119.1926 (1926).
- [127] R Becker and W Döring. "Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen." In: *Annalen der Physik* 416.8 (1935), pp. 719-752. ISSN: 00033804. DOI: [10.1002/andp.19354160806](https://doi.org/10.1002/andp.19354160806). URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/andp.19354160806>.
- [128] Ya B Zeldovich. "On the theory of new phase formation: cavitation." In: *Acta physicochim. URSS* 18.1 (1943), pp. 1-22.
- [129] Josiah Willard Gibbs. "On the equilibrium of heterogeneous substances." In: *American Journal of Science* 96 (1878), pp. 441-458.
- [130] M. Perez, M. Dumont, and D. Acevedo-Reyes. "Implementation of classical nucleation and growth theories for precipitation." In: *Acta Materialia* 56.9 (2008), pp. 2119-2132. ISSN: 13596454. DOI: [10.1016/j.actamat.2007.12.050](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.12.050). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359645408000232>.
- [131] David Godard. "Influences de la précipitation sur le comportement thermomécanique lors de la trempe d'un alliage Al-Zn-Mg-Cu." PhD thesis. 1999.
- [132] Y. Quéré. "Interactions entre lacunes trempées et impuretés dans les métaux et alliages." In: *Journal de Physique et le Radium* 23.10 (1962), pp. 778-786. ISSN: 0368-3842. DOI: [10.1051/jphysrad:019620023010077801](https://doi.org/10.1051/jphysrad:019620023010077801). URL: <http://www.edpsciences.org/10.1051/jphysrad:019620023010077801>.
- [133] B T M Loh and C T Liu. "Vacancies in ternary alloys." In: *Acta Metallurgica* 19.7 (1971), pp. 617-620.

- [134] Emmanuel Hersent. “Modélisation intégrée de la précipitation pour le soudage par friction malaxage d’alliages d’aluminium à durcissement structural.” PhD thesis. École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, 2010.
- [135] Dominique Gendt. “Cinétiques de précipitation du carbure de niobium dans la ferrite.” PhD thesis. 2001.
- [136] Bruno Dubost and Pierre Sainfort. *Durcissement par précipitation des alliages d’aluminium*. Vol. 33. o. 2013, pp. 0–37. ISBN: 7200049069.
- [137] Yutaka S. Sato, Seung Hwan C. Park, and Hiroyuki Kokawa. “Microstructural factors governing hardness in friction-stir welds of solid-solution-hardened Al alloys.” In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 32.12 (2001), pp. 3033–3042. ISSN: 1073-5623. DOI: 10.1007/s11661-001-0178-7. URL: <http://link.springer.com/10.1007/s11661-001-0178-7>.
- [138] Cécile Genevois. “Genèse des microstructures lors du soudage par friction malaxage d’alliages d’aluminium de la série 2000 & 5000 et comportement mécanique résultant.” 2004.
- [139] I.N. Khan, M.J. Starink, and J.L. Yan. “A model for precipitation kinetics and hardening in Al-Cu-Mg alloys.” In: (2008), pp. 66–74. URL: <http://eprints.soton.ac.uk/44652/>.
- [140] Cécile Genevois. “Genèse des microstructures lors du soudage par friction malaxage d’alliages d’aluminium de la série 2000 & 5000 et comportement mécanique résultant.” PhD thesis. INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE, 2004.
- [141] P J Hoogerbrugge and J M V A Koelman. “Simulating microscopic phenomena with dissipative particle dynamics.” In: *Europhysics Letters* 19 (1992), pp. 155–160.
- [142] Igor V Pivkin, Bruce Caswell, and George Em Karniadakisa. “Dissipative Particle Dynamics.” In: *Reviews in Computational Chemistry*. Vol. 27. 1. 2010, pp. 85–110. ISBN: 9780470890905. DOI: 10.1002/9780470890905.ch2. URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/9780470890905.ch2>.
- [143] A. G. McLellan. “Virial Theorem Generalized.” In: *American Journal of Physics* 42.3 (1974), pp. 239–243. ISSN: 0002-9505. DOI: 10.1119/1.1987655. URL: <http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/42/3/10.1119/1.1987655><http://aapt.scitation.org/doi/10.1119/1.1987655>.
- [144] Mohamed Jebahi, Frédéric Dau, Ivan Iordanoff, and Jean-Pierre Guin. “Virial stress based model to simulate the silica glass densification with the discrete element method.” In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* (2017). ISSN: 00295981. DOI: 10.1002/nme.5589. URL: <http://dx.doi.org/10.1002/nme.5589><http://doi.wiley.com/10.1002/nme.5589>.
- [145] M. Ferrante and R.D. Doherty. “Influence of interfacial properties on the kinetics of precipitation and precipitate coarsening in aluminium-silver alloys.” In: *Acta Metallurgica* 27.10 (1979), pp. 1603–1614. ISSN: 00016160. DOI: 10.1016/0001-6160(79)90043-9. URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0001616079900439>.



- [146] G. Liu, G.J. Zhang, X.D. Ding, J. Sun, and K.H. Chen. “Modeling the strengthening response to aging process of heat-treatable aluminum alloys containing plate/disc- or rod/needle-shaped precipitates.” In: *Materials Science and Engineering: A* 344.1-2 (2003), pp. 113–124. ISSN: 09215093. DOI: [10.1016/S0921-5093\(02\)00398-2](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(02)00398-2). URL: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0921509302003982>.
- [147] D Bardel, M Perez, D Nelias, A Deschamps, C.R. Hutchinson, D. Maisonnette, T. Chaise, J. Garnier, and F. Bourlier. “Coupled precipitation and yield strength modelling for non-isothermal treatments of a 6061 aluminium alloy.” In: *Acta Materialia* 62.1 (2014), pp. 129–140. ISSN: 13596454. DOI: [10.1016/j.actamat.2013.09.041](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.09.041). URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2013.09.041><http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S135964541300726X>.

