



HAL
open science

Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu. Vers la simulation du procédé FSW

Iñigo Terreros

► **To cite this version:**

Iñigo Terreros. Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu. Vers la simulation du procédé FSW. Autre. Ecole nationale supérieure d'arts et métiers - ENSAM, 2013. Français. NNT : 2013ENAM0060 . pastel-00996971

HAL Id: pastel-00996971

<https://pastel.hal.science/pastel-00996971>

Submitted on 27 May 2014

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.

2013-ENAM-0060

École doctorale n° 432 : Sciences des Métiers de l'ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité « Mécanique et matériaux »

présentée et soutenue publiquement par

Iñigo TERREROS

le 15 novembre 2013

Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu :

Vers la simulation du procédé FSW

Directeur de thèse: **Ivan IORDANOFF**

Co-encadrement de la thèse: **Jean-Luc CHARLES**

Jury

M. Laurent DUBAR, Professeur, Université de Valenciennes et du Hainaut-Cambrésis
M. Jean-François MOLINARI, Professeur, École Polytechnique Fédérale de Lausanne
M. Charles PINTO, Professeur, University of the Basque Country
M. Olivier CAHUC, Professeur, Université de Bordeaux
M. Lionel FOURMENT, Chargé de recherche au CNRS, Mines ParisTech
M. Mohamed GUESSASMA, Maître de conférences, IUT de l'Aisne
M. Jean-Luc CHARLES, Maître de conférences, Arts et Métiers ParisTech
M. Ivan IORDANOFF, Professeur, Arts et Métiers ParisTech

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examinateur
Examinateur
Examinateur
Examinateur
Examinateur

**T
H
È
S
E**

Αν αιμορραγεί μπορούμε να τον σκοτώσουμε.

Remerciements

Irakurle hori, lan honen orrialdeen artean idazten zailena egin zaidanaren aurrean aurkitzen zara momentu honetan, esker onen orrialdean. Eskertuen artean borrokarik ez egoteko ordena kronologiko bat jarraitzea erabaki dut.

Antolaketa hau jarraituz, lehenik eta behin guraso eta amamei eskerrak eman nahi dizkiet —ordenak hemen ez dauka garrantzirik, ni baino lehenago jaio ziren eta—. Ez dut senideekin jarraitzeko aukera galduko eta nire arreba Patriziaren, lehengusu-lehengusinen eta osaba-izeben txanda dator orain. Eskerrik asko.

Tesia hasi baino lehen ezagutu nituen lagunak aipatu behar ditut orain. Batzuk txikia nintzela ezagutu nituen Laudion, beste batzuk beranduago Bilbon eta Borde-len. . . bakoitzak bere lekua eta momentua aurkitzeko ahalegina egin dezala, lagun onak zareten heinean ez dut uste arazorik edukiko duzuenik ;-)

Tesi hasierara heldu baino lehen, ikastolan nire irakaslea izan zen Iñakiri eskerrak eman nahiko nizkioke, lan hau aurrera eramateko behar izan ditudan erreminta asko bere klaseetan ikasi nituen eta.

Toujours dans le milieu académique, je passe à la langue de Molière pour remercier Ivan et Jean-Luc pour leurs encadrements et Franck pour avoir rendu possible le début de cette thèse.

Berriro euskarara itzuliz, tesi honetan zehar nire pisu-kideak izan diren Héctor eta Lara eskertuko ditut. Era berean, behin tesia hasita egin nituen lagun guztiak eskertzen ditut, batez ere bulego-kideak izandakoak —Lucie, Sébastien, Damien, Younes, Mohamed, Nicolas G. eta Nicolas H.— eta nire besoa sendatu zuen Fabrice.

Bukaerara ailegatzen —gogoratu orden kronologiko bat jarraitzen saiatu naizela— EHUko eta IK4-Lortekeko langileak eskertuko nahiko nituzke FSW saiakuntzak posible egiteagatik, batez ere Egoitz eta Ekaitz.

Azkenik, eta behin defentsa egunera ailegatuta, bertan egon ziren lagunak etortzen zaizkit gogora. Lehen aipatutako gurasoak eta pisu-kideez aparte, Xabi, Txemi, Fibo, José, Ander eta Margaux, eskerrik asko lo ez geratzeagatik. . . edo behintzat saiatzeagatik.

Je remercie finalement l'ensemble des hommes et des femmes du laboratoire, stagiaires, doctorants, post-doctorants, maîtres de conférences, professeurs, personnels techniques et administratifs qui participent à la vie du laboratoire et l'ont rendue agréable et conviviale, ainsi que les membres du jury pour les remarques qu'ils m'ont très aimablement proposé.

Financial support for this research from the Basque Government (Hezkuntza, Unibertsitate eta Ikerketa sailaren Ikertzaileen Prestakuntzarako Programa) is gratefully appreciated.

Table des matières

Table des figures	viii
Liste des tableaux	x
1 État de l'art	1
1.1 Soudage par friction malaxage	1
1.1.1 Introduction	1
1.1.2 Paramètres du procédé	3
1.1.3 Microstructure du cordon de soudure	4
1.1.4 Caractéristiques mécaniques	5
1.1.5 Applications	6
1.1.6 Verrous scientifiques	7
1.2 Simulation numérique du procédé FSW	8
1.2.1 Modèles analytiques	8
1.2.2 Modèles FEM	8
1.2.3 Modèles sans maillage	12
1.2.4 Méthode des éléments discrets	13
1.3 Simulation DEM en mécanique des matériaux continus	16
1.3.1 Algorithmes de recherche de contacts	16
1.3.2 Calcul des interactions entre éléments discrets	18
1.4 Simulation DEM thermique des matériaux continus	21
1.5 Choix	22
1.5.1 Bilan	22
1.5.2 Déroulement	24
2 Simulation DEM thermique d'un matériau continu	25
2.1 Introduction	25
2.2 Description générale de la méthode	26
2.2.1 Application à la conduction de la chaleur	27
2.3 Démonstration mathématique pour domaines 3D cristallins	28
2.3.1 Démonstration	28
2.3.2 Conclusions	30
2.4 Extension aux domaines 3D isotropes	31
2.4.1 Détermination des propriétés locales des éléments	31
2.4.2 Interactions entre l'élément discret et ses voisins	34
2.5 Validation du modèle thermique	35
2.5.1 Poutre cylindrique & source de chaleur	35
2.5.2 Plaque avec source de chaleur dynamique	37

2.6	Conclusions	39
3	Simulation DEM mécanique d'un matériau continu élasto-plastique	43
3.1	Force issue d'un potentiel	44
3.1.1	Loi de base	44
3.1.2	Problématique	45
3.1.3	Loi simplifiée	46
3.1.4	Essais sans endommagement	47
3.1.5	Modèle d'endommagement	48
3.1.6	Essais avec endommagement	52
3.2	Force issue d'un lien microscopique	57
3.2.1	Contrainte équivalente de Von-Mises	58
3.2.2	Critère de plasticité	59
3.2.3	Algorithme général	61
3.2.4	Calibration	61
3.2.5	Résultats	63
3.3	Conclusions	65
4	Simulation DEM thermo-mécanique d'un matériau continu élasto-plastique	67
4.1	Description de la méthode de couplage utilisée	67
4.2	Essai numérique de compression avec couplage thermo-mécanique	70
4.3	Quelques premiers éléments pour l'application au FSW	73
4.3.1	Essais expérimentaux de soudage FSW	73
4.3.2	Essais numériques de soudage FSW	77
4.4	Conclusions	79
5	Conclusions et perspectives	81
5.1	Conclusions	81
5.1.1	Choix de la méthode	81
5.1.2	Thermique continue	81
5.1.3	Mécanique continue	82
5.1.4	Couplage thermo-mécanique	82
5.2	Perspectives	83
A	Géométrie des outils FSW	85
A.1	Exemples d'outils FSW	85
B	Méthode LCM	89
C	Adimensionnement des paramètres mécaniques	93
C.1	Longueur	93

C.2	Masse	93
C.3	Temps	93
C.4	Paramètres adimensionnés	94
C.4.1	Raideur de contact	94
C.4.2	Force maximale d'attraction	94
C.4.3	Distance maximale d'interaction	94
C.4.4	Vitesse	94
C.4.5	Coefficient de dissipation	95
D	Modification du potentiel Lennard-Jones	97
D.1	Bilan	98
D.1.1	Remarques	98
E	Boucle de calcul principale	99
E.1	Force issue d'un potentiel	99
E.2	Force issue d'un lien microscopique	100
F	Plan de l'outil FSW	101
	Bibliographie	105

Table des figures

1.1	Outil de soudage par friction malaxage	1
1.2	Schéma du procédé de soudage par friction malaxage	2
1.3	Différentes dispositions possibles	4
1.4	Matériau sous compression, formulation eulérienne	9
1.5	Matériau sous compression, formulation lagrangienne	10
1.6	Matériau sous compression, formulation ALE	11
1.7	Force issue d'un potentiel de Lennard-Jones	19
1.8	Couplage DEM-CNEM	23
2.1	Domaine discret parallélépipédique	27
2.2	Domaine 3D du type « cubique primitif » & particule avec 6 voisins	29
2.3	6 éléments discrets autour d'un élément discret i	30
2.4	Polyèdre platonique tracé autour d'un élément discret	32
2.5	S_t^{nd} & f_{vi} en fonction du nombre de voisins	32
2.6	Cellule cristalline du type « cubique primitif »	34
2.7	Poutre cylindrique utilisée dans les calculs	35
2.8	Courbes analytique & DEM	36
2.9	Schéma de la plaque utilisée dans les simulations	37
2.10	Dispersion relative en fonction du nombre d'éléments discrets	39
2.11	Évolution de la température au point A	40
2.12	Évolution de la température au point B	40
2.13	Évolution de la température au point C	41
3.1	Éléments discrets soumis à un potentiel de Lennard-Jones	44
3.2	Force issue d'un potentiel de Lennard-Jones	45
3.3	Simplification de la loi d'interaction originale	46
3.4	Simulation DEM d'essais de chargement cyclique	48
3.5	Simulation DEM d'essais de traction	49
3.6	Domaine discret	50
3.7	Détail du domaine discret	50
3.8	Barycentre des éléments discrets en interaction	51
3.9	Éléments discrets & modification de la loi de comportement	52
3.10	Algorithme général	53
3.11	Essais de traction avec différentes éprouvettes	54
3.12	Essais de traction avec variation de c_d	55
3.13	Essais de traction avec variation de K	56
3.14	Essais de traction avec variation de γ	56
3.15	Essais de traction avec variation de δ_{lim}	56

3.16	Essais de traction avec variation de C	56
3.17	Essais de chargement cyclique avec endommagement	57
3.18	Poutre d'Euler-Bernouilli avec les repères liés aux éléments discrets	58
3.19	Schéma du critère de plasticité utilisé	60
3.20	Algorithme général	62
3.21	Algorithme de calcul de forces	63
3.22	Résultats de la calibration	64
3.23	Essai à rupture	65
3.24	Essai de chargement cyclique	66
4.1	Travail mécanique transformé en énergie thermique	68
4.2	Algorithme de calcul de la chaleur générée	69
4.3	Représentation graphique des résultats expérimentaux et numériques	71
4.4	Comportement macroscopique des éprouvettes	72
4.5	Position relative des thermocouples	74
4.6	Montage expérimental	75
4.7	Détail du pion de l'outil utilisé	75
4.8	Températures aux points de contrôle de la plaque « A »	76
4.9	Températures aux points de contrôle de la plaque « B »	76
4.10	Températures aux points de contrôle de la plaque « C »	77
4.11	Élément discret polyédrique	78
4.12	Pénétration du pion	79
A.1	Outils FSW	85
A.2	Outils FSW	86
A.3	Outils FSW	87
A.4	Outils FSW	88
B.1	Domaine discrétisé en cellules	90
B.2	Cellules avec contacts potentiels	91
F.1	Plan de l'outil FSW	101
F.2	Températures des 4 premiers points de contrôle	102
F.3	Températures des 4 derniers points de contrôle	103

Liste des tableaux

2.1	Valeurs calculées de S_t^{nd} et f_{vi} en fonction du nombre de voisins	33
2.2	Caractéristiques de la poutre	36
2.3	Caractéristiques de la plaque	37
2.4	Caractéristiques de la source de chaleur	38
2.5	Coordonnées des points de contrôle	38
3.1	Variables de l'équation générale	43
3.2	Paramètres mécaniques	47
3.3	Valeurs des paramètres	47
3.4	Conditions limites des différents essais	48
3.5	Valeurs des paramètres	52
3.6	Valeurs des paramètres	55
3.7	Caractéristiques mécaniques de l'AA 2024-T351	63
3.8	Conditions limites des différents essais	65
4.1	Comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques	70
4.2	Coefficients de Johnson-Cook	72
4.3	Conditions des essais	74

État de l'art

1.1 SOUDAGE PAR FRICTION MALAXAGE

1.1.1 Introduction

Les difficultés trouvées au moment de réaliser des soudures performantes avec des aluminiums utilisés dans l'industrie aéronautique — notamment les aluminiums fortement alliés de la famille 2xxx et 7xxx — ont toujours été un verrou pour l'utilisation des procédés de soudage dans l'assemblage des structures aéronautiques [MM05]. L'utilisation des techniques conventionnelles de soudage avec ce type d'aluminiums provoque une diminution de la tenue mécanique qui est causée par la porosité et la structure dendritique formée dans le joint soudé [GDDC05] entre autres.

Le procédé appelé « soudage par friction malaxage » — *Friction Stir Welding*, FSW en anglais — a été inventé par *The Welding Institute* en 1991 [TNN+92]. Le principe de ce procédé est simple : un outil rotatif composé d'un pion et d'un épaulement (voir : figure 1.1) est introduit entre les pièces à souder. Le mouvement

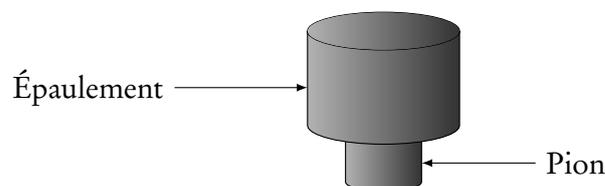


FIGURE 1.1 – Outil de soudage par friction malaxage.

de rotation et de translation de l'outil provoque l'échauffement du matériau. Cet échauffement n'est pas uniquement dû à la friction entre l'outil et la matière mais aussi à la déformation plastique de cette dernière. Cette montée locale de température rend en état « pâteux » le matériau autour de l'outil et cela facilite

son malaxage. L'écoulement complexe alors créé [LMB⁺01] produit un joint « en état solide » composé de grains équiaxiaux de faible taille qui possèdent des bonnes propriétés mécaniques qui seront décrites dans le paragraphe 1.1.4.

La figure 1.2 montre un dessin schématique du procédé. Dans ce schéma l'outil

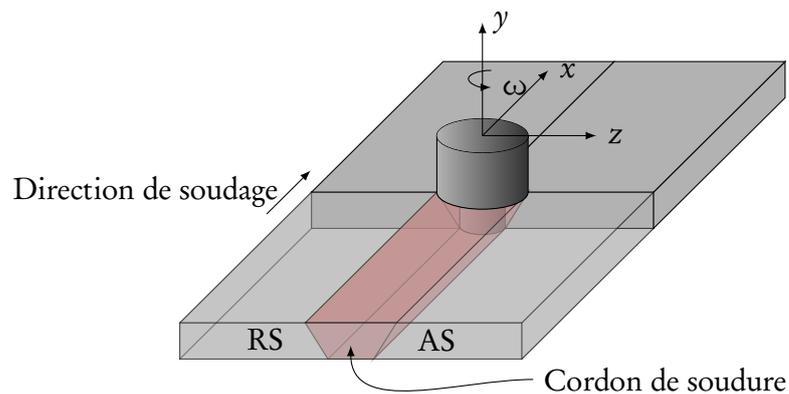


FIGURE 1.2 – Schéma du procédé de soudage par friction malaxage.

avance selon la direction de l'axe x et tourne autour de l'axe y à une vitesse de rotation ω . La dissymétrie du champ de vitesses par rapport au plan xy est la cause de la différenciation de deux zones. La première zone, où la vitesse tangentielle de l'outil a la même direction que la vitesse d'avance, est appelée AS — *advancing side* en anglais —. La deuxième zone, où les directions de la vitesse d'avance et de la vitesse tangentielle de l'outil sont opposées, est appelée RS — *retreating side* en anglais.

MISHRA *et al.* classent les avantages du procédé FSW en trois groupes [MM05] :

1. Avantages métallurgiques

- Procédé en phase solide.
- Faible distorsion de la pièce.
- Stabilité dimensionnelle et répétabilité.
- Éléments d'alliage conservés.
- Bonnes propriétés métallurgiques dans le joint soudé.
- Faible taille de grain.
- Faible fissuration.

2. Avantages environnementaux

- Élimination des gaz.
- Élimination du besoin de nettoyer les surfaces.
- Élimination des dissolvants.
- Élimination des matières ajoutées.

3. Avantages énergétiques

- Réduction de la quantité de matière utilisée.
- Consommation réduite d'énergie : 97,5% de réduction par rapport au soudage laser.
- Diminution de la consommation de carburant des véhicules à cause de sa réduction de poids.

1.1.2 Paramètres du procédé

Les propriétés mécaniques finales du joint soudé sont déterminées par la microstructure et l'état de précipitation du matériau après le soudage. Pour un matériau donné, cette microstructure et cet état de précipitation sont définis par l'évolution du flux de matière et du champ de températures pendant le procédé de soudage. Selon le classement fait par MISHRA *et al.* [MM05], les paramètres du procédé qui ont le plus d'influence sur le flux de matière et le champ de températures, donc, les paramètres qui ont le plus d'influence sur l'état final du joint soudé, sont au nombre de trois : la géométrie de l'outil, les réglages du procédé et la disposition des joints à souder.

GÉOMÉTRIE DE L'OUTIL : Il existe une grande variété de géométrie d'outil (voir : annexe A). Les différences les plus remarquables se trouvent principalement dans le pion. Celui-ci peut être lisse ou fileté et peut en plus posséder des cannelures qui ont pour but de stimuler le flux de matière autour de l'outil. L'épaulement peut lui-même aussi avoir des variations géométriques comme, par exemple, des spirales gravées, avec le même objectif d'augmenter le flux de matière et le frottement créé.

RÉGLAGES DU PROCÉDÉ : Les paramètres les plus importants dans cette section sont la vitesse de rotation ω et la vitesse d'avance v . Le rapport entre ces deux paramètres va définir si une soudure est « chaude »¹ ou « froide » [AAAE12]. En plus de ces paramètres cinématiques, l'angle d'inclinaison entre l'axe de l'outil et l'axe perpendiculaire au plan des plaques — *tilt* en anglais — peut être considéré comme un autre paramètre du soudage. L'utilité de cette inclinaison de l'outil consiste à empêcher que la matière malaxée par le pion sorte en forme de copeau par l'arrière de l'outil. Finalement, l'échauffement ou refroidissement des structures à souder avant ou après le passage de l'outil doit être aussi classé dans cette section.

1. Les concepts de « soudure chaude » et « soudure froide » utilisés dans l'argot du procédé FSW ne sont pas directement liés à la température mais au rapport ω/v . Pour un processus donné l'augmentation de ce rapport va faire augmenter la chaleur générée, donc la température. Or, les températures obtenues vont varier pour une même valeur de ω/v si l'outil ou le matériau sont différents.

DISPOSITION DES JOINTS À SOUDER : Les dispositions les plus adaptées pour souder deux plaques par friction malaxage sont celles appelées *butt joint* et *lap joint* en anglais. Dans le premier cas, les plaques sont positionnées côté à côté, tout comme dans l'exemple de la figure 1.3a. Dans le deuxième cas, par contre, les plaques sont

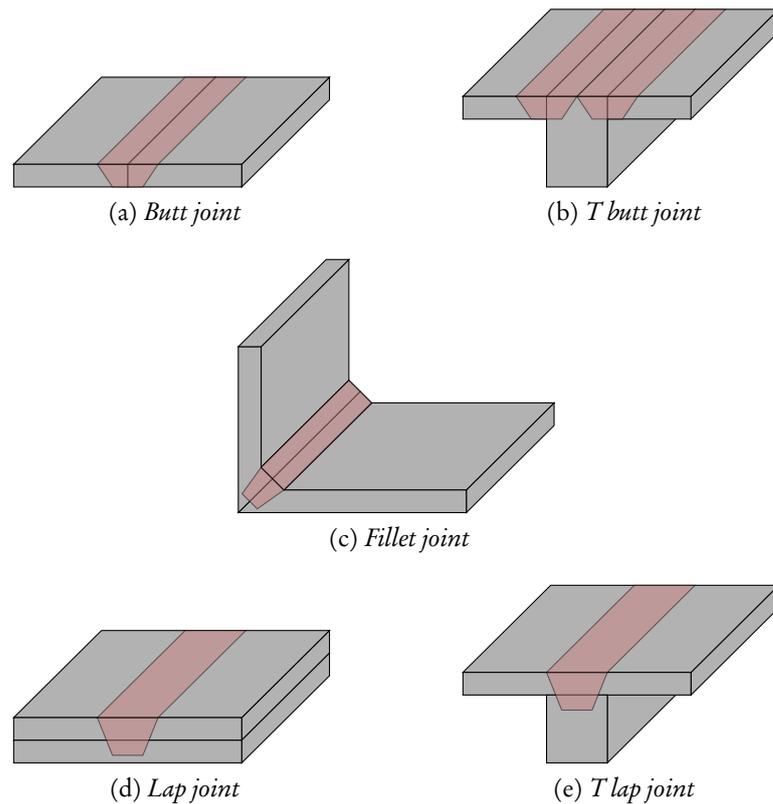


FIGURE 1.3 – Différentes dispositions possibles.

empilées l'une sur l'autre (voir : figure 1.3d). Malgré la bonne adaptation de ces deux dispositions au soudage par friction malaxage, il est aussi envisageable de souder des plaques en disposition angulaire ou en forme de « T » (voir : figures 1.3b, 1.3c et 1.3e), entre autres.

1.1.3 Microstructure du cordon de soudure

Le cordon de soudure peut être divisé en trois parties en fonction de sa microstructure : le noyau — *nugget zone* en anglais —, la zone affectée thermo-mécaniquement — *thermo-mechanically affected zone*, TMAZ en anglais — et la zone affectée thermiquement — *heat-affected zone*, HAZ en anglais.

NOYAU : Le noyau est la zone qui se trouve au milieu du joint soudé. Cette zone a subi des intenses déformations plastiques et un fort réchauffement thermique dû au passage du pion. Cela a comme résultat une microstructure composée de grains recristallisés dynamiquement et de faible taille. Dans le cas particulier des alliages d'aluminium 2024, cette taille varie typiquement entre $2 \mu\text{m}$ et $3,9 \mu\text{m}$ [NBP00, CM03]. Des microstructures plus fines peuvent être obtenues en traitant thermiquement les plaques. Selon les expériences de [BLM⁺99], un refroidissement préalable à -30°C peut faire diminuer la taille des grains jusqu'au $0,8 \mu\text{m}$ en moyenne.

ZONE AFFECTÉE THERMO-MÉCANIQUEMENT : Cette zone se trouve des deux côtés du noyau. Elle est soumise à de forts gradients de température et de déformation, mais le taux de déformation n'est pas suffisamment élevé pour provoquer une recristallisation dynamique. Sa microstructure est donc composée par des grains fortement déformés autour du noyau. L'état de précipitation de la zone affectée thermo-mécaniquement est différent à l'état de précipitation du matériau de base à cause de la dissipation et recréation de précipités causée par le cycle thermique.

ZONE AFFECTÉE THERMIQUEMENT : Au contraire des zones décrites précédemment, la bande qui sépare la zone affectée thermo-mécaniquement et le matériau de base ne subi pas des déformations plastiques. La géométrie des grains de cette zone est alors la même que celle des grains du matériau de base. Or, son état de précipitation varie dû aux effets des gradients de température subis et ses propriétés mécaniques sont en général plus faibles.

1.1.4 Caractéristiques mécaniques

Dans les essais de traction réalisés avec des éprouvettes en aluminium 2024-T3 de 1,6 mm et 4 mm d'épaisseur, le rapport entre la contrainte maximale à rupture des éprouvettes soudées et celle des éprouvettes du matériau de base oscille entre 0,82 et 0,98 [BBD⁺99]. Il est remarquable que ces résultats soient nettement meilleurs que ceux obtenus avec les méthodes de soudage conventionnelles dans d'autre type de matériaux.

En ce qui concerne le comportement en fatigue des joints soudés avec le procédé FSW, les éprouvettes peuvent montrer une dégradation de ses propriétés de 50% par rapport au matériau de base après 10^7 cycles [BI99]. Néanmoins, cette étude montre aussi que les éprouvettes qui ont été fraisées pour améliorer son état de surface possèdent des performances en fatigue comparables à celles du matériau de base. Ceci est vrai pour les cas où la direction du cordon de soudure est perpendiculaire à la direction du chargement mais aussi pour les cas où ces deux directions sont parallèles.

Les travaux qui analysent le comportement sous corrosion des joints soudés par FSW se centrent sur l'influence de la microstructure et l'état de précipitation finale sous ce type de conditions. Ce travaux ne sont pas concernés par les possibles optimisations des paramètres de fabrication pour obtenir une métallurgie plus résistante à la corrosion. Par contre, ils ont mené au développement de traitements pour augmenter la tenue des structures soudées. Pour donner un exemple, le travail de [HDW⁺01] fait une étude de l'effet que différents traitements laser ont dans la microstructure et la tenue en corrosion du joint FSW.

1.1.5 Applications

Le fait de pouvoir souder des alliages d'aluminium des séries 2xxx et 7xxx, largement utilisés dans l'industrie aéronautique, ouvre une vaste plage de possibilités pour optimiser la construction de structures aéronautiques. Il y a des travaux qui analysent, par exemple, le soudage du fuselage des avions [TBLB00, Loh00, Loh01], la réparation des fissures dans les ailes [She00], le soudage de la structure des moteurs de fusée [BvDKS00] ou le soudage de la base des ailes [Mar01]. Comme mentionné dans l'introduction, les procédés de soudage par fusion conventionnels provoquent une série de défauts dans ce type de matériaux dû à la montée excessive de la température. En conséquence, la plupart des assemblages des structures aéronautiques sont faits en utilisant des procédés de rivetage. Cela augmente la complexité et le coût des processus, la quantité de matière utilisée et le poids final de la structure. L'application du soudage par friction malaxage peut permettre la modification des démarches classiques de fabrication afin de réduire les coûts et augmenter les performances des avions. L'industrie de l'armement a elle aussi des intérêts liés au procédé FSW, notamment à cause des bonnes propriétés balistiques de certains des aluminiums des séries 2xxx et 7xxx déjà mentionnés [BB00]. Le FSW n'intéresse pas que les industries de l'aéronautique et de l'armement. Ainsi, les industries de l'automobile et navale, de même que les industries ferroviaires et nucléaires suivent de plus en plus près son évolution. Malgré l'intérêt croissant de ces dernières, c'est grâce au support économique des deux premières que le FSW a pu être initialement développé.

De plus, toute une nouvelle gamme de procédés différents sont en train de se développer autour du concept du soudage par friction malaxage. Cette famille d'applications est connue comme *Friction Stir Processing* en anglais. Le principe de base du FSP est d'utiliser un outil FSW pour modifier la microstructure des matériaux métalliques et ainsi améliorer ses caractéristiques mécaniques. Parmi les applications déjà mises en place on trouve la création de matériaux composites à matrice métallique [ALH⁺12, SMM⁺12], le raffinement de la microstructure des alliages d'aluminium obtenus par moulage [SA12] et la création de matériaux à

comportement superplastique sous grands taux de déformation [MPB12], entre autres.

1.1.6 *Verrous scientifiques*

Les enjeux économiques de la mise en place au niveau industriel du procédé de soudage par friction malaxage ont été exposés dans les paragraphes précédents. En résumé, il s'agit d'un procédé peu coûteux et écologique qui permet l'amélioration des liaisons en terme de performances mécaniques. Cette augmentation des performances mécaniques va, à son tour, permettre d'alléger les structures soudées. Cela a comme conséquence directe la diminution des coûts en matières premières. Les économies réalisées à cause de la simplification du processus d'assemblage de la structure ne sont pas négligeables non plus. Or, pour pouvoir propager l'utilisation du procédé FSW à tous les domaines de l'industrie il existe la nécessité de qualifier les assemblages et les joints obtenus. Cette nécessité de qualification est d'autant plus évidente dans le cas de l'industrie aéronautique, où les certifications sont faites suivant des standards très exigeants.

Malgré les nombreuses applications industrielles du FSW déjà mises en place, son développement reste largement empirique et basé sur une grande connaissance expérimentale du procédé. Néanmoins, l'observation de façon dynamique des phénomènes qui ont lieu à l'intérieur du matériau pendant le soudage pose des problèmes expérimentaux difficiles à résoudre, principalement à cause du passage de l'outil. De nos jours l'observation de l'intérieur du cordon de soudure est toujours faite *post mortem*. Cela permet de connaître précisément la microstructure et l'état de précipitation du joint pour prédire la tenue mécanique du joint obtenu. Mais le fait de ne pas connaître d'une façon détaillée l'histoire des sollicitations pendant le procédé rend difficile la prédiction des propriétés métallurgiques qui vont être obtenues pour des paramètres du procédé donnés.

Ainsi, il est possible d'étudier l'influence de la métallurgie dans les propriétés mécano-chimiques du joint car il est possible de corréler les données métallurgiques obtenues *post mortem* avec les résultats des essais expérimentaux. Il est, par contre, plus difficile d'étudier l'influence des réglages du procédé sur la métallurgie qui va être obtenue car il n'est guère facile d'accéder à l'histoire des sollicitations mécaniques et thermiques d'une façon dynamique. Cela explique la nature éminemment empirique du développement du procédé FSW.

C'est dans cet aspect que la simulation numérique peut jouer un rôle décisif pour faciliter la compréhension et le développement du procédé. L'observation numérique des phénomènes qui ont lieu à l'intérieur du joint lors du passage de l'outil va permettre une étude plus approfondie de la sensibilité des caractéristiques métallurgiques aux paramètres du procédé. La maîtrise de l'influence des réglages du procédé va permettre l'obtention de joints plus homogènes et en conséquence va

faciliter la qualification du procédé nécessaire pour répandre celui-ci dans différents domaines de l'industrie.

1.2 SIMULATION NUMÉRIQUE DU PROCÉDÉ FSW

L'évolution de la simulation numérique du procédé de soudage par friction malaxage comprend quelques approches analytiques et un grand nombre d'approches numériques basées sur la mécanique des milieux continus :

1.2.1 Modèles analytiques

Un des premiers essais de modélisation du procédé FSW est le modèle analytique de RUSSELL *et al.* [RS99] présenté l'année 1999. Il s'agit, selon l'auteur, d'un « simple exercice de modélisation ». Dans cette première approche, la chaleur générée est estimée analytiquement à partir d'une équation simple qui dépend des paramètres cinématiques et des propriétés du matériau. La puissance thermique due au frottement de l'épaulement est estimée entre 1 et 2 kW tandis que celle issue du frottement du pion et de la déformation plastique du matériau est estimée entre 20 et 40 W pour un aluminium 2014-T6 avec une vitesse d'avance de 1,33 m/s, une vitesse de rotation de 44 rad/s et un rayon d'épaulement de 12,5 mm. Pour simplifier encore plus le modèle, la source de chaleur est considérée ponctuelle. Après avoir calculé l'évolution du champ de températures, les auteurs calculent analytiquement la concentration des précipités et la microdureté du matériau à partir de deux équations.

Cette première approche est rapide et flexible mais, malgré toutes les hypothèses simplificatrices prises en compte, ce modèle est capable de prédire quantitativement le profil de microdureté de la zone affectée thermiquement et la vitesse maximale d'avance pour un matériau donné. Ces résultats sont loin de résoudre toute la problématique liée au procédé FSW car, par exemple, les prédictions dans deux des zones les plus importantes du joint — le noyau et la zone affectée thermomécaniquement — sont clairement insuffisantes. Ces résultats ont été cependant très encourageants, car ils ont montré que la simulation du procédé FSW pouvait donner quelques résultats utiles et exploitables même si le modèle utilisé reste très simple.

1.2.2 Modèles FEM

Depuis sa création, la méthode des éléments finis [ZT'Z05] — *Finite Element Method*, FEM en anglais — a été largement utilisée par les scientifiques et ingénieurs pour traiter un grand nombre de problèmes différents. Les problèmes liés au soudage

par friction malaxage n'en font pas exception et dès les premières tentatives de modélisation du procédé FSW la méthode FEM a été la base de plusieurs travaux.

Vue l'importance que le flux de matière autour du pion a dans l'état final du joint soudé (voir : § 1.1.2), certains auteurs ont choisi une formulation eulérienne du problème, qui est plus adaptée à la modélisation des écoulements (voir : figure 1.4). En 2000 BENDZSAK *et al.* [BNS00] ont utilisé le logiciel *Stir3D* pour analyser

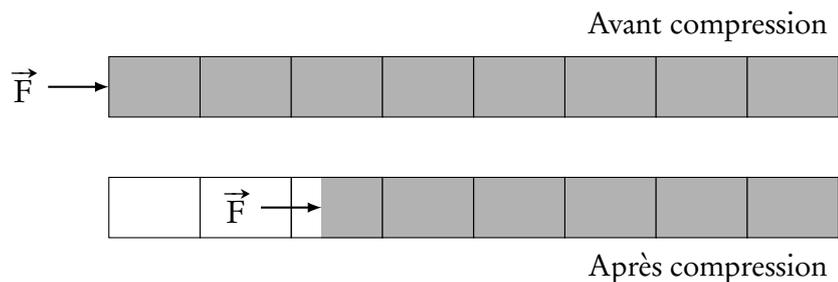


FIGURE 1.4 – Matériau sous compression, formulation eulérienne.

le champ de vitesses, déformations, températures et forces subies par l'outil en utilisant cette démarche. Il faut rappeler que dans la formulation eulérienne les nœuds sont bloqués dans toutes les directions. Cela oblige à faire un remaillage à chaque pas de temps car l'outil se déplace et cela fait varier la position des nœuds de l'interface outil-matière. La même année, COLEGROVE *et al.* [CPGM00] ont essayé de diminuer ces problèmes que le mouvement du pion provoquait dans le maillage eulérien en divisant le domaine en deux parties : une partie qui traitait l'état thermique global et une autre partie qui s'occupait de l'état thermique et du flux de matière locale avec un système de coordonnées local fixé à l'outil pour éviter le remaillage. Cette démarche résout les problèmes de remaillage évoqués précédemment, mais une autre caractéristique de la formulation eulérienne — le fait que la matière puisse couler au travers du maillage — pose des problèmes de contact entre l'outil et la matière qui vont rester irrésolus malgré cette tentative d'amélioration. Plus précisément, ce modèle impose des conditions limites qui ne permettent pas l'écoulement de la matière au travers de la surface du pion. Cette surface délimite le domaine eulérien et elle reste inaltérée par rapport au système de coordonnées local. Cela empêche le matériau de se détacher de l'outil car un tel détachement entraînerait la variation de la géométrie du domaine donc un remaillage.

Il y a des auteurs qui, de leur côté, ont choisi une formulation lagrangienne du problème (voir : figure 1.5). Parmi les travaux de ceux qui ont fait ce choix on peut distinguer deux familles. Il y a un premier type de travaux qui en général s'intéressent moins aux problèmes de malaxage et cherchent à simuler entre autres l'évolution du champ de températures et la distribution des contraintes résiduelles, toujours à une certaine distance de la zone de passage de l'outil [ZC04]. Le deuxième type de

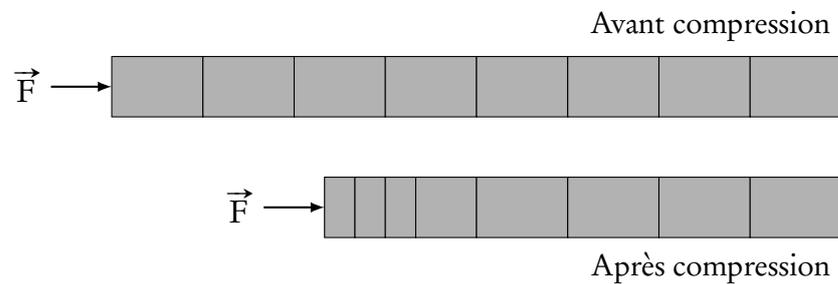


FIGURE 1.5 – Matériau sous compression, formulation lagrangienne.

travaux s'intéressent aussi à cette zone, mais ils étudient en plus la zone du noyau et utilisent un remaillage intensif pour s'adapter aux grandes déformations [CM06, BHSF06]. Il faut remarquer que ce remaillage est une potentielle source de diffusion d'erreur numérique dans les résultats. Le travail de HEURTIER *et al.* [HJD⁺06], publié en 2006, représente une exception et mélange une méthode analytique avec la FEM lagrangienne pour contourner les difficultés de cette dernière dans la zone déformée plastiquement : d'abord le champ de vitesses est calculé analytiquement à partir des équations utilisées dans la mécanique des fluides classique. Puis, la chaleur générée dans le procédé est calculée à partir du champ de vitesses obtenu. Les sources de chaleur considérées sont le frottement de l'épaulement contre la surface du matériau et la déformation plastique. La chaleur apportée par le frottement du pion est donc négligée. Les deux sources de chaleur retenues sont traitées indépendamment, même si les auteurs considèrent qu'elles sont couplées dans la réalité. Jusqu'ici le modèle est purement analytique, et cela lui permet de faire une description des phénomènes d'écoulement qui ont lieu au cœur du joint. Une fois la chaleur générée calculée, le champ de températures est calculé à l'aide de la méthode des éléments finis à formulation lagrangienne. Les profils de température et de microdureté obtenus avec ce modèle correspondent quantitativement à des essais expérimentaux menés avec des plaques de 10 mm d'épaisseur en alliage d'aluminium 2024.

En faisant une synthèse des problématiques trouvées dans les deux paragraphes précédents, il est possible de dire que :

- Les modèles eulériens sont adaptés à la simulation des flux mais ils gèrent avec difficultés la conservation de la masse aux interfaces.
- Les modèles lagrangiens ne souffrent pas de ce problème de conservation de masse mais ils doivent être intensivement remaillés afin de s'adapter aux flux, ce qui génère des erreurs numériques.

De plus, malgré toutes les avancées dans la connaissance du procédé — températures atteintes à l'intérieur du cordon, champ de vitesses, etc. — que les travaux déjà présentés ont apporté, aucune des démarches n'est capable de prédire certains

phénomènes liés au malaxage comme le manque de remplissage de matière derrière l'outil connue comme « effet tunnel », par exemple.

L'impossibilité de simuler des phénomènes décrits quelques lignes plus haut due aux problèmes liés à l'exclusivité d'utilisation d'une des deux formulations ont mené à certains auteurs à l'utilisation de la méthode ALE — *Arbitrary Lagrangian Eulerian* en anglais — pour simuler le FSW (voir : figure 1.6).

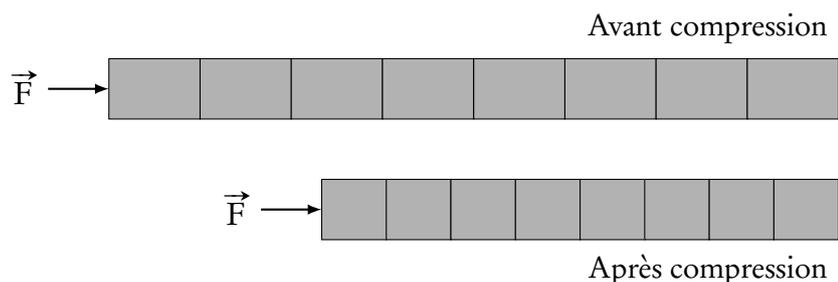


FIGURE 1.6 – Matériau sous compression, formulation ALE.

Le travail de SCHMIDT *et al.* [SH05] présenté en 2005 montre un modèle 3D thermo-mécanique du procédé FSW qui utilise la formulation ALE. Le logiciel utilisé est le code commercial de calcul par éléments finis *Abaqus/Explicit*. L'objectif de ce travail est précisément de trouver les conditions du procédé qui assurent un bon remplissage de la cavité créée lors du passage de l'outil pour éviter l'effet tunnel. Le comportement du matériau est décrit selon une loi de Johnson–Cook et les forces de contact sont modélisées avec la loi de Coulomb. Cet aspect fait que les résultats numériques sont très sensibles au coefficient de friction choisi et représente une des principales motivations pour explorer d'autres méthodes de simulation qui soient naturellement adaptées à gérer ce type de phénomènes (voir : § 1.2.4). Les données numériques de création de chaleur et des forces dans l'axe de l'outil correspondent aux résultats expérimentaux réalisés dans des alliages d'aluminium 2024-T3. Une variation de ce travail a été implémentée dans le logiciel *Forge3* en 2005 par GUERDOUX *et al.* [GF05]. Le but étant aussi de prendre en compte le mouvement des surfaces libres pour prédire les forces de plongée et la création de défauts derrière le passage de l'outil. Trois ans plus tard, en 2008, une amélioration des travaux de SCHMIDT et GUERDOUX a été présentée par ZHANG *et al.* [ZZ08]. Dans cette amélioration ZHANG arrive à simuler la déformation plastique à la surface des plaques soudées, phénomène qui échappait aux modèles de SCHMIDT et GUERDOUX.

Malgré tous les efforts, la formulation ALE n'arrive pas à se débarrasser complètement les problèmes liés au maillage. Pour donner un exemple, le mouvement des surfaces libres est négligé dans les zones à formulation eulérienne [GF07]. Ceci explique que certains auteurs se soient tournés vers les méthodes sans maillage — *meshless methods* en anglais —.

1.2.3 Modèles sans maillage

La première simulation numérique du FSW avec une méthode sans maillage est celle de ALFARO *et al.* [ARP⁺09] présentée au congrès ESAFORM 2009. La méthode utilisée dans ce modèle est plus précisément la méthode des éléments naturels [SMB98] — *Natural Element Method*, NEM en anglais —. 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. Les auteurs sont alors forcés de supposer dans ce travail que le pion et le matériau sont parfaitement collés, en surestimant ainsi la déformation créée à cause du contact outil-matière.

Une autre méthode sans maillage utilisée dans la simulation du procédé FSW est celle connue comme SPH ou *Smoothed Particle Hydrodynamics* en anglais [LL03], conçue à l'origine pour traiter des problèmes d'astrophysique [Luc77]. La première utilisation de cette méthode pour la simulation du FSW date de 2006 [TGSK06], où les auteurs ont développé un, selon leurs mots, « modèle simpliste » pour étudier son adéquation au procédé. Dans le travail présenté au congrès CSMA 2011 [TZM⁺11] TIMESLI *et al.* ont proposé un modèle 2D thermo-mécanique. Le contact entre les particules du matériau et celles de l'outil est géré par les équations de continuité et de quantité de mouvement qui imposent un gradient de pression qui empêche la pénétration. Ceci n'est pas le modèle d'interaction le plus correct entre différents corps car la chaleur est obtenue à partir du champ de vitesses et non à partir du frottement créé au contact outil-matière.

BILAN : Les difficultés les plus importantes rencontrées pour simuler le soudage par friction malaxage peuvent être résumées ainsi :

- Les modèles analytiques ne sont pas adaptés pour prendre en compte l'ensemble des phénomènes mis en jeu dans le procédé. De plus, il existe un fort couplage entre les différents phénomènes présents, fait qui rend encore plus difficile l'utilisation de ce type de modèles.
- Les modèles FEM doivent faire face à deux difficultés majeures : le maillage du domaine et la modélisation des contacts. Il y a des travaux qui ont essayé de résoudre le premier aspect avec l'adoption de la formulation ALE, mais il n'y a pas de tentative qui ait pour cible la résolution du problème de la gestion des contacts avec la FEM.
- Les modèles sans maillage, par définition, sont libres des problèmes liés au maillage. Or, la formulation continue sur laquelle ces modèles sont basés trouve à peu près les mêmes problèmes que les méthodes FEM au moment

de faire face à la gestion des discontinuités telles que la présence de contacts entre différentes surfaces libres.

ALTERNATIVE : Même si elle n'a jamais été appliquée à l'étude du FSW, une autre méthode sans maillage connue comme « méthode des éléments discrets » [Cun71] — *Discrete Element Method* ou DEM en anglais — s'est révélée être une bonne alternative à la FEM et à la NEM pour résoudre localement les problèmes liés à la phénoménologie présente dans le procédé de soudage par friction malaxage. Cette méthode a désormais montré son adaptation naturelle à la fracture des matériaux [TP07], au couplage des systèmes multi-corps [FE07, FGE07] et au contact sec en présence du troisième corps [RIRB08], entre autres, ce qui fait la différence par rapport aux modèles présentés jusqu'à présent. En outre, la tentative préliminaire d'une simulation du procédé FSW avec la méthode des éléments discrets présentée au congrès ESAFORM 2009 [TIC+09] a montré que cette méthode peut jouer un rôle important dans le processus de compréhension du soudage FSW. Plus de précisions sur les caractéristiques de cette méthode vont être maintenant présentées :

1.2.4 Méthode des éléments discrets

Afin de bien comprendre l'origine et les motivations de la méthode des éléments discrets et ses différences par rapport aux méthodes continues déjà mentionnées, les principales caractéristiques de chaque méthode vont être exposées suivant le schéma proposé par MUNJIZA dans son livre *The combined finite-discrete element method* [Mun04].

FORMULATION GÉNÉRALE DES PROBLÈMES CONTINUS : Regardée à l'échelle du grain, la microstructure des matériaux utilisés en ingénierie est discontinue. Or, la quantité de matériau normalement utilisée dans les applications fait que les propriétés des matériaux peuvent être homogénéisées et considérées continues à l'échelle macroscopique. Une bonne illustration de cela est obtenue en regardant la masse m du matériau. Dans les approches continues le rapport masse sur volume est considéré comme une fonction continue ρ appelée masse volumique qui est représentée par l'équation

$$\rho = \frac{dm}{dV}$$

où V est le volume. C'est à dire, la distribution discontinue de la masse à l'échelle microscopique a été remplacée par une fonction continue ρ à l'échelle macroscopique.

Cette hypothèse de continuité est valide tant que la dimension caractéristique du problème traité reste beaucoup plus grand que la taille des discontinuités.

L'hypothèse de continuité permet de considérer des équation constitutives pour définir les propriétés du matériau et des équations d'équilibre qui vont à leur tour définir la conservation de la masse, de l'énergie, etc.

La combinaison de ces deux types d'équations donne un nombre d'équations aux dérivées partielles — formulation « forte » du problème — ou d'équations intégrales — formulation « faible » du problème —. Cet ensemble d'équations est de manière générale résolu avec des méthodes numériques déjà mentionnées dans la section 1.2 comme la FEM ou la NEM.

FORMULATION GÉNÉRALE DES PROBLÈMES DISCRETS : Pour la majorité de problèmes traités par les ingénieurs, la condition qui permet l'hypothèse du continuum est vraie. Malheureusement, ce n'est pas toujours le cas et l'énoncé suivant en montre un clair exemple :

Donné un seau de volume V rempli de balles de tennis, calculer la masse m totale des balles contenues dans le seau.

Dans ce problème, la dimension de la discontinuité — taille des balles de tennis — n'est pas beaucoup plus grande que la dimension caractéristique du problème *i. e.* la taille du seau. Cela explique pourquoi l'utilisation de l'équation

$$m = \int_V \rho \, dV$$

n'est pas naturellement adaptée à résoudre ce problème.

La solution « physique » du problème — certainement pas la plus rapide — passerait par peser les balles une par une dans une balance puis faire la somme des masses obtenues. Si N est le nombre de balles dans le seau et m_i la masse de chaque balle i , la traduction de ce long exercice de mesure en équation mathématique donne :

$$m = \sum_{i=1}^N m_i \tag{1.1}$$

et c'est exactement ce type d'équations adaptées aux problèmes discontinus qui est utilisé dans la méthode des éléments discrets. Dans l'exemple donné, chaque balle de tennis représenterait un élément discret.

Pour faire une similitude avec les équations constitutives utilisées dans les méthodes continues, dans la méthode des éléments discrets le comportement de l'ensemble du domaine est défini par les lois d'interaction entre les éléments discrets en contact. Contrairement aux méthodes continues, la méthode des éléments discrets n'a pas besoin d'équation de conservation de la masse. Dans la catégorie des méthodes DEM connue comme *smooth* DEM, où les éléments discrets sont indéformables et le schéma d'intégration est explicite, la force résultante subie par

un élément discret qui est en contact avec N_v autres éléments discrets est représentée généralement par l'équation :

$$\vec{F} = \sum_{j=1}^{N_v} \vec{F}_j$$

La similitude de cette équation avec l'équation 1.1 est évidente.

Les méthodes qui traitent les problèmes liés aux domaines discontinus ont été créées dans les années 60 et 70 du XX^e siècle et développées par divers auteurs de différents domaines. Les travaux de CUNDALL [Cun71] étaient liés aux applications géotechniques tandis que les travaux de GREENSPAN [Gre91] se placent à l'échelle quasi-moléculaire, pour donner deux exemples extrêmes en terme d'échelles. Un bilan complet des différents modèles, algorithmes et techniques des méthodes discontinues peut être trouvé dans le livre *Computational granular dynamics* de PÖSCHEL et SCHWAGER [PS05].

La plupart des travaux qui utilisent les méthodes DEM ont traité les procédés utilisant des poudres, notamment pour l'industrie pharmaceutique et pour l'industrie du ciment. Ce type de travaux continuent des nos jours [AA12], mais il ne sont pas proches de la problématique et des besoins d'une simulation FSW. La même chose peut être dite de la problématique abordée par les travaux qui traitent des flux particuliers avec la DEM [Zoh05].

Il y a par contre des travaux plus liés à la phénoménologie du soudage par friction malaxage : en plus des travaux déjà cités qui étudient la fracture des matériaux [TP07] et le couplage des systèmes multi-corps [FGE07] avec la DEM, on en trouve certains qui étudient le frottement et l'usure en présence du troisième corps [ISB02, NI07, FIB07, IBNC08]. L'adaptation à la simulation du contact et du frottement est une des caractéristiques qu'un modèle numérique doit posséder pour simuler correctement le soudage par friction malaxage. En outre, le frottement est une source de chaleur qui modifie le champ de températures. Ceci est un phénomène qui va définir l'état final du joint soudé (voir : § 1.1.2). La création et transmission de la chaleur entre deux corps en contact sec a déjà été étudié par une approche éléments discrets [RIRB08]. Néanmoins, la plupart des problèmes thermo-mécaniques trouvés dans la bibliographie s'intéressent aux matériaux granulaires. VARGAS a publié un certain nombre de travaux liés à ce sujet [VM01, VM02a, VM02b, VM07, VMPD03] mais il n'est pas le seul auteur à l'avoir abordé. MCCARTHY et ROGNON ont aussi développé des méthodes pour prédire et valider l'effet que différents paramètres comme, par exemple, les contraintes ont sur la transmission de la chaleur [REBM10, MJMH10].

À ce stade, le problème issu de l'inadaptation des méthodes continues peut être considéré comme inversé. En effet, la méthode des éléments discrets a été développée et adaptée intensivement pour étudier des phénomènes liés aux matériaux granulaires et aux contacts multi-corps. Ceci lui donne les caractéristiques nécessaires

pour, a priori, être la méthode la plus adaptée à la simulation du procédé de soudage par friction malaxage dans la proximité du contact entre l'outil et la matière. Or, la DEM n'a pas été si largement utilisée dans des problèmes liés aux matériaux continus et elle n'est pas forcément la mieux adaptée. Les paragraphes suivants vont synthétiser la bibliographie existante au sujet de la simulation mécanique et thermique des matériaux continus avec la méthode des éléments discrets.

1.3 SIMULATION DEM EN MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX CONTINUS

La recherche des contacts entre les éléments discrets étant à la base de toutes les méthodes DEM, l'état de l'art des algorithmes de recherche de contacts va être étudié avant d'aborder la simulation DEM en mécanique des matériaux continus.

1.3.1 Algorithmes de recherche de contacts

La recherche de contacts dans une simulation DEM mécanique est une des parties les plus chronophages. Si elle n'est pas optimisée elle peut typiquement prendre plus du 80% du temps de calcul face à moins de 10% du temps pour la résolution des équations de Newton qui sont la base de ces calculs mécaniques [WO99]. Toutes les méthodes de recherche de contacts ont pour but la réduction de la complexité de l'algorithme de recherche, qui, dans le cas d'une recherche « brute » entre toutes les combinaisons possibles d'éléments discrets est de $\mathcal{O}(N^2)$, N étant le nombre d'éléments discrets du domaine. Il est donc très important de trouver une méthode optimisée de recherche de contacts, tout en sachant que les performances de ces méthodes varient fortement en fonction de la dispersion de la taille des éléments discrets du domaine, les conditions limites et la compacité, entre autres.

Dans le travail de OGARKO et LUDING [OL10] les méthodes de recherche de contacts existantes sont classées dans quatre groupes :

1. Méthodes de triage spatial.
2. Méthodes arborescentes.
3. Méthodes basées sur la triangulation de Delaunay.
4. Méthodes de recherche par cellules.

Dans le classement du livre *Computational Granular Dynamics* [PS05] les méthodes arborescentes et les méthodes basées sur la triangulation de Delaunay ne sont pas mentionnées mais, par contre, la méthode basée sur les listes de voisins de Verlet est expliquée.

Voici une succincte explication des méthodes désormais existantes dans la bibliographie :

LISTE DE VOISINS DE VERLET : Le principe de fonctionnement de cette méthode est le suivant : La distance maximale d_{\max} que l'élément discret le plus rapide du domaine va parcourir dans un pas de temps donné est égale à $d_{\max} = v_{\max} \Delta t$. En conséquence, les éléments discrets ne peuvent créer des contacts que avec d'autres éléments discrets qui se trouvent à moins d'une certaine distance. Cela permet d'élaborer une liste de voisins pour chacun des éléments discrets du domaine qui enregistre les éléments qui peuvent provoquer un changement de son état de contact. Ainsi, la vérification des contacts ne se fait que entre les élément discret regardé et les éléments discrets de sa liste de voisins.

Ce type de méthode de recherche de contacts est notamment utilisée dans le contexte de la Dynamique Moléculaire — MD, *Molecular Dynamics* en anglais — [WBN10, WB10]. Les résultats du travail de MUTH *et al.* [MMEL07] montrent que même si cette méthode arrive à diminuer la complexité de l'algorithme à $\mathcal{O}(N)$, elle n'est pas la plus performante pour les domaines 3D compacts et monodisperses.

MÉTHODES ARBORESCENTES : Le principe des méthodes arborescentes est expliqué dans le chapitre 3 du livre *The Combined Finite-Discrete Element Method* [Mun04]. L'espace du domaine discret est divisé en cellules et sub-cellules et un diagramme en forme d'arbre est créé que avec les cellules qui contiennent des éléments discrets. Finalement la détection des contacts est faite à partir de l'information contenue dans le diagramme arborescent. Les comparaisons des différentes méthodes montrées dans le travail de [OL10] montrent que la performance de cette méthode est au dessous de celles des méthodes de triage spatial dans le cas des domaines 3D compacts.

MÉTHODES BASÉES SUR LA TRIANGULATION DE DELAUNAY : Les bases de la recherche de contacts à partir des triangulations de Delaunay sont montrées dans les travaux de FERREZ [FLM00, FL02]. Les deux étapes principales de cette méthode sont :

1. Construire une triangulation de Delaunay T avec tous les éléments discrets du domaine.
2. Trouver les contacts dans les bords de la triangulation T .

Tous les contacts vont se trouver dans les bords de T . Ce fait permet de limiter la recherche et de diminuer la complexité à $\mathcal{O}(N)$.

MÉTHODES DE TRIAGE SPATIAL : La méthode de triage spatial est aussi connue comme AABB — *Axis Aligned Bounding Boxes* en anglais —. Elle est surtout utilisée dans des simulations de solides rigides comme [Bar94]. Elle est très utilisée pour trouver les contacts entre éléments discrets de forme polygonale — le travail de SCHINNER [Sch99] décrit une méthode pour des domaines 2D — parce-qu'elle donne la possibilité d'entourer l'élément dans une boîte virtuelle et faire une première recherche en prenant en compte cette boîte et pas l'élément avec toute la

problématique géométrique qui lui est liée. Cette première recherche permet de diminuer les éléments discrets candidats à être en contact et cela diminue le nombre des coûteuses opérations à faire avec des éléments polyédriques.

Le travail de KOZIARA *et al.* [KB05] teste différentes stratégies pour optimiser la méthode et montre que sa complexité est de $\mathcal{O}(N)$. Les résultats du travail de [MMEL07] montrent que cette méthode est la plus performante dans des domaines 3D compacts et polydisperses. Néanmoins, la méthode AABB est souvent utilisée en combinaison avec des méthodes de recherche par cellules qui vont être expliquées par la suite [THM⁺03, OL12].

MÉTHODES DE RECHERCHE PAR CELLULES : L'idée principale de cette méthode est de diviser le domaine discret en cellules et de limiter la recherche de contacts aux éléments discrets appartenant à des cellules voisines. Cette idée a été conçue par QUENTREC et BROU [QB73] en 1973 pour accélérer les calculs de dynamique moléculaire qui, à l'époque, utilisaient une méthode de recherche de contacts évaluant les $N(N-1)/2$ contacts possibles, N étant le nombre d'éléments discrets du domaine [Ver67]. Le travail de FORTIN et COOREVITS [FC04] montre que la complexité des calculs passe de $\mathcal{O}(N^2)$ à $\mathcal{O}(N)$ en utilisant la méthode dans des domaines 2D et le travail de SANI *et al.* [SFC05] montre l'équivalent pour les domaines 3D.

Le travail de MUTH *et al.* [MMEL07] montre de son côté que dans des domaines polydisperses cette méthode est moins performante que la méthode AABB expliquée dans le paragraphe précédent. Cependant, ce résultat ne prend pas en compte l'optimisation pour les domaines bi-disperses faite par MIO *et al.* [MSSH07] car il a été publié la même année.

Le travail déjà cité de OGARKO et LUDING [OL10] montre la méthode de recherche par cellules dite LCM — *Linked Cell Method* en anglais — comme la plus rapide pour chercher les contacts dans des domaines compacts avec éléments discrets sphériques et petite dispersion de taille. C'est pour cela qu'elle a été retenue pour les calculs menés dans ce travail. Une description approfondie de la méthode LCM est présentée dans l'annexe B.

Un travail plus récent du même auteur [OL12] combine l'idée de faire plusieurs divisions en cellules avec la méthode AABB pour optimiser la méthode LCM pour les domaines polydisperses.

1.3.2 Calcul des interactions entre 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 trouver les forces exercées sur chaque élément discret. L'équation générale qui donne cette force a pourtant la

même allure dans les deux groupes :

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

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 l'élément discret i et l'élément discret j et, finalement, $\dot{\vec{\theta}}$ représente sa vitesse angulaire relative.

FORCE ISSUE D'UN POTENTIEL : Dans le premier groupe de travaux la fonction $\vec{F}_{ij} \left(\vec{\delta}, \dot{\vec{\delta}}, \vec{\theta}, \dot{\vec{\theta}} \right)$ est typiquement issue d'un potentiel d'interaction à distance de la famille des potentiels de Lennard-Jones [Jon24] aussi utilisés dans la dynamique moléculaire — *Molecular Dynamics*, MD en anglais, voir : figure 1.7 —. Les forces

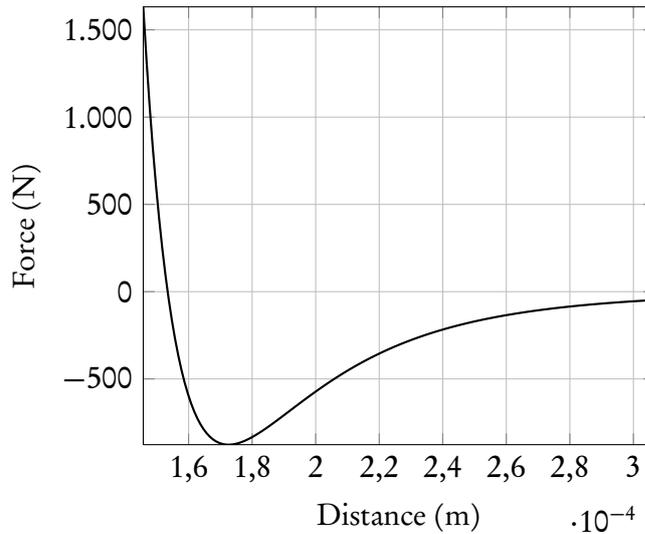


FIGURE 1.7 – Force issue d'un potentiel de Lennard-Jones.

provoquées par les interactions avec les éléments discrets voisins sont sommées et la force résultante \vec{F}_i est utilisée pour calculer l'accélération de l'élément discret et grâce à un algorithme d'intégration numérique obtenir sa nouvelle position et vitesse à l'instant suivant.

Avec cette démarche GREENSPAN est arrivé à simuler la propagation de fissures dans une plaque de cuivre 2D de 8 cm \times 11,4 cm dans son travail déjà cité [Gre91].

Quelques années plus tard, TANG et HORIE ont utilisé la technique 2D créée à l'Université d'État de Caroline du Nord et connue comme DM^2 — *Discrete Mesodynamic Method* — pour simuler le compactage des poudres [THP97, HY99], des impacts sur des matériaux poreux [TL01] et plus récemment des impacts sur des métaux poli-cristallins [HC07]. La DM^2 est aussi utilisée pour modéliser le changement de phase du fer dans le travail de [YH02]. Dans un des travaux de TANG [Tan01], l'auteur fait une extension de la méthode aux trois dimensions pour modéliser l'impact d'une sphère en acier et la rupture d'un cylindre sous pression.

FORCE ISSUE D'UN LIEN MICROSCOPIQUE : Des travaux plus récents ont utilisé une type de loi d'interaction différente pour décrire le comportement du matériau. Dans ces travaux les éléments discrets sont liés par des liens cohésifs de différents genres — poutres, cordes, ressorts-amortisseurs, etc. —. Au lieu d'obtenir directement un vecteur de force en fonction des vecteurs de position, rotation et vitesse relative, ces paramètres vont définir dans le cas le plus général un état de contrainte qui en fonction de la géométrie des liens va être transformé en un torseur d'actions mécaniques qui va agir sur l'élément discret. Les valeurs numériques de ce torseur vont aussi dépendre des propriétés mécaniques des liens qui relient les éléments discrets. Ces propriétés à l'échelle microscopique ont des valeurs qui doivent être trouvées — soit analytiquement, soit empiriquement, soit par le biais d'une calibration — pour obtenir le comportement désiré du matériau à l'échelle macroscopique. Une fois les valeurs du torseur trouvées, les forces qui agissent sur l'élément discrets sont calculées en prenant en compte les géométries du lien et de l'élément discret.

CAMBORDE *et al.* ont travaillé sur des essais de compression statiques et dynamiques avec des matériaux fragiles [CMD00] et TAVAREZ *et al.* ont fait des essais d'impact sur le béton en utilisant des critères énergétiques de rupture [TP07]. Dans les deux cas le modèle utilisé est un modèle 2D. La force appliquée sur chaque élément discret est déduite analytiquement à partir de « micro-raideurs » calculées en fonction des propriétés macroscopiques du matériau à simuler avec les équations de KUSANO [KAA⁺92] ou une modification de ces équations dans le cas de TAVAREZ.

FLEISSNER et GAUGELE utilisent une méthode appelée *granular solid* [FGE07, GFE08] pour simuler des matériaux continus élasto-plastiques avec la DEM. Dans ces travaux les éléments discrets sont liés avec des poutres qui ne transmettent pas des efforts de rotation. L'équation qui décrit la force totale subie par un élément discret i est alors :

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^{N_v} \vec{F}_{ji} \left(\vec{\delta}, \vec{\delta}' \right)$$

La distance entre les barycentres des éléments discrets est utilisée pour calculer une déformation équivalente ϵ . Une loi de comportement élasto-plastique microscopique obtenue empiriquement donne la fonction $\sigma(\epsilon)$ qui va être utilisée pour calculer

la contrainte σ provoquée par la déformation de la poutre. La force issue de l'interaction entre un élément discret i et son voisin j est calculée en fonction de la contrainte obtenue et de la section de la poutre. Des essais numériques de traction uniaxiale et de flexion par choc sur éprouvette entaillée Charpy ont été menés. Les éléments discrets des éprouvettes numériques étaient disposés selon une distribution cristalline du type cubique face centrée. Même si les essais numériques de traction donnent des résultats qui correspondent quantitativement bien aux essais expérimentaux, les auteurs ne montrent pas le comportement à rupture de l'éprouvette numérique.

Au lieu d'obtenir empiriquement la loi de comportement des liens qui relient les éléments du domaine, le travail de HAHN [HWK10] utilise la même loi de comportement que le matériau à simuler. La section et longueur des liens doit alors être modifiée pour obtenir le comportement désiré. Le travail fait une démonstration mathématique de la validité de la méthode pour des coques 2D sous contraintes planes.

Dans un cas plus général, ANDRÉ [AICN12] utilise dans son travail une méthode de calibration pour ajuster les propriétés mécaniques des poutres qui lient les éléments discrets avec le but d'obtenir le bon comportement macroscopique du matériau. Son modèle utilise des poutres cylindriques encastrées aux éléments qui suivent le modèle d'Euler-Bernoulli. Ces poutres travaillent alors en traction, flexion et torsion. Le modèle a été utilisé avec succès pour la simulation des phases d'ébauchage et de doucissage de la silice. Cette démarche a montré en conséquence son adaptation aux problèmes de contact, dans les cas des matériaux fragiles comme la silice.

La combinaison des travaux de calibration et validation de ANDRÉ avec les travaux sur les matériaux élasto-plastiques de GAUGELE et FLEISSNER donnent une piste sur la direction à suivre pour modéliser un matériau élasto-plastique avec une démarche adaptée à la gestion des problèmes de contact.

L'obtention d'un tel modèle permettrait d'adapter la méthode DEM à la modélisation mécanique d'un milieu continu et permettrait donc de simuler dans un même modèle la partie continue et discontinue d'un problème mécanique.

1.4 SIMULATION DEM THERMIQUE DES MATÉRIAUX CONTINUS

Comme mentionné auparavant (voir : § 1.2.4), la méthode des éléments discrets a été utilisée pour simuler les échanges thermiques à travers des matériaux granulaires dans les travaux de VARGAS, RICHARD et ROGNON, entre autres. Malheureusement, seul le travail de HAHN [HSKW11] utilise la DEM pour faire une simulation thermique d'un matériau continu. Dans ce travail, le domaine est créé à partir de polygones de Voronoi. Chaque côté des polygones représente un lien de section et propriétés thermiques connues qui conduit la chaleur. Un des points les

plus importants de ce travail est la constatation que « des anisotropies locales de la conductivité à une échelle petite n'influent pas le flux de chaleur global ».

Ce travail est restreint pour les domaines en deux dimensions. Cela signifie qu'une méthode 3D de simulation thermique doit être mise en place pour pouvoir réaliser une simulation du procédé de soudage par friction malaxage avec la méthode des éléments discrets.

1.5 CHOIX

1.5.1 Bilan

Ce premier chapitre a exposé l'importance que le procédé de soudage par friction malaxage peut avoir dans divers processus industriels utilisés à l'heure actuelle. Il a été mentionné que ce procédé est relativement peu coûteux et écologique d'où l'intérêt de le qualifier pour pouvoir le répandre avec la robustesse nécessaire dans divers secteurs de l'industrie manufacturière.

Néanmoins, le développement du FSW reste largement empirique. La plupart des études sont faites à partir des données extraites *post mortem* et cela rend difficile la corrélation des effets que les réglages du procédé ont dans l'état final des joints obtenus. Une observation dynamique des phénomènes qui ont lieu à l'intérieur du cordon de soudure pendant sa formation pourrait être d'une grande utilité pour déterminer l'influence de ces réglages. À la fin du paragraphe 1.1.6 le rôle positif que les simulations numériques peuvent jouer vis à vis de l'optimisation des paramètres du procédé a été souligné.

Dans la section 1.2 l'existant en terme de simulation du procédé FSW a été exposé. En prenant en compte les caractéristiques exposées dans la section 1.1, les paramètres les plus importants du procédé sont l'histoire thermo-mécanique du matériau et le contact entre l'outil et la matière. Ces deux aspects vont définir la microstructure et l'état de précipitation du joint, donc la tenue mécanique et sous corrosion de l'assemblage. Une bonne simulation du procédé doit alors être basée sur une méthode naturellement adaptée à ces aspects. En reprenant ce qui a été dit dans le bilan de la fin du paragraphe 1.2.3, les méthodes utilisées de nos jours souffrent globalement d'une inadaptation au problème du contact outil-matière et il est nécessaire de remarquer que celui-ci est un aspect qui joue un rôle de premier ordre dans le procédé, d'où la grande variété de géométries d'outil présente sur le marché (voir : annexe A).

C'est pour toutes les raisons qui viennent d'être exposées que le choix d'utiliser la méthode des éléments discrets pour créer un modèle numérique du procédé de soudage par friction malaxage a été fait.

Il y a, cependant, certains aspects de la méthode des éléments discrets qui restent à développer. En effet, la modélisation du continuum avec la méthode DEM est un

champ qui n'a pas été suffisamment exploré. Du point de vue mécanique les travaux mentionnés dans la section 1.3 donnent quelques pistes à suivre pour obtenir un modèle mécanique élasto-plastique capable de gérer les grandes déformations et la rupture du matériau. Du point de vue thermique la bibliographie est presque inexistante. Le seul travail qui traite de la conduction de la chaleur dans un milieu continu avec une méthode DEM a été mentionné dans la section 1.4.

Enfin, la méthode DEM est connue pour être très coûteuse en temps de calcul. Pour résoudre le problème du temps de calcul la solution à long terme passe par le couplage entre la méthode des éléments discrets et une méthode continue — des travaux de couplage entre la DEM et la CNEM [YRLC04, YCLR05, CCCL10] ont déjà été menés à l'I2M [JCD⁺13] —. La DEM serait utilisée dans les zones où l'outil entre en contact avec la matière et la méthode continue ailleurs. Un schéma de ce que donnerait un tel couplage est représenté sur la figure 1.8.

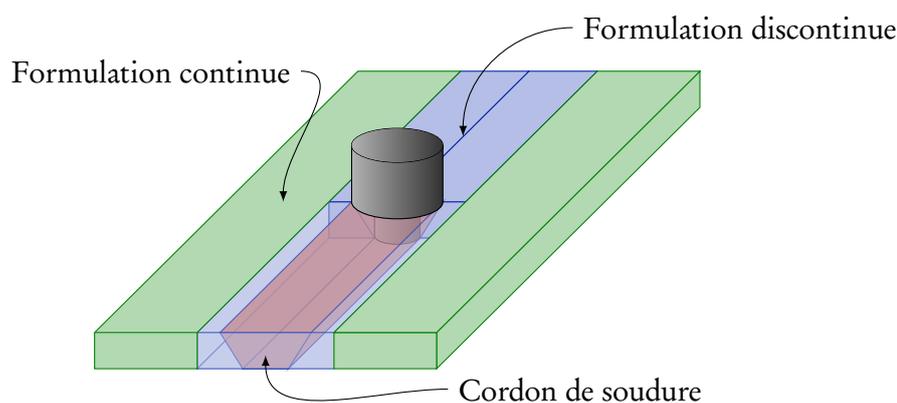


FIGURE 1.8 – Schéma du couplage des méthodes DEM et CNEM pour la simulation du FSW. La partie bleue est modélisée avec une méthode à formulation discontinue comme la DEM et la partie verte est modélisée avec une méthode à formulation continue comme la CNEM.

On va donc dans ce travail proposer une modélisation DEM qui permette de simuler le comportement thermo-mécanique d'un matériau continu élasto-plastique. Tous les éléments discrets utilisés sont des éléments sphériques, qui sont les plus adaptés à la détection des interactions. Les figures 2.1 et 2.7 montrent des exemples de ce type de domaines utilisés dans des calculs.

La plate-forme de calcul par éléments discrets choisie est *GranOO* (voir : www.granoo.org). Cette plate-forme de calcul développée au sein du laboratoire I2M est dédiée aux calculs DEM en dynamique explicite. Elle est capable de mener des calculs multi-physiques et sa conception orientée objet permet de créer facilement une vaste gamme de simulations.

1.5.2 Déroutement

Ainsi, ce document va se structurer comme suit :

- Dans le chapitre suivant une méthode DEM pour simuler la conduction de la chaleur à travers des milieux continus va être présentée.
- Le chapitre 3 traite les aspects mécaniques d'une simulation DEM d'un matériau continu élasto-plastique.
- En suite le document abordera le couplage entre les modèles thermiques et mécaniques exposés.
- Le chapitre final présentera les conclusions et les perspectives ouvertes par le travail développé dans le présent document.

Simulation DEM thermique d'un matériau continu

2.1 INTRODUCTION

L'importance du champ de températures dans les procédés de fabrication est indiscutable. Ce champ ayant une grande influence dans les processus métallurgiques, il peut faire varier très sensiblement les propriétés mécaniques des matériaux fabriqués. La mise au point de simulations thermiques réalistes des procédés de fabrication incluant une prédiction précise du champ de températures est, par conséquent, un point capital pour améliorer le contrôle de la fabrication. Le procédé de soudage par friction malaxage est très sensible au champ de températures généré, comme évoqué dans le premier chapitre de ce document.

La loi de la conduction de la chaleur à travers un matériau continu a été proposée par FOURIER en 1822 [Fou22]. Cette loi est représentée par l'équation 2.1, Θ étant la température du matériau, λ sa conductivité thermique — considérée constante dans les trois dimensions —, c_p sa capacité thermique, ρ_0 sa masse volumique et t le temps.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho_0 c_p} \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} \right) \quad (2.1)$$

Cette équation a des solutions analytiques dans certains problèmes à géométrie simple [Cra56] et pour le reste des cas elle a été largement résolue avec diverses méthodes numériques basées notamment sur une approche continue de la matière. La méthode la plus répandue pour résoudre l'équation de Fourier est certainement la méthode des éléments finis, bien adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles [ZTZ05].

Dans les procédés d'usinage, les régions avec les gradients de température les plus élevés et les flux de chaleur les plus grands sont fréquemment trouvées près

de la zone de contact entre l'outil et la matière. Cette zone est considérée comme étant la plus active en termes de création et diffusion de chaleur. En conséquence, une bonne modélisation des phénomènes thermiques de cette zone est la base d'une bonne simulation dans le reste du matériau. Malheureusement, c'est précisément là où les méthodes continues mentionnées précédemment trouvent des difficultés pour faire face aux problèmes de contact et aux grandes déformations et gradients de température que subissent ces zones (voir : page 12).

Il a été écrit dans la section 1.4 (voir : page 21) que sur le plan thermique, la plupart des travaux menés avec la DEM concernent des matériaux granulaires, qui constituent les matériaux pour lesquels la méthode a été conçue. Les travaux les plus importants dans ce domaine étudient la conduction de la chaleur dans des milieux granulaires [VM01] et les effets des fluides inter-granulaires [VM02b], des contraintes mécaniques [VM02a, REBM10] et des dilatations thermiques [VM07], ainsi que la création des flux thermiques [RIRB08]. Le travail de HAHN [HSKW11] peut être considéré comme une exception car il s'agit d'une preuve mathématique de la conduction de la chaleur en 2D dans un matériau continu modélisé avec un domaine DEM.

Les paragraphes suivants décrivent une méthode pour simuler la conduction de la chaleur dans un matériau continu 3D, tout en se basant sur un domaine DEM adapté aux calculs mécaniques pour faciliter le couplage thermo-mécanique.

2.2 DESCRIPTION GÉNÉRALE DE LA MÉTHODE

La figure 2.1 montre un domaine discret parallélépipédique créé à partir d'éléments discrets sphériques de différentes tailles. La répartition de la taille des éléments sera détaillée dans la section 2.4.

Dans le cas de la méthode DEM explicite, il y a deux étapes à suivre pour calculer la variation d'une grandeur à l'intérieur d'un domaine discret :

- Dans une première étape, on calcule la variation de la grandeur subie par chaque élément discret du fait de son interaction avec chacun de ses voisins et on stocke cette variation.
- Dans un second temps, toutes ces variations sont sommées pour obtenir la variation totale de la grandeur concernée dans l'élément discret.

La variation d'une grandeur M dans un élément discret i , ΔM_i , peut alors être décrite mathématiquement comme suit,

$$\Delta M_i = \sum_j^{N_v} \Delta m_{ij} \quad (2.2)$$

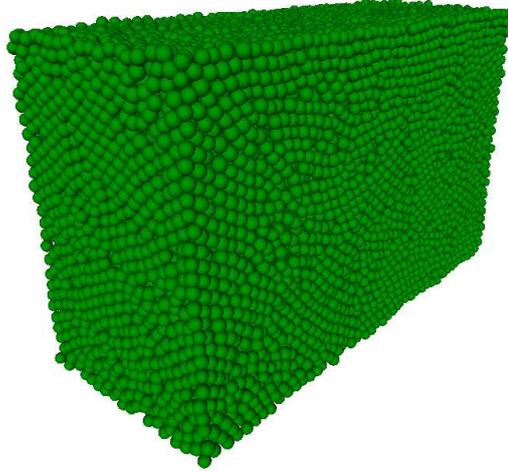


FIGURE 2.1 – Domaine discret parallélépipédique isotrope compact. Tous les éléments discrets dont il est composé ont une forme sphérique, avec un tirage aléatoire des diamètres selon une distribution donnée (uniforme ici).

Δm_{ij} , étant la variation de la grandeur dans l'élément discret i due à son interaction avec l'élément discret j . N_v est le nombre de voisins de l'élément discret i (voir : équation 1.1, page 14).

2.2.1 Application à la conduction de la chaleur

La puissance thermique échangée entre deux éléments à un instant donné, W_{ij} , est représentée avec l'équation :

$$W_{ij} = S_t \lambda \frac{(\theta_j - \theta_i)}{d_{ij}} \quad (2.3)$$

où S_t représente la surface de transmission entre les deux éléments, $(\theta_j - \theta_i)$ la différence de température, λ la conductivité thermique du matériau et d_{ij} la distance entre les centres des éléments discrets.

En outre, la variation de l'énergie thermique de l'élément discret i à cause de son interaction avec l'élément j , ΔE_{ij} , peut être calculée en fonction de la variation de température de l'élément considéré :

$$\Delta E_{ij} = c_p \rho_d V_i \Delta \theta_{ij}$$

Dans cette dernière équation c_p représente la capacité thermique du matériau, ρ_d la masse volumique de l'élément discret — à ne pas confondre avec ρ_0 , masse

volumique du matériau ρ_d , V_i le volume de l'élément et $\Delta\theta_{ij}$ la variation de la température provoquée par son voisin j .

La différence d'énergie thermique de l'élément i dans un laps de temps Δt est égal à la puissance thermique transférée :

$$\frac{\Delta E_{ij}}{\Delta t} = W_{ij} = \frac{c_p \rho_d V_i \Delta\theta_{ij}}{\Delta t} \quad (2.4)$$

Si le pas de temps Δt est suffisamment petit pour considérer $(\theta_j - \theta_i)$ constant, les équations 2.3 et 2.4 peuvent être combinées pour obtenir la variation de la température de l'élément discret i à cause de son interaction avec son voisin j :

$$\Delta\theta_{ij} = \frac{(\theta_j - \theta_i) S_t \lambda}{d_{ij} c_p \rho_d V_i} \Delta t \quad (2.5)$$

Finalement, l'équation 2.2 est utilisée pour obtenir la variation totale de la température de l'élément discret i après un pas de temps Δt :

$$\Delta\Theta_i = \sum_j^{N_v} \Delta\theta_{ij} = \sum_j^{N_v} \frac{(\theta_j - \theta_i) S_t \lambda}{d_{ij} c_p \rho_d V_i} \Delta t$$

2.3 DÉMONSTRATION MATHÉMATIQUE POUR DOMAINES 3D CRISTALLINS

Le travail de HAHN *et al.* [HSKW11] décrit une méthode pour prédire le champ de températures dans un domaine discret 2D formé par des éléments discrets hexagonaux. La méthode qui va être décrite dans cette section va, de son côté, généraliser ces résultats pour des domaines discrets 3D créés à partir de sphères de même taille suivant une distribution cristalline du type « cubique primitif » (voir : figure 2.2).

2.3.1 Démonstration

La figure 2.2 montre l'exemple d'un domaine décrit dans le paragraphe précédent. Afin de remplir tout le volume du domaine, chaque élément discret représente un cube de matériau continu avec un volume égal à $(2R)^3$.

L'équation 2.5 doit subir quelques modifications pour s'adapter au cas particulier traité et représenter l'équation de la chaleur dans le milieu continu englobant les éléments discrets :

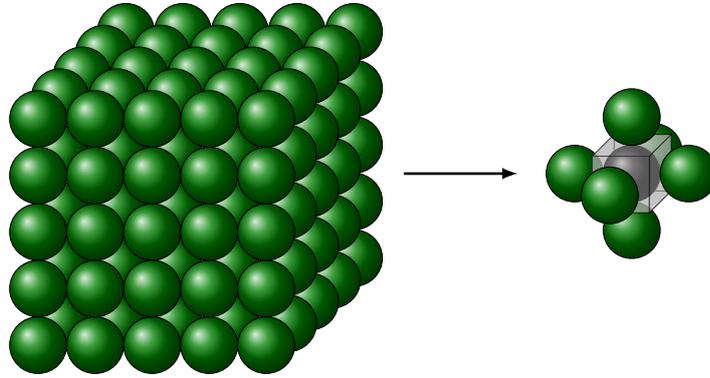


FIGURE 2.2 – Domaine cristallin 3D du type « cubique primitif » et exemple de particule avec 6 voisins. Chaque élément discret représente un volume de $2R \times 2R \times 2R = 8R^3$.

La première des modifications concerne la masse. Chaque élément discret doit avoir la même masse que le volume continu qu'il représente. Cela veut dire que la masse volumique de l'élément discret, ρ_d , doit être majorée afin de compenser le vide existant entre les éléments. Cette majoration est donnée par le rapport entre la masse volumique du matériau continu, ρ_0 , et sa fraction volumique, f_{vi} . Dans le cas analysé, cela donne :

$$\rho_d = \frac{\rho_0}{f_{vi}} = \frac{V_{\text{cub}}}{V_{\text{sph}}} \rho_0 = \frac{8R^3}{4/3 \pi R^3} \rho_0 = \frac{6}{\pi} \rho_0 \quad (2.6)$$

De plus, si la surface de transmission est considérée égale à la surface de la facette du cube qui englobe l'élément discret ($S_t = 4R^2$), et la distance entre les éléments égale au côté du cube ($d_{ij} = 2R$), l'équation 2.5 devient :

$$\begin{aligned} \Delta\theta_{ij} &= \frac{(\theta_j - \theta_i) S_t \lambda}{d_{ij} c_p \rho_d V_{\text{sph}}} \Delta t \\ &= \frac{(\theta_j - \theta_i) (4R^2) \lambda}{(2R) c_p \rho_0 (V_{\text{cub}}/V_{\text{sph}}) V_{\text{sph}}} \Delta t \\ &= \frac{\lambda}{c_p \rho_0} \frac{(\theta_j - \theta_i)}{(2R)^2} \Delta t \end{aligned}$$

Si l'équation 2.2 est appliquée en considérant les 6 éléments discrets qui se trouvent autour d'un élément discret i (voir : figure 2.3), le résultat obtenu est :

$$\Delta\Theta_i = \sum_j \Delta\theta_{ij} = \frac{\lambda}{c_p \rho_0} \frac{(\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 + \theta_4 + \theta_5 + \theta_6 - 6\theta_i)}{(2R)^2} \Delta t$$

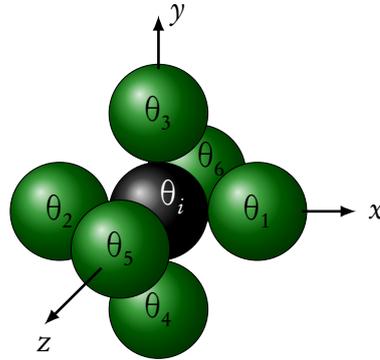


FIGURE 2.3 – 6 éléments discrets autour d'un élément discret i .

On peut réarranger cette dernière équation pour obtenir :

$$\Delta\Theta_i = \frac{\lambda}{c_p \rho_0} \left[\left(\frac{\theta_1 + \theta_2 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) + \left(\frac{\theta_3 + \theta_4 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) + \left(\frac{\theta_5 + \theta_6 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) \right] \Delta t$$

qui correspond exactement à la discrétisation de l'équation 2.1 par un schéma numérique de type « différences finies centrales », avec un intervalle de discrétisation égal à $2R$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial t} &= \frac{\lambda}{c_p \rho_0} \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} \right) \\ &\approx \frac{\lambda}{c_p \rho_0} \left[\left(\frac{\theta_1 + \theta_2 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) + \left(\frac{\theta_3 + \theta_4 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) + \left(\frac{\theta_5 + \theta_6 - 2\theta_i}{(2R)^2} \right) \right] \end{aligned}$$

2.3.2 Conclusions

Dans le cas des domaines discrets modélisés par des sphères de même taille placées selon une distribution cristalline du type « cubique primitif », l'utilisation de l'équation 2.2 pour décrire la conduction de la chaleur à travers un matériau continu correspond exactement à la discrétisation par différences finies si :

- La masse de chaque élément discret est égale à la masse du volume continu qu'il représente.
- Les surfaces des facettes des polyèdres qui englobent les éléments discrets — un cube dans le cas précédent — sont utilisées comme les surfaces de transmission entre les éléments discrets.

2.4 EXTENSION AUX DOMAINES 3D ISOTROPES

Afin de faciliter le couplage entre la partie mécanique et la partie thermique, il est souhaitable que les deux modèles puissent travailler avec le même domaine discret. Pour assurer une simulation mécanique quantitative d'un matériau solide en utilisant la DEM, les travaux de ANDRÉ *et al.* [AICN12] montrent que le domaine discret doit être compact, homogène et avoir une isotropie géométrique. Pour créer un tel domaine discret, les éléments doivent avoir une répartition de taille de plus de 15% autour du rayon moyen R_m [LS01, AICN12]. Les rayons des éléments discrets utilisés pour les calculs ont été générés en utilisant une loi de dispersion uniforme entre les rayons $R_m(1 - 0,25/2)$ et $R_m(1 + 0,25/2)$ [AICN12, ZZXM11].

Les conclusions du paragraphe 2.3.2 vont être appliquées par la suite pour étendre les résultats obtenus dans le paragraphe 2.3.1 aux domaines discrets isotropes. Dans ce type de domaine, ni les surfaces de transmission entre éléments discrets S_t , ni les masses volumiques des éléments discrets ρ_d ne peuvent être calculées directement. La méthode va alors être adaptée pour être utilisable avec les nouveaux domaines discrets utilisés pour les calculs mécaniques. Dans ce cas l'équivalence mathématique avec une méthode continue ne pourra pas être formellement démontrée. Une comparaison avec une simulation FEM permettra de valider la démarche proposée.

2.4.1 Détermination des propriétés locales des éléments

La masse volumique de l'élément discret ρ_d peut être calculée par le biais de sa fraction volumique. Dans le travail publié en 2010, FREIREICH *et al.* présentent une méthode exacte pour obtenir cette valeur [FKW10]. Néanmoins, la complexité de cette méthode étant trop élevée, une autre démarche va être proposée dans ce document :

Afin de déterminer la fraction volumique représentée par un élément discret et sa surface de transmission avec les voisins dans un domaine isotrope, un polyèdre platonique — polyèdre dont toutes les facettes ont même surface — va être associé à chacun des éléments discrets. Ce polyèdre aura le même nombre de facettes que le nombre de voisins de l'élément. Un exemple d'un tel polyèdre est montré dans la figure 2.4.

La surface de transmission entre les éléments discrets va être calculée à partir des surfaces de ses polyèdres et la fraction volumique représentée par chaque élément sera calculée à partir du nombre de facettes. La méthode suivie est expliquée en détail par la suite.

CALCUL DE LA SURFACE DE TRANSMISSION : Comme expliqué dans le paragraphe précédent, chaque élément discret est associé à un polyèdre platonique en fonction

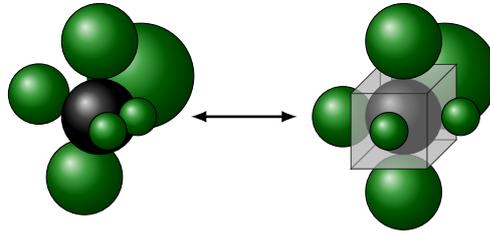


FIGURE 2.4 – Exemple d'un polyèdre platonique tracé autour d'un élément discret ayant 6 voisins.

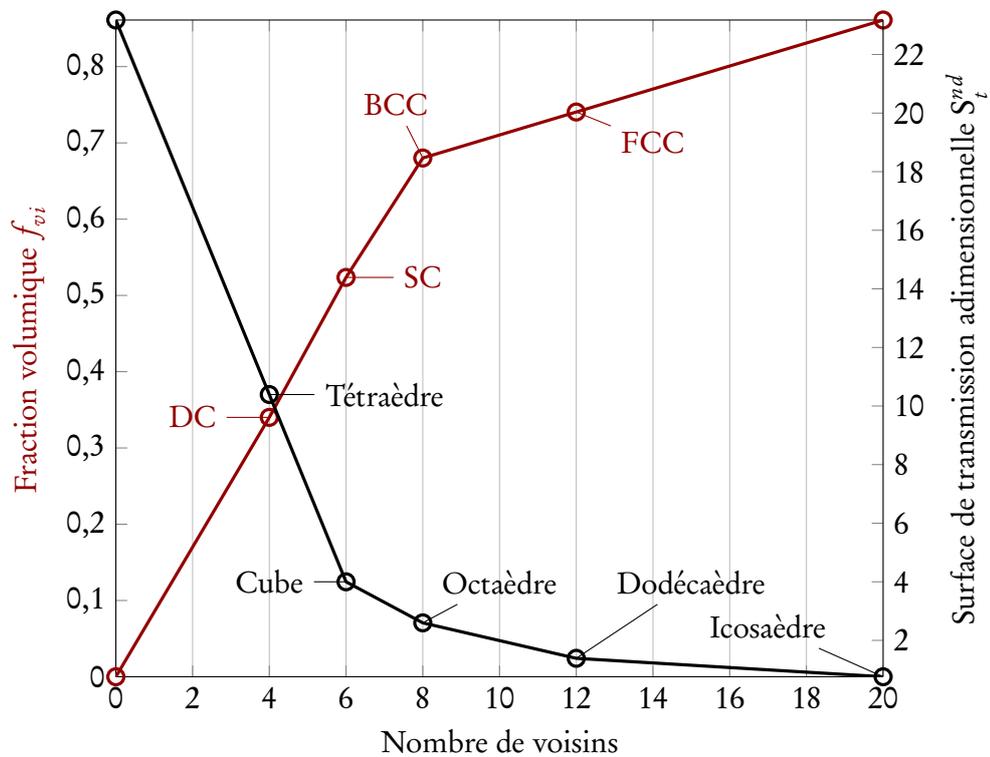


FIGURE 2.5 – S_t^{nd} et f_{vi} d'un élément discret en fonction de son nombre de voisins.

de son nombre de voisins. En effet, le nombre de facettes du polyèdre choisi est égal au nombre de voisins de l'élément. La surface des facettes du polyèdre est alors considérée comme la surface de transmission de l'élément. Dans le cas où un tel polyèdre n'existe pas, la surface est obtenue par interpolation linéaire entre les deux situations les plus proches (voir : figure 2.5). Pour les éléments qui ont moins de quatre voisins la pente de la courbe obtenue par interpolation est considérée constante. Dans l'exemple de la figure 2.4, où l'élément discret regardé — en noir — a 6 voisins, la surface de transmission calculée est $4R^2$. Les valeurs des surfaces de

TABLE 2.1 – Valeurs calculées de S_t^{nd} et f_{vi} en fonction du nombre de voisins.

N_v	S_t^{nd}	f_{vi}	N_v	S_t^{nd}	f_{vi}
1	19,98076	0,08502	11	1,69019	0,72540
2	16,78460	0,17004	12	1,38757	0,74048
3	13,58845	0,25506	13	1,30888	0,75555
4	10,39230	0,34008	14	1,23020	0,77063
5	7,19615	0,43184	15	1,15152	0,78570
6	4,0	0,52359	16	1,07284	0,80078
7	3,29903	0,60188	17	0,99415	0,81586
8	2,59807	0,68017	18	0,91547	0,83093
9	2,29545	0,69525	19	0,83679	0,84601
10	1,99282	0,71032	20	0,75810	0,86109

transmission adimensionnées sont montrés dans la table 2.1. L'adimensionnement est fait en divisant la surface transmission par R^2 .

CALCUL DE LA FRACTION VOLUMIQUE : Une démarche similaire est suivie pour calculer la fraction volumique représentée par chaque élément discret. Cette fois, le nombre de voisins de l'élément — ou le nombre de facettes du polyèdre — est lié au nombre de coordination des structures cristallines connues. Une fois que la structure cristalline de l'élément est déterminée, sa fraction volumique lui est affectée pour des futurs calculs. De la même manière que pour le calcul des surfaces de transmission, dans les cas où le nombre de voisins est impossible à associer à une structure concrète, la valeur de la fraction volumique est obtenue par les biais d'une interpolation linéaire (voir : figure 2.5). Pour le cas où l'élément n'a pas des voisins, la fraction volumique est considérée nulle. De plus, si le nombre de voisins d'un élément discret est plus grande que 12, la pente de la courbe est considérée constante.

Comme exemple, l'élément discret de la figure 2.4 occuperait environ le 52% du volume qu'il représente, valeur qui correspond à la fraction volumique d'une distribution cristalline du type « cubique primitif » (voir : figure 2.6).

REMARQUE : Les méthodes décrites dans les deux paragraphes précédents permettent d'obtenir d'une manière simple, rapide et efficace une surface de transmission adimensionnée S_t^{nd} et une fraction volumique f_{vi} associées à chaque élément discret. La section suivante explique quelques considérations à prendre en compte au moment de calculer les interaction entre les éléments, une fois ces valeurs numériques obtenues.

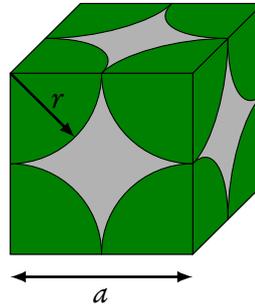


FIGURE 2.6 – Cellule cristalline du type « cubique primitif » – *Simple Cubic*, SC en anglais –.

$$f_v = \frac{a^3}{(4/3)\pi r^3} = \frac{6}{\pi} \approx 0,52359.$$

2.4.2 Interactions entre l'élément discret et ses voisins

En effet, il y a certains détails à respecter au moment de calculer les interactions entre les éléments discrets une fois que les valeurs de S_t et f_{vi} ont été affectées.

Premièrement, la quantité de chaleur échangée entre deux éléments doit être la même indépendamment de l'élément pris comme référence. Cela veut dire que la valeur obtenue par l'application de l'équation 2.3 à un élément i pour calculer son interaction avec l'élément j doit être la même que celle obtenue si l'équation était appliquée à l'élément j pour calculer son interaction avec son voisin i . Mathématiquement :

$$W_{ij} = W_{ji}$$

Pour obtenir ce résultat, et considérant que la conductivité thermique λ est constante pour tous les éléments discrets du domaine, le paramètre S_t de l'élément doit être moyenné dans chaque interaction. Par contre, il est nécessaire de remarquer que le paramètre f_{vi} ne doit pas être moyenné, car il détermine la variation de l'énergie thermique d'un élément i (voir : équation 2.4) et cette grandeur ne dépend que des propriétés de l'élément et pas de ses interactions.

Les surfaces de transmission des éléments i et j sont calculées à partir des valeurs adimensionnelles de la table 2.1 ($S_i = R_i^2 \times S_i^{nd}$, dans le cas de l'élément i). La surface de transmission qui va être utilisée pour calculer l'interaction est alors obtenue en utilisant une moyenne géométrique :

$$S_{ij} = \sqrt{S_i S_j}$$

L'utilisation d'une moyenne arithmétique pourrait aussi être envisagée pour calculer la surface de transmission équivalente selon l'équation $S_{ij} = 0,5(S_i + S_j)$. Néanmoins, les simulations menées montrent que l'erreur commise en utilisant cette moyenne est plus élevée.

En prenant en compte les résultats et les considérations de l'ensemble de cette section, l'équation 2.5 peut être exprimée comme suit, si l'inconnu ρ_d est substitué par ρ_0/f_{vi} :

$$\Delta\theta_{ij} = \frac{(\theta_j - \theta_i) S_{ij} \lambda f_{vi}}{d_{ij} c_p \rho_0 V_i} \Delta t$$

Finalement, la variation de température d'un élément discret i après un pas de temps Δt est calculée à partir de l'équation 2.7 si le domaine discret est isotrope et polydisperse :

$$\Delta\Theta_i = \sum_j^{N_v} \Delta\theta_{ij} = \sum_j^{N_v} \frac{(\theta_j - \theta_i) S_{ij} \lambda f_{vi}}{d_{ij} c_p \rho_0 V_i} \Delta t \quad (2.7)$$

2.5 VALIDATION DU MODÈLE THERMIQUE

Afin de valider la méthode décrite dans ce chapitre, deux simulations différentes ont été réalisées et comparées à des résultats analytiques et numériques.

2.5.1 Poutre cylindrique en contact avec une source de chaleur

Dans la première simulation, le domaine discret cylindrique de la figure 2.7, qui a une température initiale de 298 K, est mis en contact avec une source de chaleur à une température constante de 798 K. L'échange de chaleur avec la source ne se fait que par une des extrémités, le reste des surfaces étant considéré comme adiabatique. La table 2.2 donne les principales caractéristiques de la poutre.

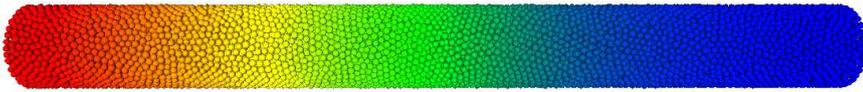


FIGURE 2.7 – Poutre cylindrique utilisée dans les calculs à un instant donné. Le code couleur représente la température. L'extrémité rouge (chauffée) est à 798 K.

Les résultats des calculs réalisés avec la méthode éléments discrets sont comparés aux résultats analytiques de [Cra56] — équation 2.8, avec $\Theta_M = 798$ et $\Theta_m = 298$ — dans différentes étapes de l'échauffement de la poutre. Les courbes issues des deux calculs sont montrées sur la figure 2.8.

$$\Theta(x, t) = \Theta_M - \frac{4(\Theta_M - \Theta_m)}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} \cos \frac{\pi(2n+1)x}{2L} e^{-\frac{\lambda \pi^2 (2n+1)^2 t}{c_p \rho_0 4L^2}} \quad (2.8)$$

2. SIMULATION DEM THERMIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU

TABLE 2.2 – Caractéristiques de la poutre.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
Longueur	2,184	mm
Rayon	0,116	mm
Température initiale	298	K
Masse volumique	2790	kg/m ³
Capacité thermique	880	J/(kg K)
Conductivité thermique	134	W/(m K)
Nombre d'éléments discrets	19465	—
Rayon moyen des éléments discrets	8,998	μm

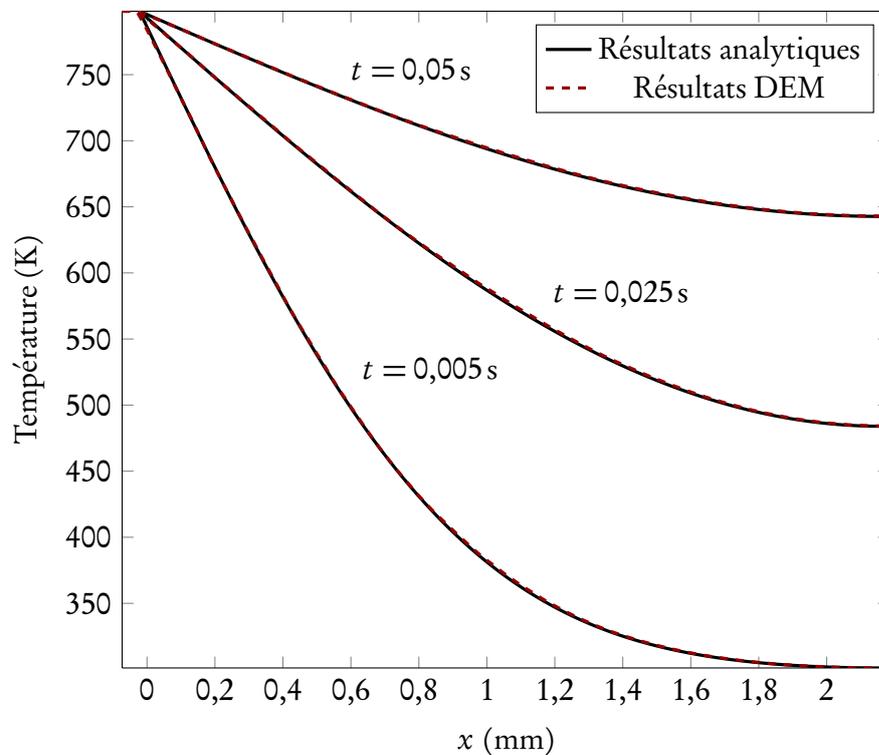


FIGURE 2.8 – Courbes obtenues à partir des résultats analytiques et des résultats DEM.

Les résultats de la simulation avec la méthode des éléments discrets et ceux issus de l'équation analytique sont en bon accord et les courbes obtenues sont pratiquement superposées. Le fait que cette superposition soit trouvée même au début de la simulation où les gradients de température sont élevés, confirme la robustesse de la méthode développée.

2.5.2 Plaque avec source de chaleur dynamique

La deuxième simulation correspond à un cas de calcul se rapprochant du problème thermique du procédé FSW. Une simulation FEM de référence a été calculée avec le logiciel de calcul par éléments finis *Abaqus 6.10*.

La plaque schématisée sur la figure 2.9 a été chauffée avec une source de chaleur cylindrique qui se déplace linéairement à une vitesse de 3,3 mm/s. Les caractéristiques de la plaque sont affichées dans la table 2.3 et celles de la source de chaleur dans la table 2.4.

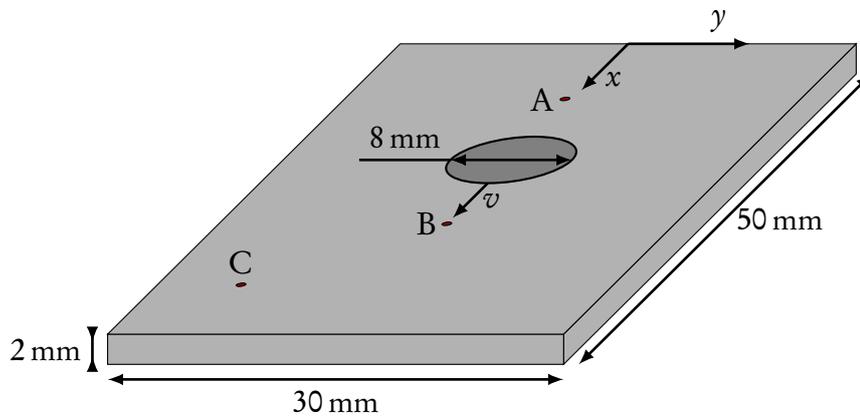


FIGURE 2.9 – Schéma de la plaque utilisée dans les simulations.

TABLE 2.3 – Caractéristiques de la plaque.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
Longueur	50	mm
Largeur	30	mm
Hauteur	2	mm
Température initiale	25	°C
Masse volumique	2790	kg/m ³
Capacité thermique	880	J/(kg K)
Conductivité thermique	134	W/(m K)

La plaque est complètement adiabatique et les températures locales sont mesurées aux trois points de contrôle — nommés A, B et C —, avec la méthode des éléments discrets et avec la méthode des éléments finis. Les coordonnées des points de contrôle sont affichées dans la table 2.5.

2. SIMULATION DEM THERMIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU

TABLE 2.4 – Caractéristiques de la source de chaleur.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
Diamètre	8	mm
Hauteur	2	mm
Vitesse	3,3	mm/s
Puissance thermique	10^{11}	W/m ³
Position x initiale	20	mm

TABLE 2.5 – Coordonnées des points de contrôle.

POINT DE CONTRÔLE	x [mm]	y [mm]
A	9.5	-0.5
B	31.0	0.0
C	41.5	-9.5

Le domaine FEM est maillé avec environ 24000 éléments linéaires de forme cubique de 0,5 mm de côté. Afin de tester la convergence des calculs DEM trois types de domaines ont été créés. Les domaines du premier type sont composés par 1000 éléments discrets avec une dispersion du rayon du 25% selon la méthode décrite dans la section 2.4. Le nombre d'éléments discrets des domaines du deuxième et du troisième type sont 5000 et 20000 respectivement. Afin d'obtenir suffisamment de données pour faire des calculs statistiques 5 domaines de chaque type ont été créés et utilisés, faisant un total de 15 domaines discrets. La courbe d'évolution de la température obtenue dans un point de contrôle donnée varie selon le domaine utilisé.

La dispersion relative δ des résultats des 5 différentes courbes obtenues pour un même point de contrôle et pour un même type de domaine est calculée selon :

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_{\tau=1}^N \left(\frac{\theta_{\tau,max} - \theta_{\tau,min}}{\theta_{\tau,max}} \right)$$

où $\theta_{\tau,max} = \max_{d=1\dots5} \{\theta_{\tau,d}\}$ et $\theta_{\tau,min} = \min_{d=1\dots5} \{\theta_{\tau,d}\}$, $\theta_{\tau,d}$ étant la température à l'instant τ dans le domaine discret d et N le nombre totale de pas de temps de la simulation.

La figure 2.10 montre la valeur de la dispersion relative δ dans les 3 points de contrôle pour les 3 types de domaine discret. La dispersion entre les résultats des 5 domaines de 20000 éléments discrets étant considérée comme satisfaisante — moins du 4% —, les résultats moyens des domaines de ce type sont comparés avec les

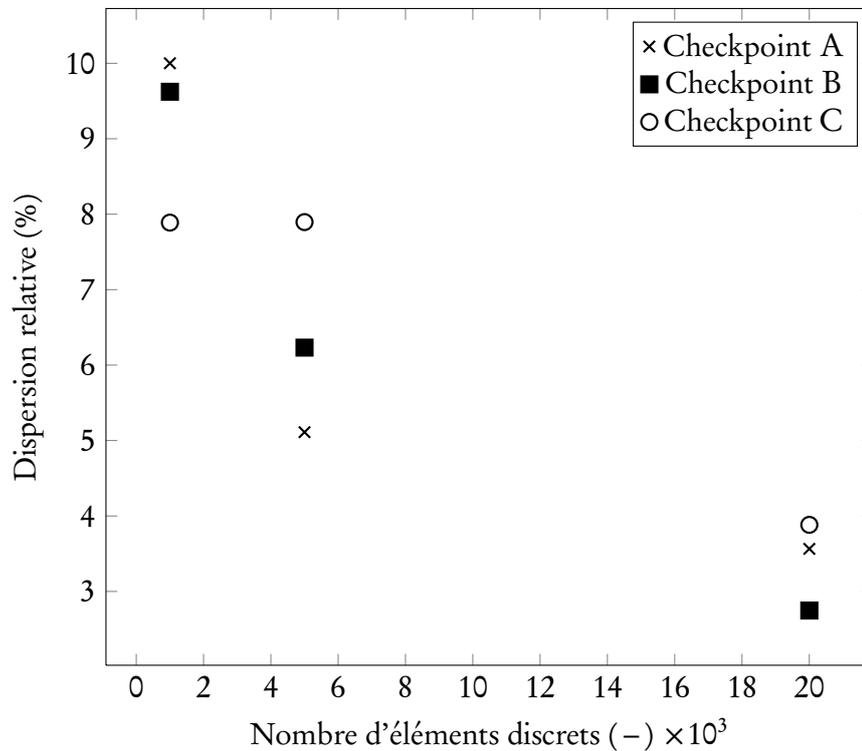


FIGURE 2.10 – Évolution de la dispersion relative δ en fonction du nombre d'éléments discrets des domaines.

résultats obtenus avec le logiciel *Abaqus 6.10*. Les figures 2.11, 2.12 et 2.13 montrent les courbes obtenues.

La différence maximale entre les simulations DEM et FEM a été repérée et l'erreur relative entre les deux est calculée à ce point.

L'objectif de ces simulations est de valider théoriquement la méthode expliquée dans ce chapitre en utilisant un problème thermique complexe incluant des gradients de température très élevés. C'est pour cela que la source de chaleur est si puissante. En fait cette source aurait fondue la plaque dans un essai expérimental, car ses propriétés thermiques correspondent à un alliage d'aluminium.

2.6 CONCLUSIONS

Ce chapitre montre comment la méthode DEM peut être utilisée pour faire des simulations thermiques complexes tout en se basant sur des domaines discrets 3D compacts, homogènes et isotropes. Ces domaines peuvent être utilisés pour mener des calculs mécaniques facilitant ainsi le couplage thermo-mécanique.

2. SIMULATION DEM THERMIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU

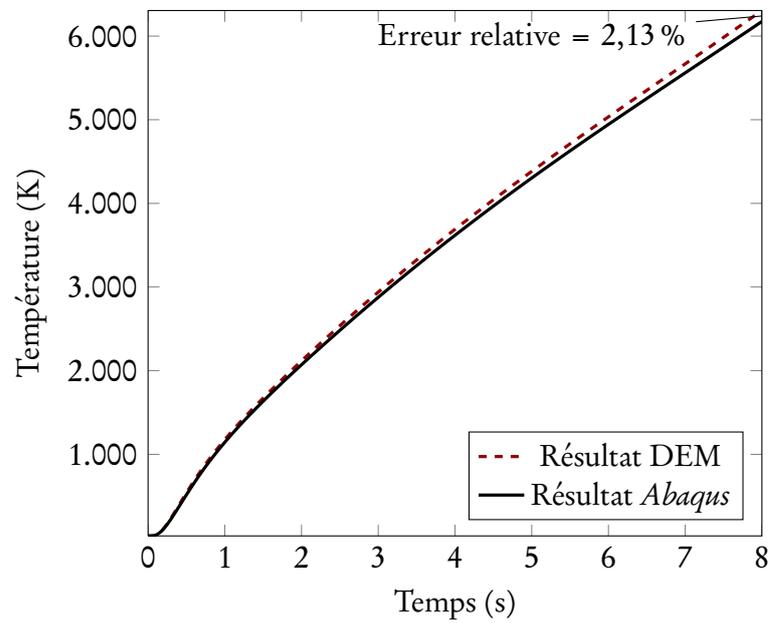


FIGURE 2.11 – Évolution de la température au point A.

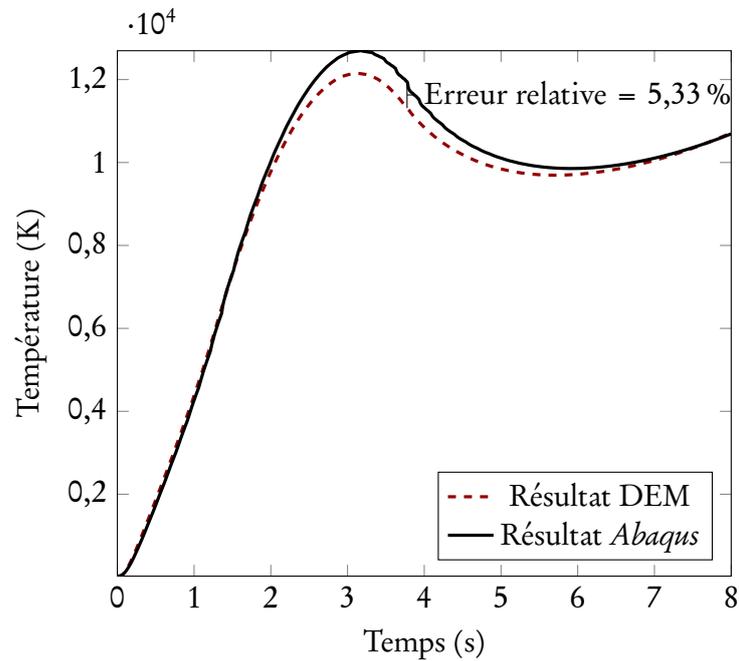


FIGURE 2.12 – Évolution de la température au point B.

Les résultats montrent que l'erreur relative entre les résultats des méthodes

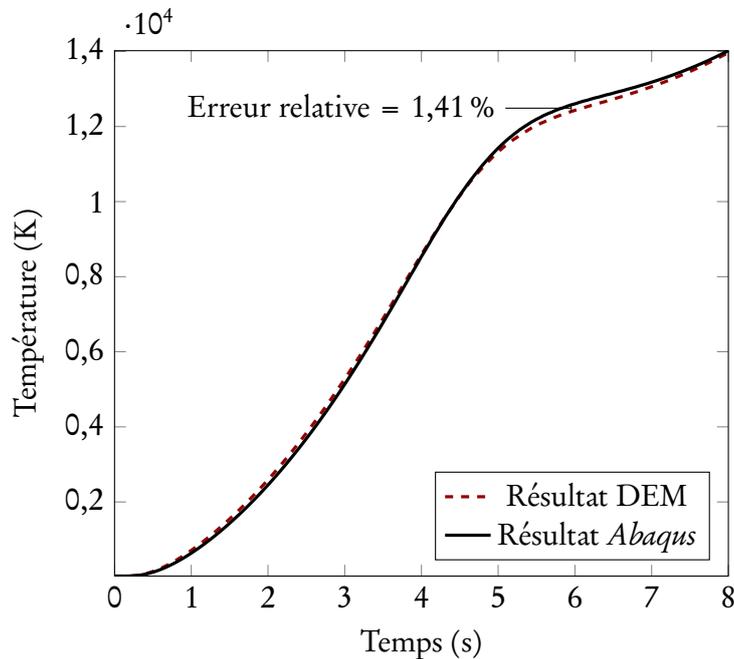


FIGURE 2.13 – Évolution de la température au point C.

DEM et FEM est acceptable même dans des cas complexes où de forts gradients de température sont présents.

Cette partie, qui développe une méthode originale et numériquement efficace pour simuler la conduction thermique dans un milieu continu applicable à un modèle par éléments discrets sphériques a été publiée dans [TIC13].

En ce qui concerne le couplage entre la méthode décrite dans ce chapitre et les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus, le travail de HADDAD *et al.* [HGF13] a désormais montré sa faisabilité. Plus précisément, dans ce travail la conduction de la chaleur dans des milieux 2D a été simulée en utilisant les méthodes DEM, FEM et le couplage DEM-FEM. Ces résultats ont été comparés aux résultats analytiques et, en plus de montrer qu'ils sont en bon accord, ils montrent que en utilisant le couplage DEM-FEM le temps de calcul est considérablement réduit par rapport aux calculs qui utilisent exclusivement la méthode DEM.

Simulation DEM mécanique d'un matériau continu élasto-plastique

L'existence de deux démarches différentes pour mener des calculs mécaniques des matériaux continus avec la méthode DEM a été évoquée dans la section 1.3. Dans une première démarche, les forces qui agissent sur les éléments discrets sont obtenues à partir d'une force issue d'un potentiel d'interaction. Dans la deuxième, les forces sur les éléments discrets sont provoquées par des liens mécaniques qui les lient.

Malgré ces différences, l'équation générale qui donne cette force a la même allure dans les deux méthodes :

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

Les variables de cette équation sont décrites dans la table suivante.

TABLE 3.1 – Variables de l'équation générale.

VARIABLE	DESCRIPTION
$\vec{\delta}$	Vecteur liant les barycentres de l'élément discret i et l'élément discret j .
$\dot{\vec{\delta}}$	Vecteur de vitesse relative des éléments discrets.
$\vec{\theta}$	Angle caractéristique entre l'élément discret i et l'élément discret j .
$\dot{\vec{\theta}}$	Vitesse angulaire relative des éléments discrets.

Un autre point en commun entre les deux méthodes est la nécessité d'un algorithme efficace pour trouver les éléments discrets en contact. Les méthodes désormais existantes ont été décrites dans le paragraphe 1.3.1. Dans le cadre du présent travail les deux démarches ont été étudiées et les résultats de cette étude vont être exposés par la suite.

3.1 FORCE ISSUE D'UN POTENTIEL

Les résultats des travaux exposés dans le paragraphe 1.3.2 ont motivé l'étude des méthodes basées sur des potentiels d'interaction pour la simulation DEM mécanique d'un matériau continu élasto-plastique.

3.1.1 Loi de base

Le potentiel de Lennard-Jones entre deux particules à une distance δ est défini classiquement comme [Jon24] :

$$V_{LJ}(\delta) = \epsilon \left[\left(\frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\delta_{eq}}{\delta} \right)^6 \right]$$

où δ_{eq} est la distance d'équilibre entre deux particules en interaction (voir : figure 3.1) et $(-\epsilon)$ est la valeur minimale du potentiel (voir : figure 3.2).

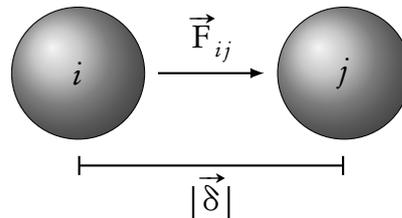


FIGURE 3.1 – Éléments discrets soumis à un potentiel de Lennard-Jones.

Pour obtenir le module de la force \vec{F}_{ij} que ce potentiel exerce sur les particules, la dérivée du potentiel est calculée :

$$F_{LJ}(\delta) = -\frac{dV_{LJ}}{d\delta} = -12\epsilon \left(\frac{\delta_{eq}^{12}}{\delta^{13}} - \frac{\delta_{eq}^6}{\delta^7} \right)$$

Cette expression possède deux paramètres (ϵ et δ_{eq}) qui nous permettent de fixer la force d'attraction maximale et le point d'équilibre entre les deux éléments discrets

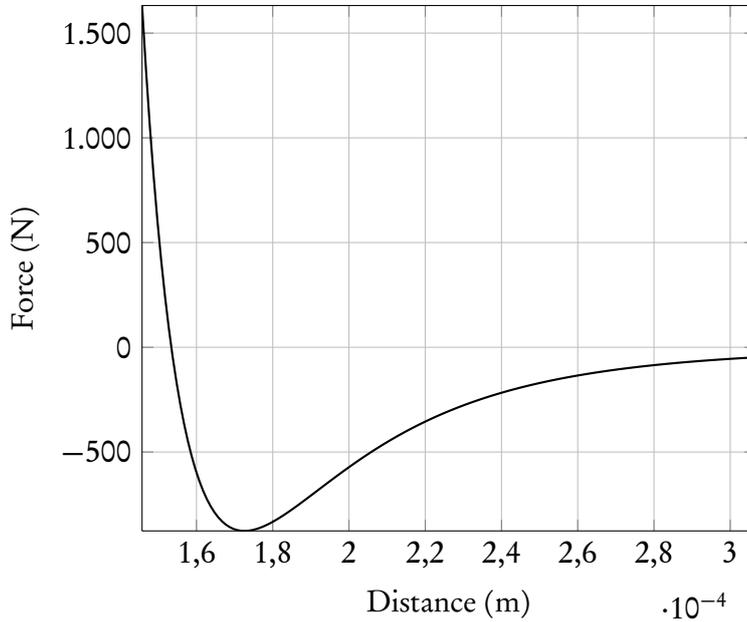


FIGURE 3.2 – Force issue d'un potentiel de Lennard-Jones.

concernés respectivement. Or, la distance de force d'attraction maximale — point minimal de la courbe 3.2 — ne peut pas être directement fixée avec cette expression. Afin que la détermination de la distance de force d'attraction maximale puisse être plus facilement obtenue le potentiel utilisé a été modifié. Les modifications effectuées sont détaillées dans l'annexe D.

3.1.2 Problématique

La première loi d'interaction entre éléments discrets envisagée est une combinaison entre une force issue d'un potentiel de Lennard-Jones (voir : équation D.4, annexe D) et une force d'amortissement \vec{F}_d en fonction de la vitesse relative des éléments discrets en interaction $\vec{\delta}$:

$$\vec{F}_{ij} = D \left[\frac{\delta_{eq}^{12}}{(B\delta - C)^{13}} - \frac{\delta_{eq}^6}{(B\delta - C)^7} \right] \frac{\vec{\delta}}{|\vec{\delta}|} + \vec{F}_d \left(\frac{\dot{\vec{\delta}}}{|\dot{\vec{\delta}}|} \right) \quad (3.1)$$

Ce type de force est fréquemment utilisé dans des problèmes de dynamique moléculaire et il est aussi utilisé pour la simulation DEM mécanique des milieux continus, comme évoqué dans la section 1.3.

Une des caractéristiques du schéma d'intégration de la DEM explicite est l'expression du pas de temps critique selon la relation :

$$\Delta t_{critique} \propto \sqrt{\frac{M}{K}}$$

où K est la raideur équivalente et M est la masse équivalente des deux éléments discrets en contact. Dans le cas de l'équation 3.1 cette raideur K augmente selon une puissance 12 quand les éléments discrets sont proches (voir : équation D.3). Cela provoque une brusque diminution du pas de temps critique et, en conséquence, une augmentation du temps de calcul.

En outre, le comportement macroscopique du matériau simulé est difficile à calibrer. Ceci est dû au nombre de paramètres existant (A , B , C , D , δ_{eq} et ϵ) mais surtout à leur forte interdépendance.

Afin d'éviter une diminution du pas de temps et de mieux maîtriser l'influence des paramètres dans le comportement du matériau, une simplification de la loi originale a été testée. Cette courbe simplifiée essaie de représenter les mêmes phénomènes que la loi de Lennard-Jones mais avec moins de paramètres.

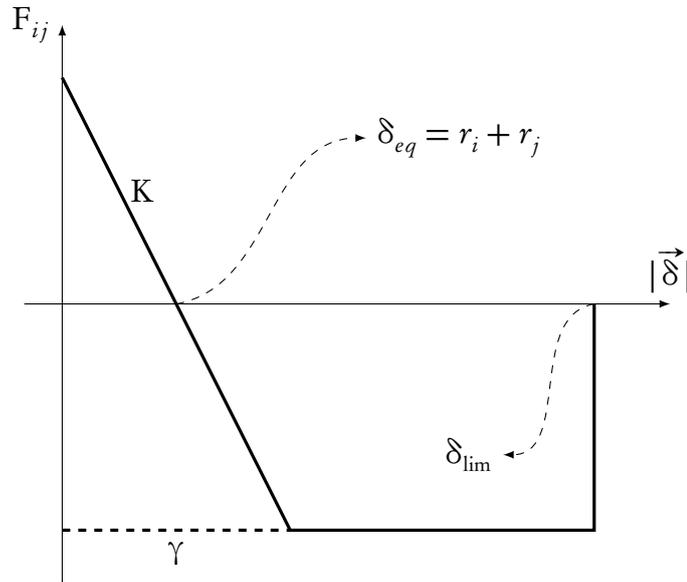


FIGURE 3.3 – Simplification de la loi d'interaction originale.

3.1.3 Loi simplifiée

Ainsi, la loi d'interaction simplifiée qui va finalement définir notre modèle mécanique est schématisée sur la figure 3.3. Étant donné que le point δ_{eq} ne dépend

que de la géométrie des deux éléments discrets en contact, les paramètres suivants suffisent pour définir la loi d'interaction entre 2 éléments discrets en contact : Si la

TABLE 3.2 – Paramètres mécaniques.

PARAMÈTRE	DESCRIPTION	UNITÉ
E_{μ}	Module d'Young du contact entre deux éléments discrets avant d'arriver au plateau de force maximale d'attraction (K/R_{moy}).	Pa
γ	Force maximale d'attraction entre deux éléments discrets.	N
δ_{lim}	Distance maximale d'interaction entre les deux éléments discrets. Si la distance entre les éléments discrets est plus grande les éléments discrets n'interagissent pas.	m

loi d'interaction est enrichie avec une force de dissipation visqueuse (voir : équation 3.1) un coefficient de dissipation c_d doit aussi être pris en compte.

3.1.4 Essais sans endommagement

Plusieurs essais de traction et de chargement cyclique ont été menés en prenant une sélection de différentes valeurs représentatives des paramètres microscopiques (voir : table 3.3). Les dimensions des éprouvettes parallélépipédiques utilisées sont

TABLE 3.3 – Valeurs des paramètres pour les différentes courbes.

COURBE	K [kN/m]	γ [N]	δ_{lim} [-]
Rouge	1500	100	1,2
Bleue	1500	25	1,4
Verte	1500	25	2,0

5 mm \times 3 mm \times 2 mm et les conditions limites des essais sont montrées dans la table 3.4, n étant le nombre d'itérations. Les résultats sont présentés dans les figures 3.4 et 3.5.

Les cycles d'hystérésis trouvés dans ces essais montrent que le comportement macroscopique émergeant du matériau est plastique.

Néanmoins, et malgré le fait de retrouver un comportement plastique pour le matériau modélisé, le comportement des éprouvettes soumises aux essais de traction

3. SIMULATION DEM MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

TABLE 3.4 – Conditions limites des différents essais. La valeur du pas de temps est $\Delta t = 4,74 \cdot 10^{-9}$ s dans les deux cas. Les conditions limites sont imposées symétriquement aux extrémités des poutres.

ESSAI	CONDITION LIMITE	VALEUR TOTALE	UNITÉ
Cyclique	Dépl. imposé	$1,2 \cos(9,817 \cdot 10^{-7} n)$	m/s
Traction	Dépl. imposé	3	m/s

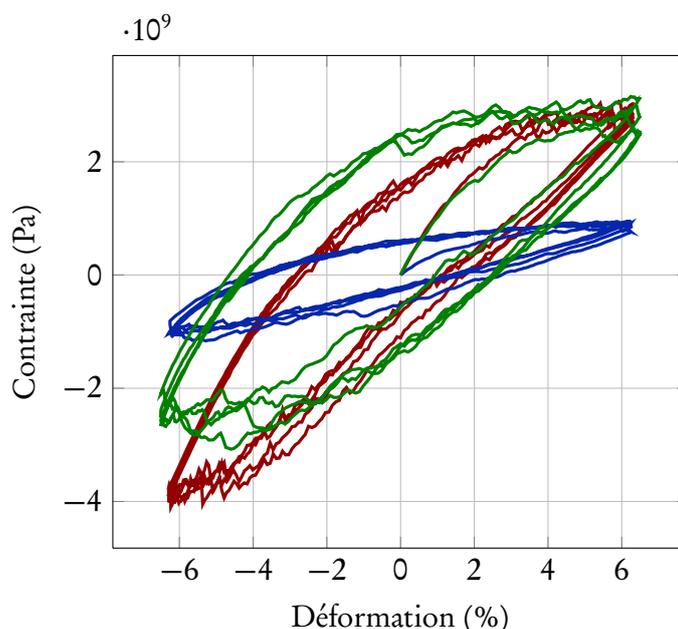


FIGURE 3.4 – Simulation DEM d'essais de chargement cyclique.

(voir : figure 3.5, paramètres de la table 3.3) ne présente pas le plateau plastique attendu pour une éprouvette en alliage d'aluminium. De plus, en regardant la rupture du matériau, une rupture progressive et peu nette est observée. Cela oblige à affiner le modèle micro-mécanique et c'est avec ce but qu'un modèle d'endommagement a été développé. Ceci permet de prendre en compte des phénomènes irréversibles qui conduiront à la ruine du matériau ce qui permettra de mieux représenter les phénomènes micro-mécaniques qui provoquent la rupture.

3.1.5 Modèle d'endommagement

La rupture d'un matériau ductile est physiquement initiée par des micro-fissures qui se développent, coalescent et qui conduisent à la création des macro-fissures et, en conséquence, à la rupture finale [Cal96]. Il est alors très important qu'au moment de

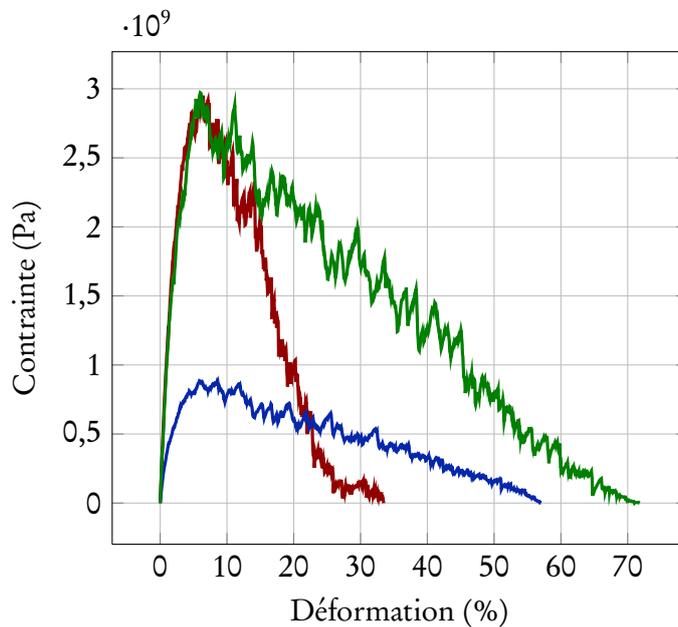


FIGURE 3.5 – Simulation DEM d'essais de traction.

modéliser le comportement mécanique d'un matériau sous chargements complexes les micro-fissures créées lors du cycle de charge soient identifiées et prises en compte par le modèle. La modélisation de ce phénomène peut être facilement implémentée en définissant une loi de contact strictement répulsive entre les éléments discrets qui appartiennent aux lèvres opposées de la fissure. Le modèle actuel referme les fissures dès que la distance entre les éléments discrets est plus petite que δ_{lim} , donc, aucune fissure ne peut se développer dans les conditions d'un essai cyclique. Nous avons donc mis au point et implémenté un algorithme pour identifier les éléments discrets appartenant aux frontières d'une micro-fissure. Cet algorithme permet de détecter simplement la présence de micro-fissures par la détection des frontières, il est détaillé dans les paragraphes qui suivent :

La figure 3.5 montre un élément discret i — en bleu — dont on veut déterminer si il appartient à la frontière d'une micro-fissure. On trace une sphère virtuelle S centrée sur l'élément discret i , puis on détermine l'ensemble E des éléments discrets dont le centre de gravité est à l'intérieur de S (voir : figure 3.7). Le paramètre qui va déterminer si l'élément discret i est à la frontière d'une fissure est la distance entre le barycentre de E et la position de l'élément discret i . En effet, plus cette distance est grande, plus les éléments discrets de l'ensemble E sont groupés d'un même côté d'un plan imaginaire qui peut définir une ouverture de fissure.

L'algorithme est divisé en deux étapes successives :

- Identification de l'ensemble des éléments discrets de référence entourant

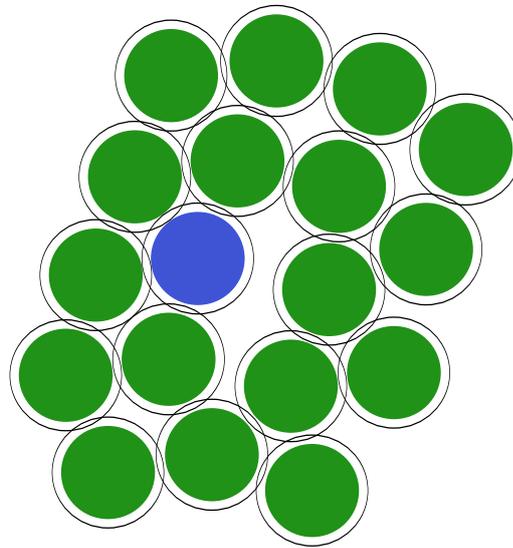


FIGURE 3.6 – Domaine discret avec l'élément discret i en bleu et le rayon d'interaction mécanique en noir.

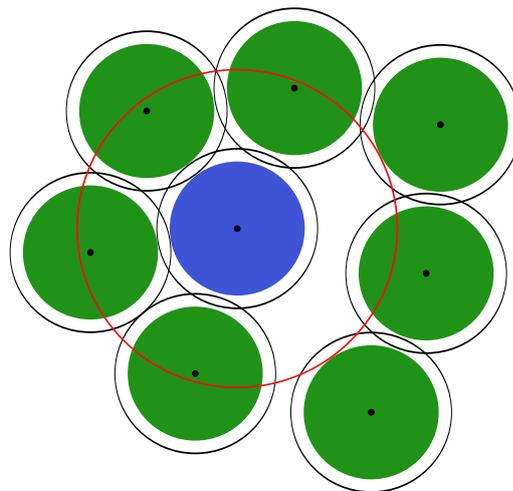


FIGURE 3.7 – Détail du domaine discret avec l'élément discret i en bleu, le rayon d'interaction mécanique en noir et le rayon de recherche en rouge.

l'élément discret i , puis calcul du barycentre de cet ensemble.

- Calcul de la distance entre le barycentre et le centre de gravité de l'élément discret i : cette distance est ensuite traitée pour décider si il y a présence d'une micro-fissure selon un critère présenté ci-après.

Une fois que les éléments discrets de référence ont été choisis et leur barycentre calculé, il faut introduire dans le modèle un paramètre C qui va permettre de définir

la création d'une micro-fissure. Ce paramètre définit une sphère autour de l'élément discret i : si le barycentre des éléments de référence est à l'extérieur de la sphère l'élément discret i est considéré comme appartenant à une frontière. La figure 3.8 montre un exemple en 2D pour un rayon d'action égal à 1,2 fois les rayons des éléments discrets ¹.

Contrairement aux quatre paramètres liés à l'aspect dynamique de la loi d'interaction mentionnés dans le paragraphe 3.1.3, le paramètre sans dimension C est lié à la géométrie du domaine — plus concrètement à l'identification des micro-fissures — et a un rapport direct avec les mécanismes de rupture et d'endommagement du matériau modélisé. Différentes expériences menées montrent que avec des valeurs de C proches de 0,6 l'endommagement provoqué dans l'éprouvette est acceptable. Néanmoins, une étude approfondie des effets provoqués par le changement de ce paramètre reste à faire pour pouvoir maîtriser la modélisation de l'endommagement du matériau.

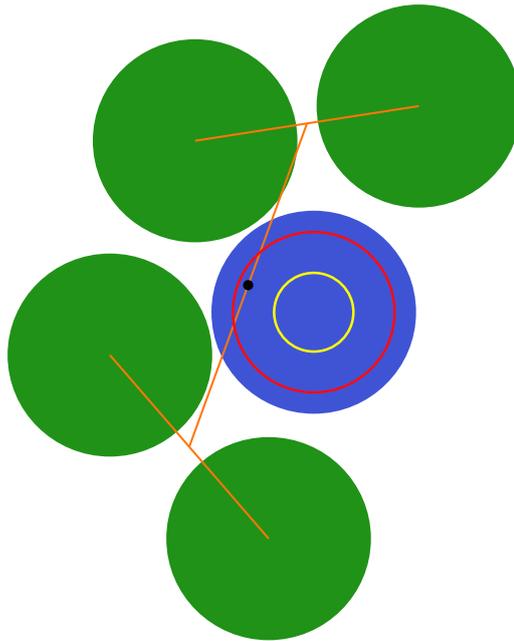


FIGURE 3.8 – Barycentre des éléments discrets en interaction avec l'élément discret i . L'application du critère de recherche avec une valeur de C égale à 0,3 (en jaune) détermine la création d'une micro-fissure. Par contre, si la valeur de C est égale à 0,8 (en rouge), la micro-fissure n'est pas créée.

1. Chaque élément discret du domaine possède un rayon d'action mécanique R_a qui est plus grand que son rayon géométrique ($R_a \approx 1,2R_g$ dans [TP07]). Cela se correspond à la distance δ_{lim} .

3. SIMULATION DEM MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

MODIFICATION DE LA LOI DE COMPORTEMENT : Une fois que les éléments discrets qui appartiennent aux frontières des micro-fissures sont détectés, la loi d'interaction mécanique est modifiée selon ce critère. Sur la figure 3.9a on peut voir un élément discret i — en bleu — et sur la figure 3.9b la loi de comportement qu'il aurait s'il était en contact avec un élément discret qui est placé du même coté d'une fissure — en orange — et un élément discret qui est placé sur la lèvre opposé à la fissure — en violet —. Dans ce dernier cas, le contact est strictement répulsif, ce qui caractérise une micro-fissure et ce qui va provoquer l'endommagement du matériau.

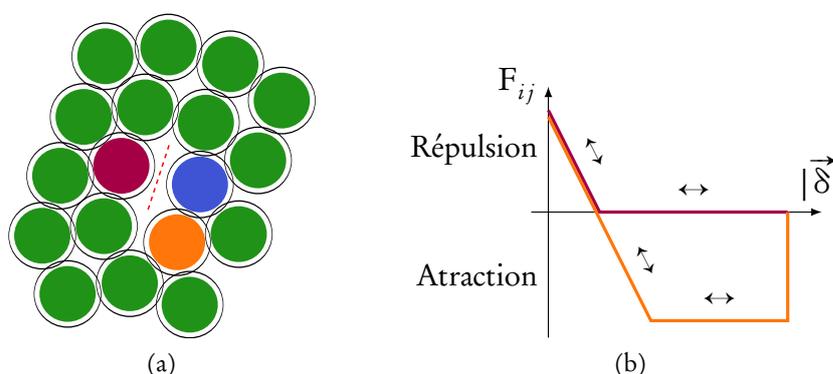


FIGURE 3.9 – Éléments discrets dans une fissure et modification de la loi de comportement.

La boucle principale utilisée pour les calculs DEM développés dans *GranOO* est décrite dans le fichier d'entrée XML joint à l'annexe E. L'organigramme simplifié est représenté à la figure 3.10.

3.1.6 Essais avec endommagement

TABLE 3.5 – Valeurs des paramètres.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
K	1500	kN/m
γ	25	N
δ_{lim}	1,2	R_{moy}
C	0,4	–

COMPORTEMENT À RUPTURE : Des essais de traction ont été menés en appliquant le modèle d'endommagement exposé dans le paragraphe précédent. Dans un premier temps les paramètres microscopiques de la table 3.5 ont été utilisés pour différentes

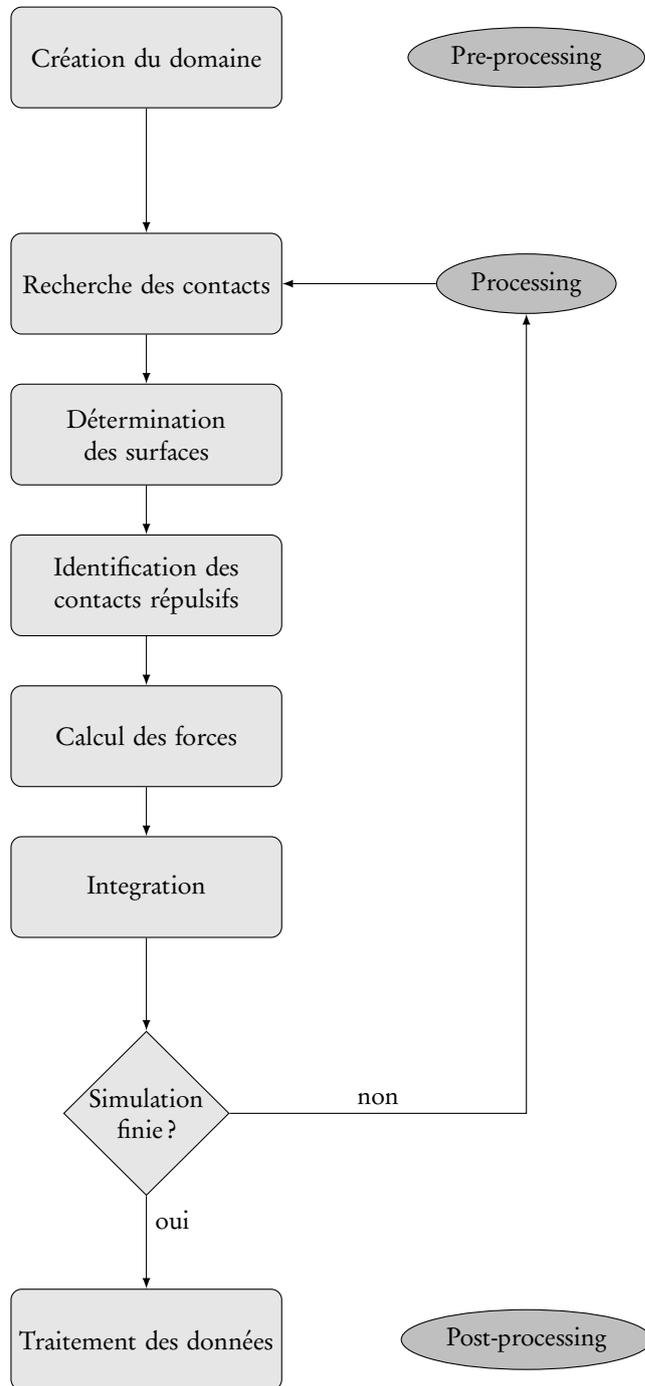


FIGURE 3.10 – Algorithme général.

éprouvettes numériques de même taille (5 mm × 3 mm × 2 mm) afin d'analyser la reproductibilité de l'essai de rupture pour différents échantillons numériques. En effet, même si les éprouvettes ont une géométrie identique, ses éléments discrets ont été aléatoirement placés lors du procédé de création du domaine. La figure

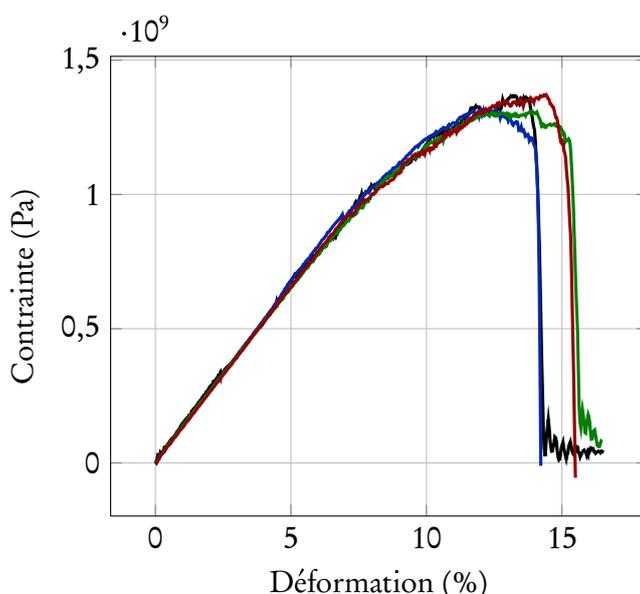
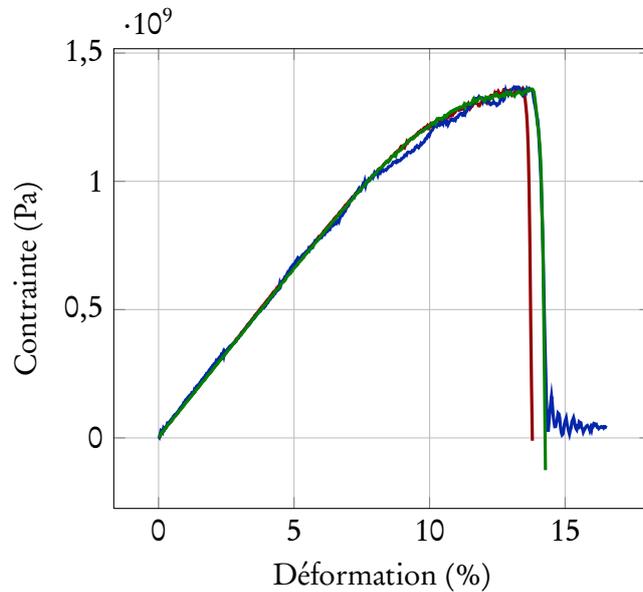


FIGURE 3.11 – Essais de traction avec différentes éprouvettes.

3.11 montre une variation de la déformation à rupture en fonction des échantillons numériques testés qui est notable. Pour un même jeu de paramètres la déformation à rupture peut passer de 14% à 16%². Ce résultat doit être pris en compte au moment d'évaluer les résultats mécaniques macroscopiques issues de la calibration d'un jeu de paramètres donné. Il n'y a en revanche que très peu de différence sur le module élastique des différents échantillons. Ce phénomène est notable et peut s'expliquer par l'aspect local de création des micro-fissures. L'initiation peut ainsi varier d'une configuration à l'autre.

Une fois la variabilité de la déformation à rupture pour différents échantillons constatée, l'influence du coefficient de dissipation c_d sur une des éprouvettes utilisées a été étudiée. Les valeurs varient de 0,04 Ns/m² à 0,08 Ns/m². Les courbes obtenues sont montrées sur la figure 3.12. Cette campagne d'essais montre que ce paramètre a essentiellement un rôle de stabilisation des calculs. Avec les vitesses de déformation imposées, il n'a pas d'influence dans le comportement macroscopique. Plus précisément, les conditions limites imposées aux extrémités des éprouvettes étaient celles montrées dans la table 3.4.

2. Une diminution de cet écart est attendue pour des éprouvettes numériques construites avec plus d'éléments discrets, due aux effets du raffinement du maillage.

FIGURE 3.12 – Essais de traction avec variation de c_d .

L'influence des paramètres qui caractérisent la loi micro-mécanique a ensuite été testée sur une même éprouvette avec les conditions de la table 3.4. Les valeurs affectés aux paramètres sont montrés dans la table 3.6. Les figures 3.13, 3.14, 3.15 et 3.16

TABLE 3.6 – Valeurs des paramètres.

PARAMÈTRE	VALEURS	UNITÉ
K	1250, 1500, 8000	kN/m
γ	15, 25, 30	N
δ_{lim}	1,1, 1,2, 1,3	R_{moy}
C	0,2, 0,4, ∞	-

montrent les résultats des essais menés avec les différentes valeurs des paramètres.

Les courbes montrent que chaque paramètre joue un rôle important sur plusieurs caractéristiques macroscopiques du matériau — module d'Young, contrainte maximale, déformation maximale à rupture etc. —, fait qui augmente la difficulté de la calibration du matériau macroscopique.

Pour donner un exemple, la variation de K entraîne une variation du module d'Young, de la longueur du plateau plastique et de la déformation maximale du matériau. La variation de γ ne fait pas varier initialement le module d'Young, mais elle fait changer la contrainte maximale et la déformation maximale à rupture.

3. SIMULATION DEM MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

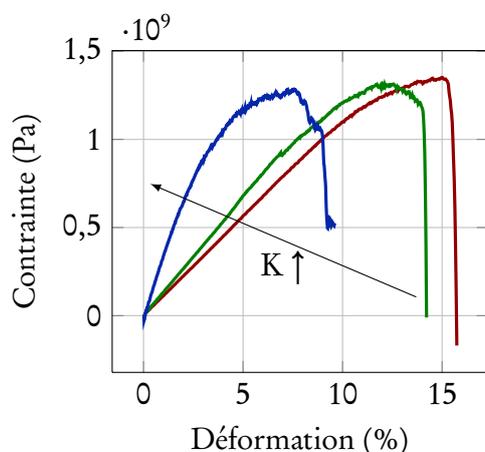


FIGURE 3.13 – Essais de traction avec variation de K .

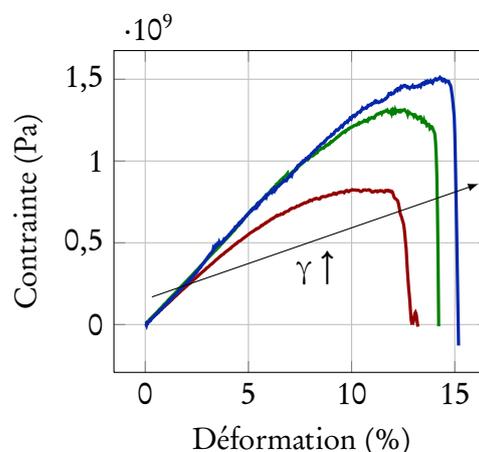


FIGURE 3.14 – Essais de traction avec variation de γ .

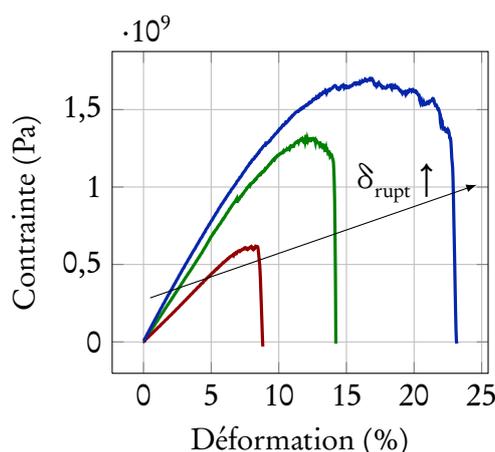


FIGURE 3.15 – Essais de traction avec variation de δ_{lim} .

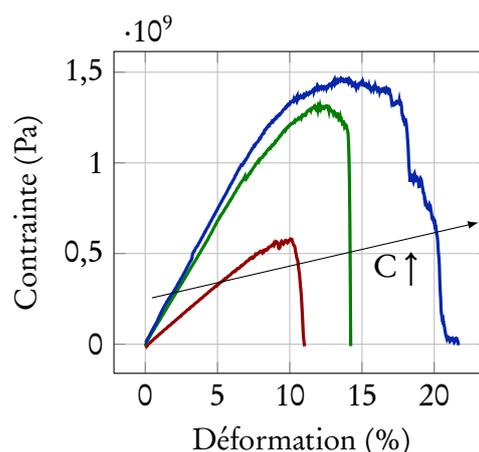


FIGURE 3.16 – Essais de traction avec variation de C .

COMPORTEMENT CYCLIQUE : L'effet de l'endommagement est clairement révélé dans les essais de chargement cyclique menés avec les conditions de la table 3.4 (voir : figure 3.17). La diminution de la valeur du module d'Young ainsi que la contrainte maximale obtenue après chaque cycle est facilement observable.

BILAN : Les résultats précédents montrent que le modèle est capable de simuler le comportement plastique et l'endommagement des matériaux continus. Le mécanisme qui fait apparaître la plasticité au niveau macroscopique est le ré-arrangement des éléments discrets : leur emplacement varie lors du chargement de l'éprouvette

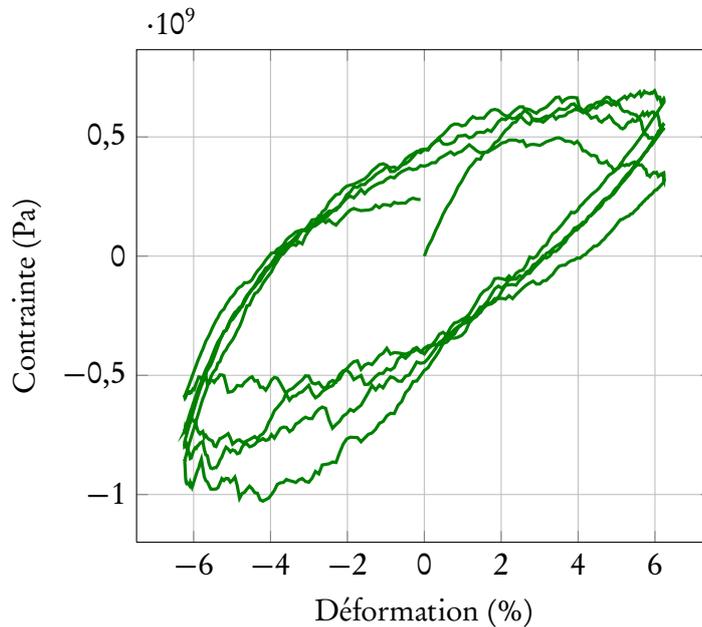


FIGURE 3.17 – Essais de chargement cyclique avec endommagement.

et une fois que l'éprouvette est relaxée les éléments discrets ne retournent pas forcément à la même position.

Un des avantages de cette première méthode étudiée est qu'un paramètre C grand permet au matériau modélisé d'avoir de très grandes déformations sans pour autant déclencher la création de micro-fissures qui initient la rupture. Ceci semble être une caractéristique du procédé de soudage FSW. Il ne faut donc pas mettre cette méthode de côté pour une future étude de la simulation du procédé FSW malgré les inconvénients causés par le couplage des paramètres microscopiques.

En effet, ce fort couplage entre les paramètres microscopiques a motivé l'étude de la deuxième méthode de simulation des matériaux continus avec la méthode DEM. Le modèle d'endommagement est conservé mais le modèle de comportement a été changé. La caractéristique principale de ce nouveau modèle de comportement est que les éléments discrets sont liés par des liens, qui dans le cas général travaillent en traction, flexion et compression.

3.2 FORCE ISSUE D'UN LIEN MICROSCOPIQUE

Dans la deuxième méthode étudiée les éléments discrets i et j sont liés par des poutres d'Euler-Bernouilli. La distance initiale entre les barycentres des éléments discrets $O_i O_j$ correspond à la longueur initiale l de la poutre. Chaque élément

discret possède un repère local. La rotation de chaque élément discret entre deux pas de temps consécutifs est décrite par les angles θ_x , θ_y et θ_z .

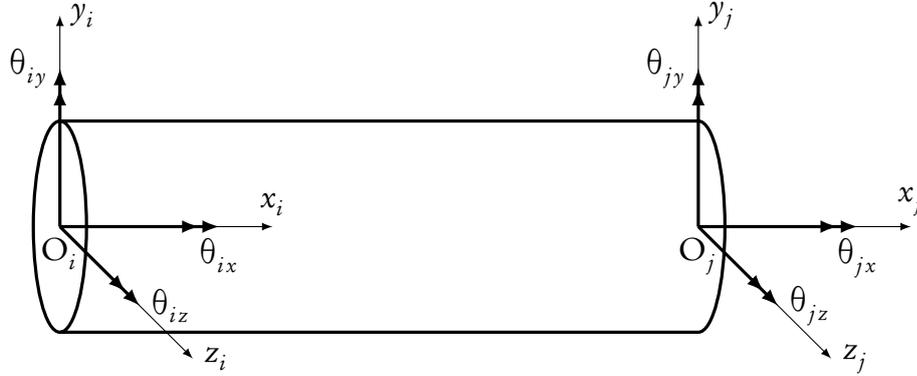


FIGURE 3.18 – Poutre d'Euler-Bernouilli avec les repères liés aux éléments discrets.

Les forces qui agissent sur chaque élément discret sont obtenues à partir des équations de la mécanique des milieux continus suivantes où I_0 et I_g représentent le moment polaire et le moment quadratique des poutres :

$$\begin{aligned}\vec{F}_i &= +ES \frac{\Delta l}{l} \vec{i} - \frac{6EI_g}{l^2} (\theta_{jz} + \theta_{iz}) \vec{j} - \frac{6EI_g}{l^2} (\theta_{jy} + \theta_{iy}) \vec{k} \\ \vec{F}_j &= -ES \frac{\Delta l}{l} \vec{i} + \frac{6EI_g}{l^2} (\theta_{jz} + \theta_{iz}) \vec{j} - \frac{6EI_g}{l^2} (\theta_{jy} + \theta_{iy}) \vec{k} \\ \vec{M}_i &= +\frac{GI_0}{l} (\theta_{jx} - \theta_{ix}) \vec{i} - \frac{2EI_g}{l} (\theta_{jy} + 2\theta_{iy}) \vec{j} + \frac{2EI_g}{l} (\theta_{jz} + 2\theta_{iz}) \vec{k} \\ \vec{M}_j &= -\frac{GI_0}{l} (\theta_{jx} - \theta_{ix}) \vec{i} - \frac{2EI_g}{l} (2\theta_{jy} + \theta_{iy}) \vec{j} + \frac{2EI_g}{l} (2\theta_{jz} + \theta_{iz}) \vec{k}\end{aligned}$$

Ces équations ont été prises du modèle de poutres utilisé par ANDRÉ *et al.* pour simuler des matériaux élastiques fragiles [AICN12]. Pour étendre ce modèle aux matériaux plastiques une contrainte équivalente va être définie dans la section centrale de chaque poutre microscopique. C'est sur cette contrainte que le critère de plasticité va être basé.

3.2.1 Contrainte équivalente de Von-Mises

Grâce aux hypothèses de Bernoulli, la contrainte maximale équivalente de Von-Mises σ_e peut être exprimée dans la section centrale des poutres comme :

$$\sigma_e = \sqrt{\sigma^2 + 3\tau^2}$$

La contrainte normale maximale σ est égale à la somme de la contrainte maximale due à la flexion et de celle due à la traction :

$$\sigma = \sigma^{fl} + \sigma^{tr}$$

Ainsi, dans la section centrale de la poutre :

- σ^{fl} est :

$$\sigma^{fl} = \frac{1}{2} \left| \vec{M}_i + \vec{M}_j \right| \frac{r}{I_g}$$

\vec{M}_i et \vec{M}_j étant les moments de flexion aux extrémités des poutres déduits des équations précédentes, r étant le rayon de la poutre et I_g le moment quadratique de la poutre $I_g = \pi(2r)^4/64$

- σ^{tr} est la contrainte normale maximale due aux sollicitations de traction

$$\sigma^{tr} = \frac{F_x}{S}$$

F_x étant l'effort normal de la poutre et S sa section $S = \pi r^2$

- τ est la contrainte de cisaillement due aux sollicitations de torsion

$$\tau = \frac{M_x r}{I_0}$$

I_0 étant le moment polaire de la poutre $I_0 = \pi(2r)^4/32$ et M_x le moment de torsion.

La contrainte équivalente σ_e peut alors être écrite en fonction des forces appliquées sur les éléments discrets comme :

$$\sigma_e = \sqrt{\left(\frac{r}{2I_g} \sqrt{M_y^2 + M_z^2} + \frac{F_x}{S} \right)^2 + 3 \frac{M_x^2 r^2}{I_0^2}}$$

3.2.2 Critère de plasticité

Contrairement au cas analysé dans la section 3.1, dans les domaines créés à partir d'éléments discrets liés par des poutres le ré-arrangement des éléments ne fait pas émerger un comportement plastique à l'échelle macroscopique. C'est pour cela que c'est dans les poutres elles-mêmes que le comportement plastique doit être contenu.

Une fois la contrainte équivalente de Von-Mises σ_e calculée dans la section centrale de la poutre, on la compare avec la contrainte d'écoulement σ_y pour obtenir le coefficient p :

$$p = \sigma_y / \sigma_e$$

3. SIMULATION DEM MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

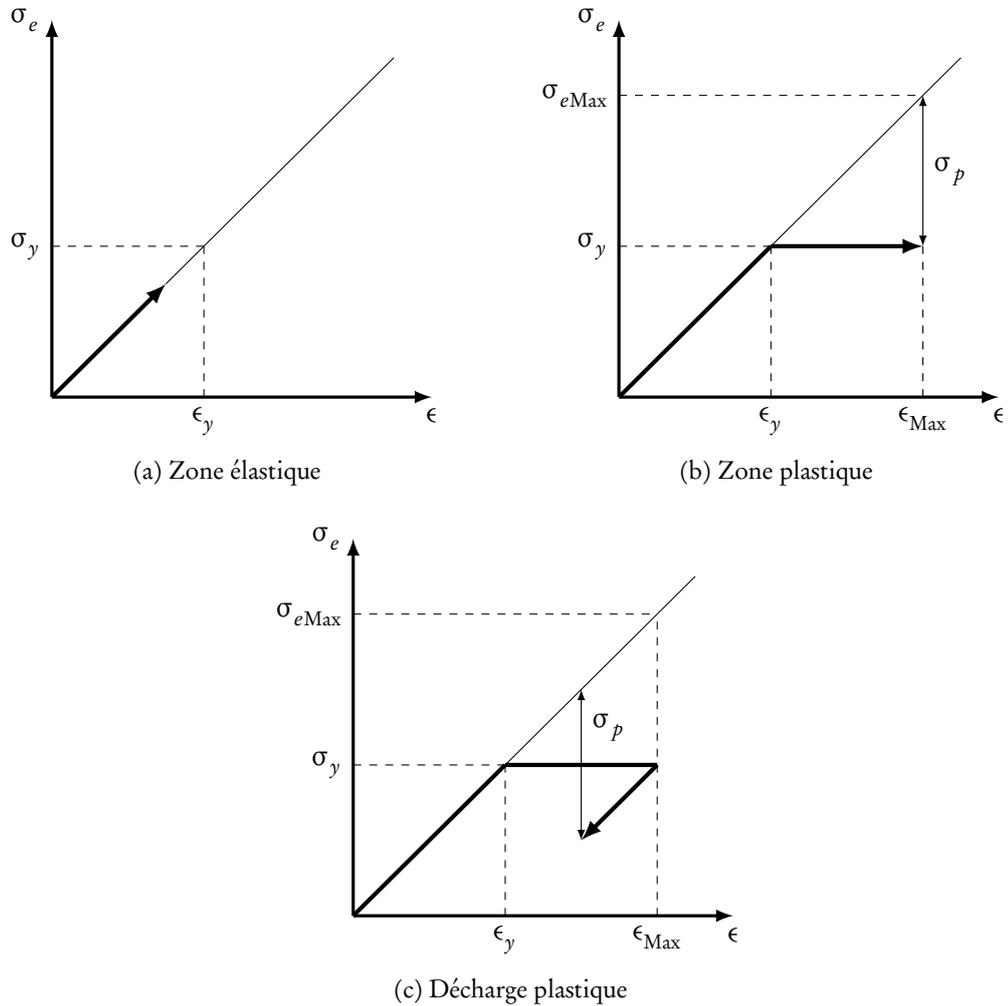


FIGURE 3.19 – Schéma du critère de plasticité utilisé.

À partir du moment où $\sigma_e > \sigma_y$ (voir : figure 3.19b), si les positions relatives des éléments discrets $\theta_{ix}, \theta_{iy}, \theta_{iz}, \theta_{jx}, \theta_{jy}, \theta_{jz}$ et Δl provoquent un état de déformation ϵ_{Max} tel que la contrainte équivalente dépasse son maximal historique σ_{eMax} , on calcule et on enregistre la contrainte σ_{eMax} et le coefficient p_{Max} :

$$p_{Max} = \sigma_y / \sigma_{eMax}$$

La contrainte σ_p est alors calculée et enregistrée :

$$\sigma_p = (1 - p_{Max})\sigma_{eMax}$$

Si la contrainte σ_e dépasse une contrainte σ_{rupt} donnée, la poutre est éliminée. La valeur de la contrainte σ_{rupt} utilisée tout au long ce travail est celle qui correspond à une déformation en traction de la poutre de 100%.

Les forces et moments qui causent la contrainte σ_p sont calculés à partir des équations :

$$\begin{aligned}\vec{F}_{ip} &= (1 - p_{Max}) \vec{F}_i \\ \vec{F}_{jp} &= (1 - p_{Max}) \vec{F}_j \\ \vec{M}_{ip} &= (1 - p_{Max}) \vec{M}_i \\ \vec{M}_{jp} &= (1 - p_{Max}) \vec{M}_j\end{aligned}$$

puis ces valeurs sont enregistrées.

Finalement, les forces et moments appliqués sur chaque élément discret sont calculés selon :

$$\begin{aligned}\vec{F}_{it} &= \vec{F}_i - \vec{F}_{ip} = p_{Max} \cdot \vec{F}_i \\ \vec{F}_{jt} &= \vec{F}_j - \vec{F}_{jp} = p_{Max} \cdot \vec{F}_j \\ \vec{M}_{it} &= \vec{M}_i - \vec{M}_{ip} = p_{Max} \cdot \vec{M}_i \\ \vec{M}_{jt} &= \vec{M}_j - \vec{M}_{jp} = p_{Max} \cdot \vec{M}_j\end{aligned}$$

Cela a comme conséquence une décharge plastique quand la valeur de σ_p est différente de zéro (voir : figure 3.19c) qui permet le développement d'un modèle de poutre parfaitement plastique à l'échelle microscopique.

3.2.3 Algorithme général

La boucle principale utilisée pour les calculs est lue par le programme au travers du fichier XML joint dans l'annexe E et son schéma simplifié est représenté dans la figure 3.20. L'algorithme utilisé pour le calcul des forces appliquées aux éléments discrets des extrémités des poutres est également montré sur la figure 3.21 de la page 63.

3.2.4 Calibration

La méthode de calibration pour obtenir le coefficient de Poisson et le module d'Young macroscopiques est strictement celle décrite dans le travail de ANDRÉ *et al.* [AICN12].

Le pas de temps critique est calculé en fonction des raideurs équivalentes de traction, flexion et torsion. Un pas de temps est calculé pour chaque type d'effort, puis le plus petit est retenu.

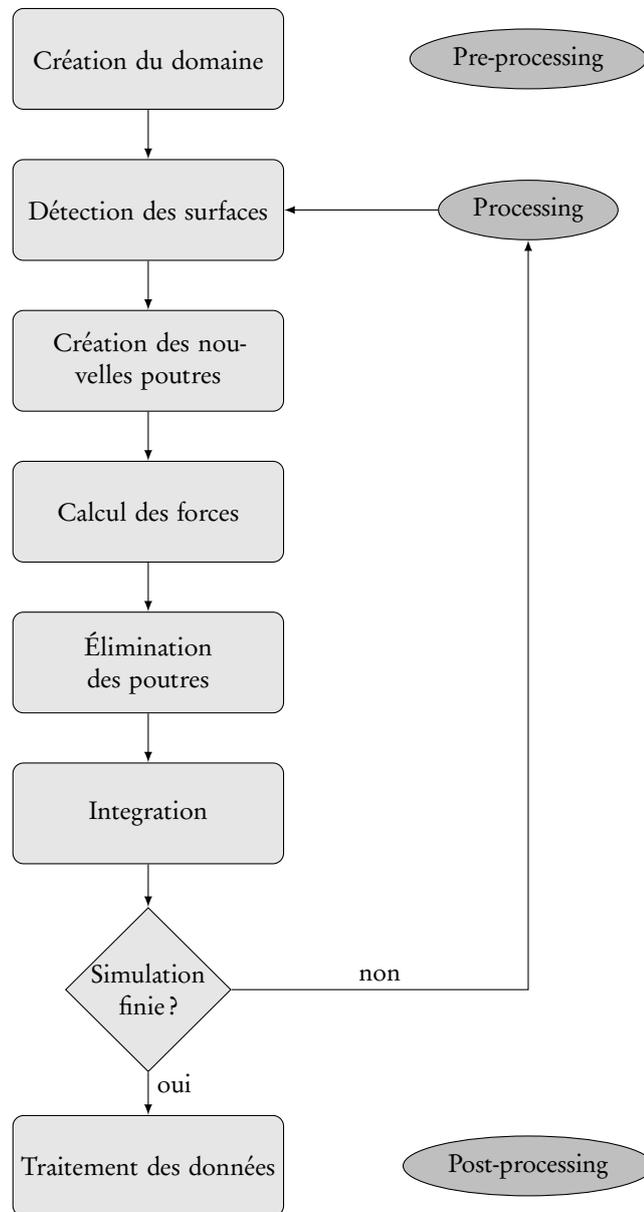


FIGURE 3.20 – Algorithme général.

L'objectif de la calibration est d'obtenir un matériau avec les caractéristiques macroscopiques de l'alliage d'aluminium 2024-T351 montrées dans la table 3.7 et les résultats de la calibration sont montrés sur la figure 3.22.

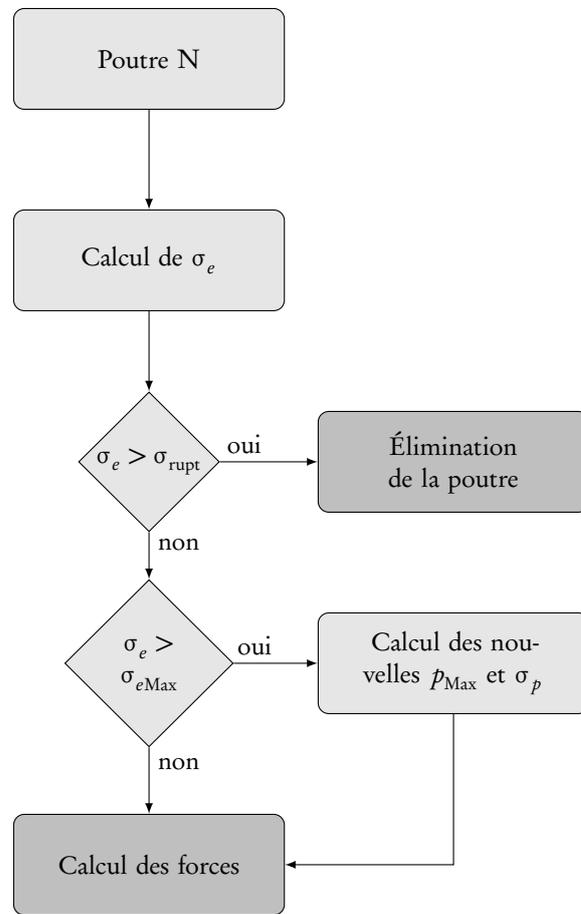


FIGURE 3.21 – Algorithme de calcul de forces.

TABLE 3.7 – Caractéristiques mécaniques de l'AA 2024-T351.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
E	73	GPa
ν	0,33	-
σ_y	290	MPa
σ_{rupt}	441	MPa
ϵ_{rupt}	4%-19%	-

3.2.5 Résultats

Des essais numériques ont été menés avec les paramètres issus de la calibration décrite dans le paragraphe précédent. Les conditions limites des essais sont montrées

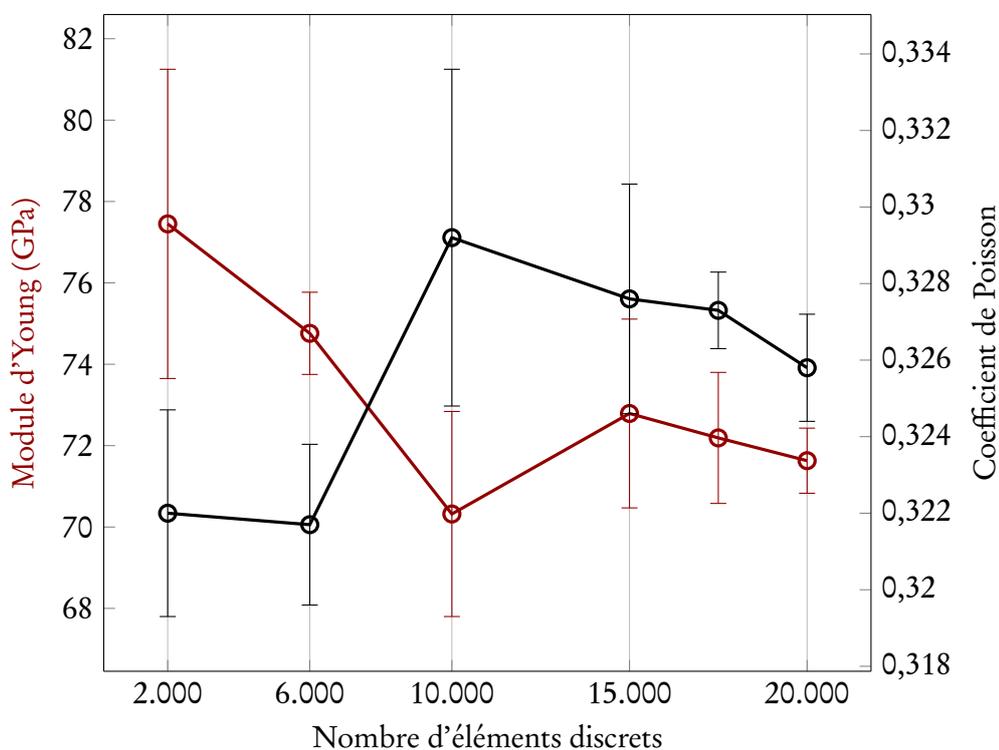


FIGURE 3.22 – Résultats de la calibration.

dans la table 3.8 n étant le nombre d'itérations. Les résultats sont étudiés par la suite.

Dans un essai de traction à rupture on obtient la courbe contrainte-déformation de la figure 3.23. Le module d'Young, la contrainte d'écoulement, la contrainte maximale ainsi que la déformation à rupture ont des valeurs qui correspondent à celles montrées dans la table 3.7. Il est notable qu'un comportement microscopique parfaitement plastique ne conduise pas à un comportement parfaitement plastique macroscopique. Ceci est dû à la non uniformité microscopique du chargement et permet de rendre compte d'un effet de microstructure.

Les résultats d'un essai de chargement cyclique sont montrés dans la courbe 3.24. L'endommagement du matériau est imperceptible avec les paramètres utilisés dans cette simulation et le matériau montre un petit écrouissage cinématique.

Ces résultats montrent qu'avec la méthode décrite dans la section 3.2 il est possible de modéliser un matériau continu élasto-plastique endommageable en suivant une méthode de calibration robuste déjà utilisée dans certains travaux de simulation par éléments discrets récemment publiés [AICN12, JCD⁺13].

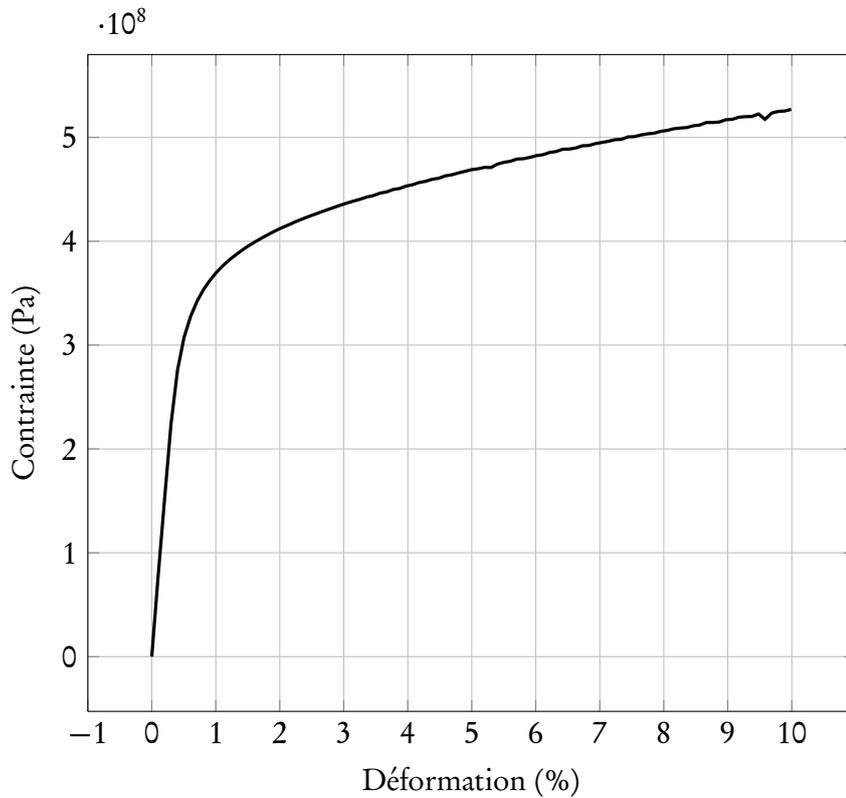


FIGURE 3.23 – Essai à rupture.

TABLE 3.8 – Conditions limites des différents essais. La valeur du pas de temps est $\Delta t = 1,05 \cdot 10^{-9}$ s dans les deux cas. Les conditions limites sont imposées symétriquement aux extrémités des poutres.

ESSAI	CONDITION LIMITE	VALEUR TOTALE	UNITÉ
Traction	Dépl. imposé	1	m/s
Cyclique	Force imposée	$280 \sin \left(8,0 \cdot 10^{-5} n - \frac{\pi}{2} \right) + 280$	N

3.3 CONCLUSIONS

L'objectif de ce chapitre était de faire un étude des deux méthodes de simulation mécanique d'un matériau continu retenues.

La première méthode étudiée est basée sur des forces issues d'un potentiel. Cette méthode a l'avantage de pouvoir simuler des grandes déformations sans pour autant déclencher l'endommagement du matériau, phénomène trouvé dans des procédés comme le soudage par friction malaxage, par exemple. Néanmoins,

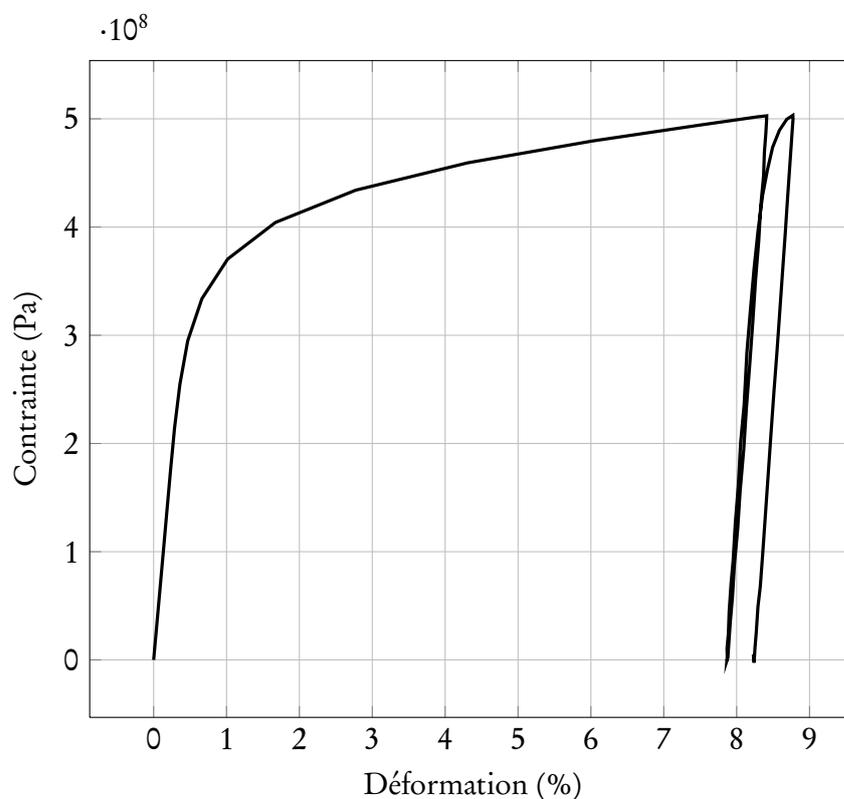


FIGURE 3.24 – Essai de chargement cyclique.

cette méthode s'est avérée très difficile à calibrer pour obtenir le comportement mécanique macroscopique désiré. Elle peut être utile pour une future étude de la simulation de procédés comprenant des grands déplacements.

La deuxième méthode, de son côté, est plus facile à calibrer en suivant la méthode de calibration décrite dans le travail [AICN12]. Or, elle n'est pas naturellement adaptée à la simulation de grands déplacements. Ainsi, la destruction et recréation des poutres doit être permise pour arriver à simuler cet aspect.

Tout en se basant sur cette dernière méthode de simulation mécanique d'un matériau continu, le prochain chapitre va étudier son couplage avec la partie thermique décrite au chapitre précédent.

Simulation DEM thermo-mécanique d'un matériau continu élasto-plastique

4.1 DESCRIPTION DE LA MÉTHODE DE COUPLAGE UTILISÉE

Le problème de la thermo-mécanique des contacts secs avec troisième corps solide a été étudié par RICHARD dans ses travaux de thèse [Ric08, RIRB08]. Ces résultats sont très utiles au moment d'aborder le contact entre l'outil et la matière.

Dans ce chapitre une méthode pour résoudre le problème du couplage entre la mécanique et la thermique au sein d'un matériau continu élasto-plastique va être exposée. Ce couplage est basé sur l'hypothèse que la quasi totalité de l'énergie de déformation plastique est transformée en énergie thermique. Plus précisément, la fraction de l'énergie de déformation plastique transformée en énergie thermique est donnée par un coefficient β , connu dans la bibliographie comme « coefficient de Taylor-Quinney ». Ce coefficient β varie en fonction du matériau mais des valeurs autour de $\beta = 0,9$ sont couramment acceptées [RK09] pour des alliages d'aluminium, matériau de référence pour ce travail.

Le calcul de l'énergie plastique du système va être basé sur la courbe $\sigma_e - \epsilon$ décrite dans le paragraphe 3.2.2 de la page 59. Rappelons que cette courbe décrit la loi d'interaction entre les éléments discrets qui définit le comportement du matériau simulé, jouant un rôle similaire à celui des équations constitutives dans les méthodes continues. Cette loi a pour seul but de bâtir un modèle microscopique qui permette de bien remonter aux comportements macroscopiques désirés. Une fois ces comportements macroscopiques obtenus, le travail des efforts dissipatifs est transformé en énergie thermique. Le travail de RICHARD *et al.* [RIRB08] utilise le même concept pour des matériaux granulaires. Une représentation graphique de la courbe $\sigma_e - \epsilon$ avec le travail mécanique qui éventuellement serait transformé en énergie thermique dessiné en vert est montrée sur la figure 4.1.

La démarche utilisée est la suivante : au moment où la contrainte maximale

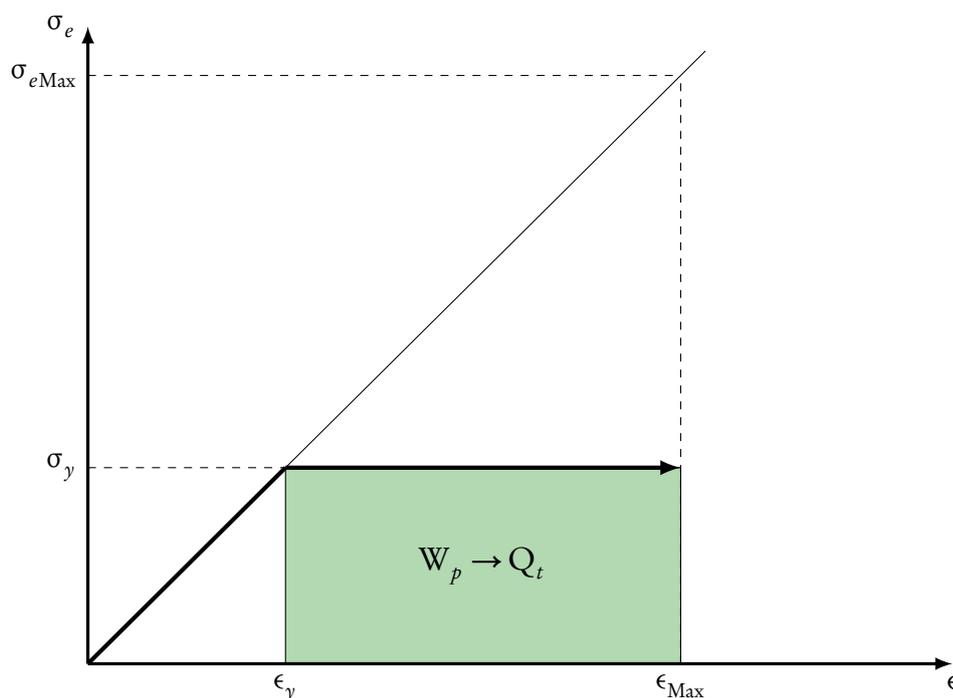


FIGURE 4.1 – Travail mécanique transformé en énergie thermique.

équivalente de la section centrale de la poutre dépasse la contrainte d'écoulement ($\sigma_e > \sigma_y$), le travail des efforts extérieurs qui agissent sur la poutre est transformé en énergie thermique. L'énergie ainsi obtenue est également répartie entre les deux éléments discrets de la poutre. Puis, l'incrément de température est calculé en fonction de la capacité thermique et la masse de chaque élément discret :

$$\Delta\theta_i = \frac{1}{2} \frac{Q_t}{c_p M_i}$$

L'algorithme utilisé pour mettre en place la méthode décrite précédemment est schématisé sur la figure 4.2 de la page 69. L'analyse de ce schéma permet de constater que l'interaction entre la thermique et la mécanique est unidirectionnelle. En d'autres termes, l'aspect mécanique provoque un changement des propriétés thermiques du matériau — augmentation de la température — mais les changements thermiques ne provoquent aucune variation des propriétés mécaniques du matériau — diminution du module d'Young etc. —. Ce fait expliquera certains résultats numériques obtenus dans la section suivante.

La raison pour laquelle un tel modèle d'interaction a été adopté est simple : les lois de comportement thermo-mécaniques dans le domaine des procédés de

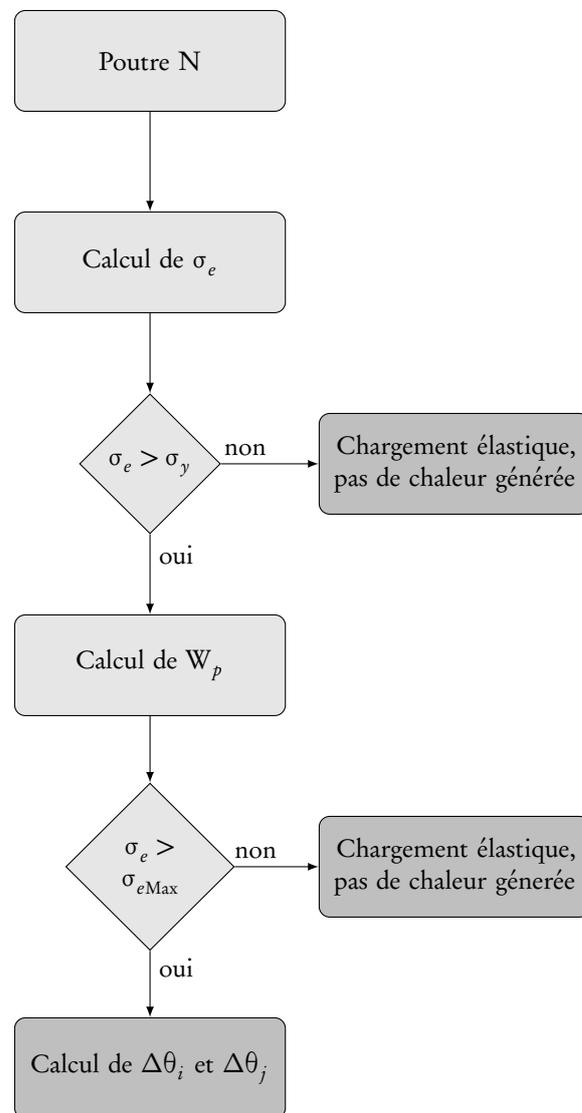


FIGURE 4.2 – Algorithme de calcul de la chaleur générée.

fabrication sont aujourd'hui encore largement sujet à discussion et présentent un véritable verrou scientifique. Un modèle DEM thermo-mécanique complet pourrait être une alternative possible pour forcer ce verrou mais il serait en soi même l'objet unique d'une étude doctorale. Le présent travail n'en est dans cette optique qu'une première étape indispensable.

4.2 ESSAI NUMÉRIQUE DE COMPRESSION AVEC COUPLAGE THERMO-MÉCANIQUE

Afin de valider la méthode décrite dans ce chapitre, une simulation numérique a été réalisée et comparée aux données extraites du travail expérimental de PÉREZ *et al.* Dans ce travail, des éprouvettes cylindriques en alliage d'aluminium 6082 de 7 mm de longueur et 14 mm de diamètre sont soumises à des essais de compression dynamique à différentes températures initiales et différents taux de déformation. La température de l'éprouvette est mesurée par une caméra infrarouge pendant la durée de l'essai. La présence de grands taux de déformation permet de valider l'hypothèse que l'échange de chaleur est nul entre l'éprouvette et l'extérieur, donc, l'éprouvette est considérée adiabatique.

Les valeurs de la température initiale T_0 et le taux de déformation $\dot{\epsilon}$ des essais qui se déroulent dans une chambre adaptée avec une barre d'Hopkinson sont montrées dans les deux premières colonnes de la table 4.1. Les déformations ϵ_E

TABLE 4.1 – Comparaison entre les résultats expérimentaux de [PCR12] (ΔT_E) et les résultats numériques obtenus (ΔT_N).

T_0 (K)	$\dot{\epsilon}$ (s^{-1})	ϵ_E (-)	ΔT_E (K)	ϵ_N (-)	ΔT_N (K)
296	600	0,014	1,4	0,01453	1,05
		0,027	3,0	0,02843	3,30
		0,046	5,8	0,04844	6,44
296	1000	0,026	3,1	0,02737	3,31
		0,047	6,1	0,04948	7,18
		0,070	9,7	0,07369	11,17
		0,092	13,0	0,09685	14,92
373	1500	0,038	3,5	0,03996	5,83
		0,127	15,0	0,13375	22,87
		0,195	20,0	0,20527	37,64

et les augmentations de température ΔT_E obtenues expérimentalement, ainsi que les déformations et augmentations de température numériques — ϵ_N et ΔT_N , respectivement — sont aussi montrées dans les colonnes suivantes. La figure 4.3, de son côté, montre d'une manière graphique les données de la table 4.1. Les courbes pointillées correspondent aux essais numériques et les courbes continues aux résultats expérimentaux.

La divergence — ou manque de parallélisme — des résultats est expliquée par la loi de comportement du matériau. En effet, à la fin de la section précédente le

4.2. Essai numérique de compression avec couplage thermo-mécanique

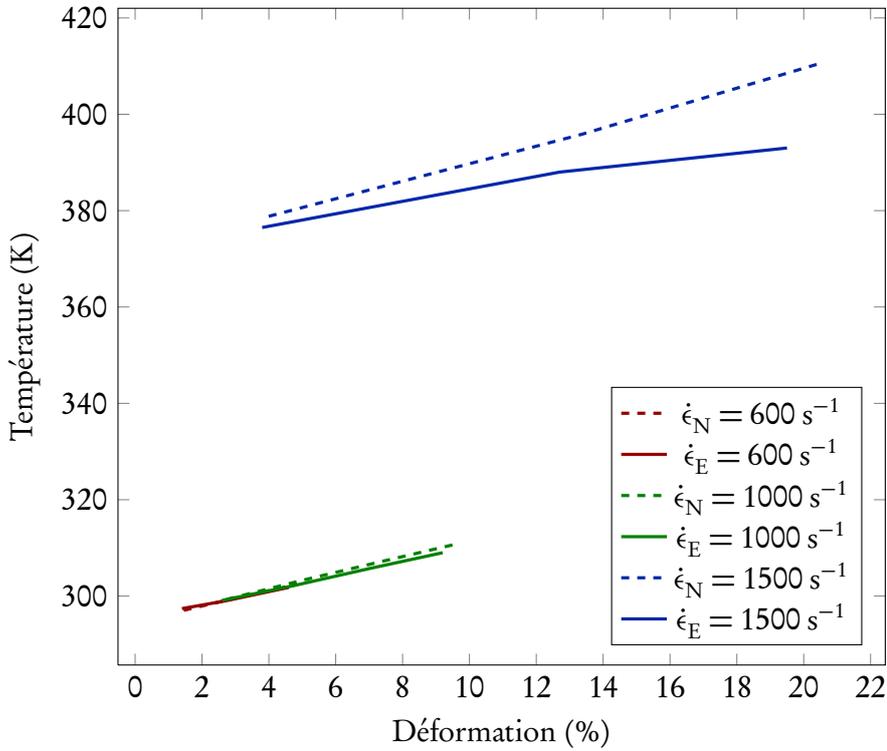


FIGURE 4.3 – Représentation graphique des résultats expérimentaux (courbe continue) et des résultats numériques (en pointillé).

caractère unidirectionnel du couplage thermo-mécanique a été évoqué. Dans le modèle numérique utilisé pour la simulation les propriétés mécaniques ne sont pas altérées par la température du matériau. Le comportement mécanique du matériau serait mieux décrit par une loi du type Johnson-Cook du type :

$$\sigma(\epsilon^p, \dot{\epsilon}^p, T) = [A + B(\epsilon^p)^n] \left(1 + C \ln \frac{\dot{\epsilon}^p}{\dot{\epsilon}_0} \right) (1 - T^{*m})$$

avec

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_{\text{fusion}} - T_0}$$

où l'augmentation de la température fait diminuer la tenue mécanique du matériau. Les coefficients de la loi de Johnson-Cook proposés dans [PCR12] sont montrés dans la table 4.2.

Les courbes de la figure 4.4 montrent le comportement macroscopique en traction de l'éprouvette numérique utilisée pour la simulation — courbe bleue — et le comportement macroscopique en traction du matériau selon le modèle

TABLE 4.2 – Coefficients de Johnson-Cook.

COEFFICIENT	VALEUR	UNITÉ
A	219	MPa
B	276	MPa
n	0,249	-
C	0,025	-
m	1,36	-

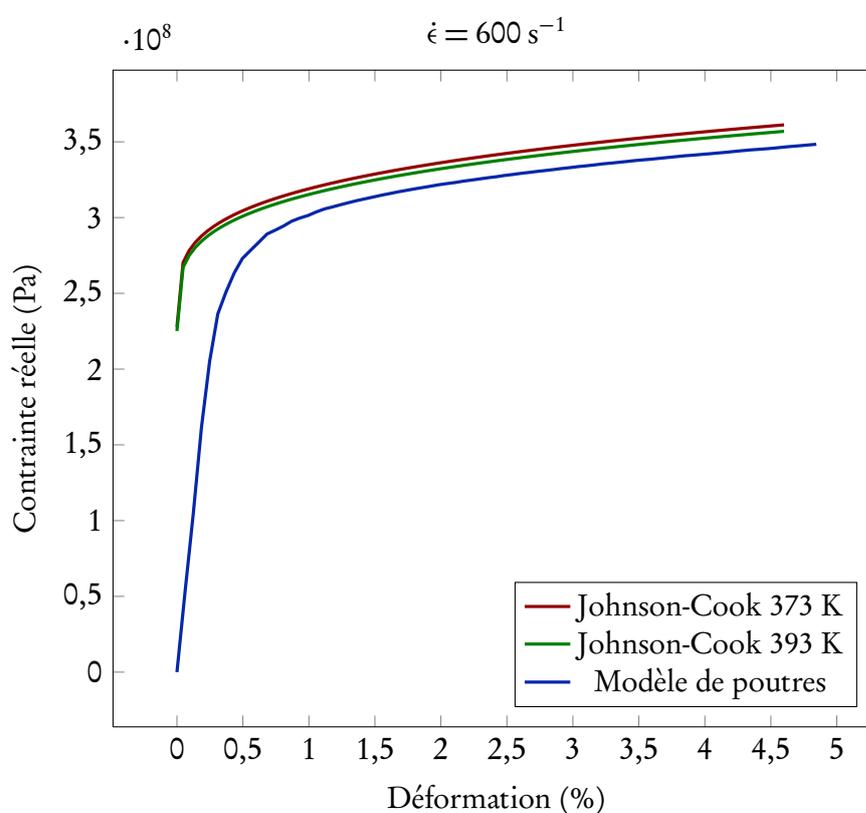


FIGURE 4.4 – Comportement macroscopique des éprouvettes pour les différents modèles utilisés.

de Johnson-Cook à différentes températures — courbes rouge et verte —. La diminution de la tenue mécanique du matériau est facilement observée dans ces dernières courbes. Cette diminution de la tenue provoque à son tour une diminution des efforts plastiques et, en conséquence, une diminution de la chaleur générée. L'adoption d'une loi de comportement de type Johnson-Cook rendrait alors les courbes obtenues des simulations plus parallèles aux courbes expérimentales.

En outre, le décalage entre les résultats numériques et expérimentaux peut être expliqué par le choix des paramètres qui influent sur le comportement thermique de l'éprouvette comme le coefficient de Taylor-Quinney, par exemple. Les courbes — déjà parallèles à cause de l'utilisation d'une loi de type Johnson-Cook — pourraient être rapprochées en faisant varier la valeur de ce coefficient. Ainsi, le modèle DEM semble donc avoir tous les ingrédients pour pouvoir à terme — et après une analyse physique approfondie du comportement du matériau — simuler quantitativement le comportement thermo-mécanique d'un matériau élasto-plastique.

4.3 QUELQUES PREMIERS ÉLÉMENTS POUR L'APPLICATION AU FSW

Un exemple de procédé de fabrication difficile à simuler numériquement dû à la complexité des phénomènes physiques impliqués est le procédé de soudage par friction malaxage. Ce procédé a été largement étudié lors du premier chapitre du présent travail. Les méthodes ensuite développées ont apporté des éléments qui peuvent aider à résoudre les nombreux problèmes qui verrouillaient la simulation de certains aspects du procédé évoqué. Pour servir de base à la validation d'un futur modèle numérique du soudage FSW une étude expérimentale instrumentée a été mise en place.

4.3.1 *Essais expérimentaux de soudage FSW*

Des essais expérimentaux de soudage par friction malaxage ont été menés au sein de l'entreprise IK4-Lortek afin de comparer les résultats avec les résultats des simulations menées avec le présent modèle thermo-mécanique. Dans ces essais l'outil se déplace dans une plaque de matériau continu et pas entre deux plaques différentes afin de simplifier son bridage à la machine, l'acquisition des données et le modèle thermo-mécanique du procédé — dans le sens où il ne faut pas gérer l'interface entre les deux plaques assemblées dans le vrai procédé —.

La position relative des thermocouples dans la plaque ainsi qu'une photo du montage sont montrées dans les figures 4.5 et 4.6 respectivement.

Le matériau utilisé est un alliage d'aluminium 2024-T351 de 12 mm d'épaisseur dont les propriétés sont montrées dans la table 3.7 du chapitre précédent. Les thermocouples ont été placés à différentes profondeurs — 3 mm, 6 mm et 9 mm — afin d'étudier l'évolution du champ de températures en 3 dimensions.

Les conditions des essais sont résumées dans la table 4.3.

Le plan de l'outil utilisé dans les essais est montré sur la figure F.1 de l'annexe F et une photo de son pion est montrée sur la figure 4.7. Il a été fabriqué en acier M42 et des traitements thermiques lui ont été appliqués — une trempe et trois revenus —

4. SIMULATION DEM THERMO-MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

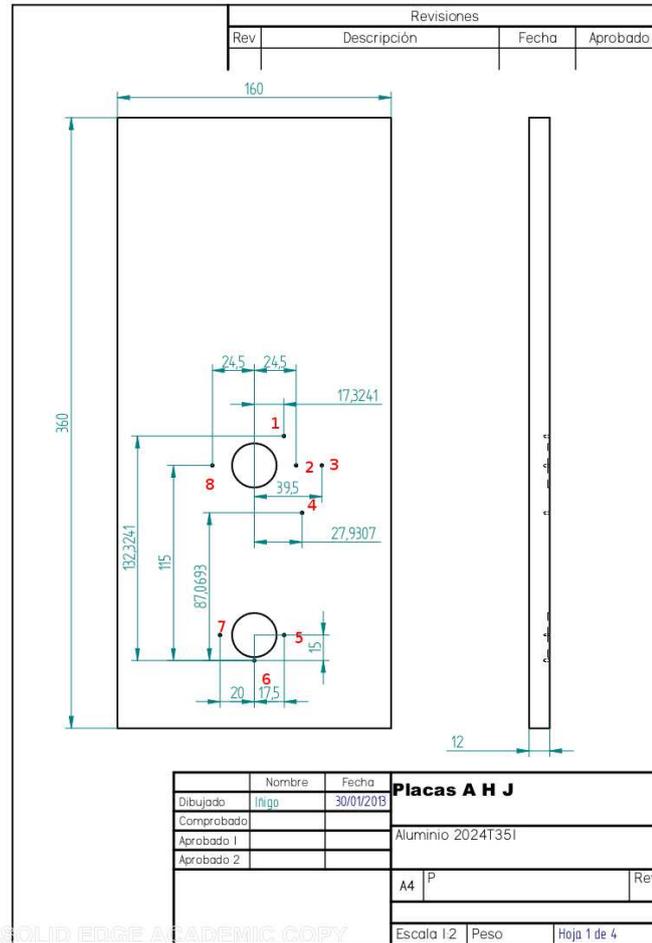


FIGURE 4.5 – Position relative des thermocouples (mm).

TABLE 4.3 – Conditions des essais.

PARAMÈTRE	VALEUR	UNITÉ
Vitesse de rotation	320	tr/min
Vitesse d'avance	125	mm/min
Angle de tilt	1	°
Force de pénétration	35586	N

pour obtenir une dureté d'environ 60 HRC et les courbes de température obtenues lors des essais sont montrées dans les figures 4.8, 4.9 et 4.10.

4.3. Quelques premiers éléments pour l'application au FSW

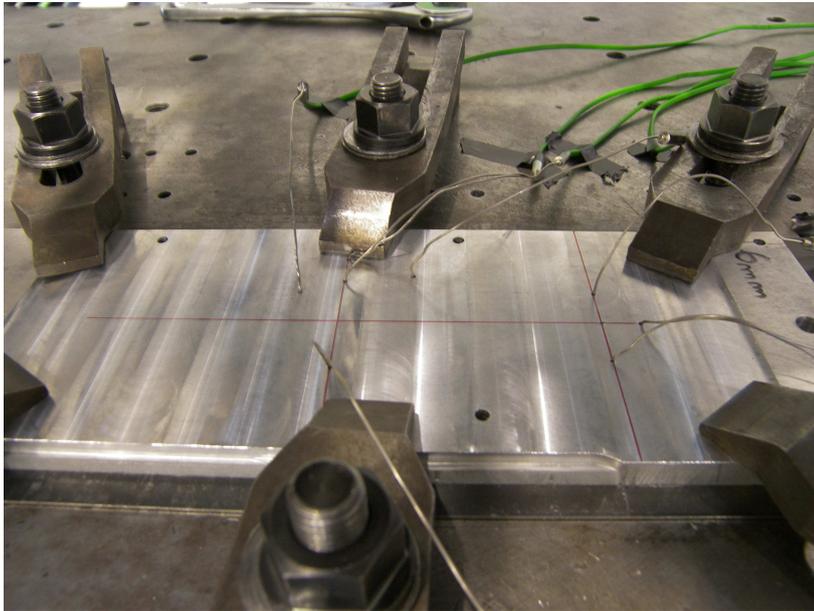


FIGURE 4.6 – Montage expérimental.

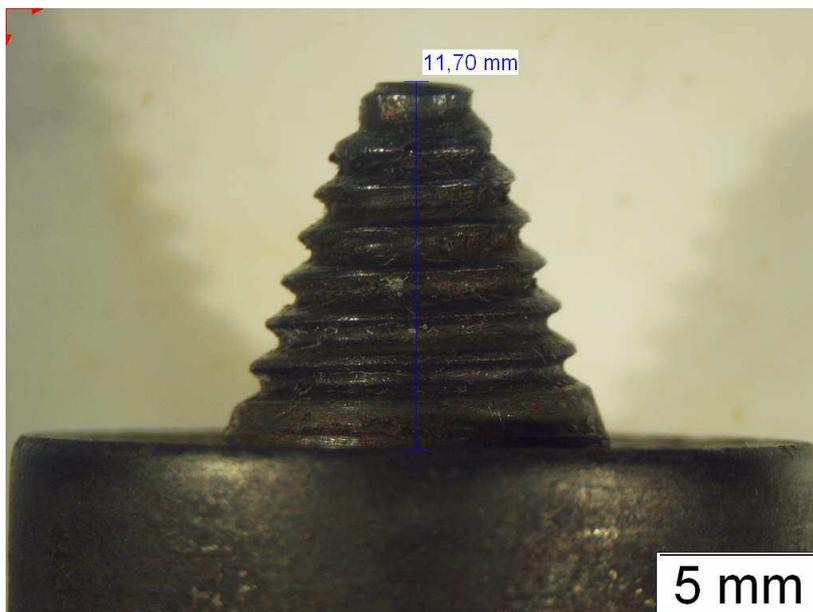


FIGURE 4.7 – Détail du pion de l'outil utilisé.

En dehors des aspects numériques, les données obtenues sont très didactiques du point de vue du procédé FSW. Ainsi, la dissymétrie du champ de vitesses par rapport au plan de soudure mentionnée dans la section 1.1 du premier chapitre est

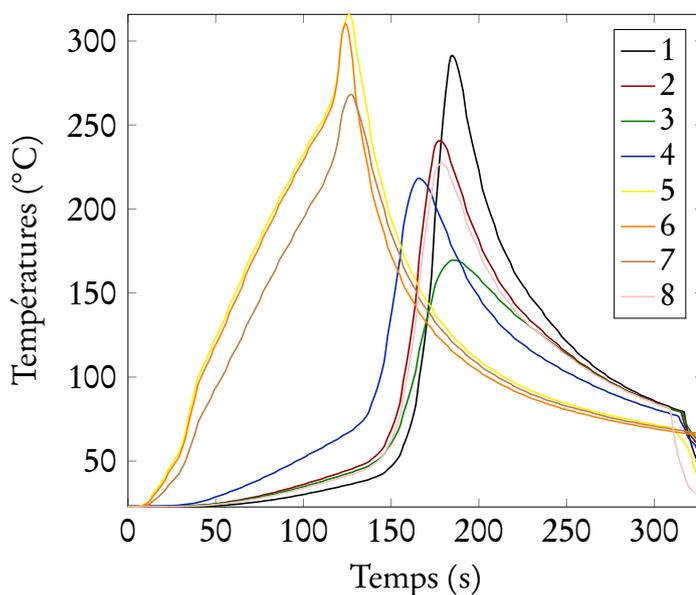


FIGURE 4.8 – Températures aux points de contrôle de la plaque « A » (thermocouples à 6 mm de profondeur). La position des thermocouples est montrée dans la figure 4.5.

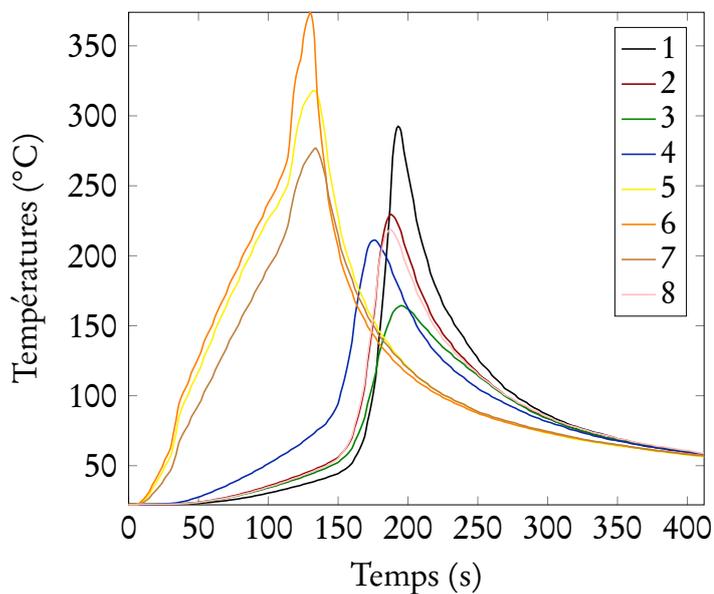


FIGURE 4.9 – Températures aux points de contrôle de la plaque « B » (thermocouples à 3 mm de profondeur). La position des thermocouples est montrée dans la figure 4.5.

révélée en comparant les courbes des points de contrôle 2 et 8. En effet, l'outil passe au même instant à la même distance des deux points, mais le fait que le point 2 soit

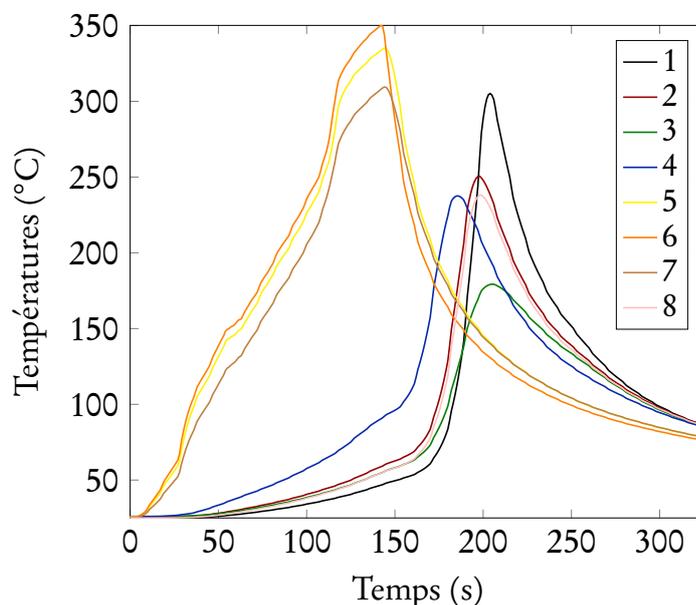


FIGURE 4.10 – Températures aux points de contrôle de la plaque « C » (thermocouples à 9 mm de profondeur). La position des thermocouples est montrée dans la figure 4.5.

du côté *advancing side* fait que la température enregistrée est plus élevée.

L'effet de la profondeur dans le champ de températures est montré dans les figures F.2 et F.3 de l'annexe F. Dans ces figures l'effet de la profondeur dans le champ de températures peut être comparé pour chaque point de contrôle. Les températures les plus élevées ont été obtenues à une profondeur de 9 mm sauf dans le cas du point numéro 6. Ce résultat n'était pas attendu car la source principale de chaleur est localisée dans la zone de contact entre l'épaule et la plaque, donc près de la surface. L'échange de chaleur entre la plaque et l'environnement extérieur peut expliquer ce phénomène. Néanmoins, plusieurs essais seront faits pour vérifier cette hypothèse. Les informations extraites de cette expérience simple serviront de base de donnée pour une première simulation DEM thermo-mécanique.

4.3.2 Essais numériques de soudage FSW

Le présent paragraphe explique la mise en place d'un premier modèle DEM très simple montrant la possibilité de traiter la thermo-mécanique du contact outil matière.

Malheureusement, et dû aux problèmes liés au temps de calcul des méthodes DEM évoqués dans la section 1.5 du chapitre 1, il est impossible de faire une simulation complète des essais expérimentaux décrits au paragraphe précédent et même la simple simulation de la plongée de l'outil dans la matière serait énormé-

ment coûteuse. La solution passerait par un couplage entre la méthode DEM et une méthode continue. Une méthode pour coupler la DEM et la CNEM a été développée dans le domaine élastique [JCD⁺13] et elle peut désormais être utilisée directement dans des zones suffisamment éloignées du contact outil-matière, or, le couplage thermo-mécanique doit encore être développé. En effet, il faut prendre en compte la conduction de la chaleur sur la totalité de la pièce et, pour le moment, une modélisation DEM à une telle échelle est rédhibitoire en terme de temps de calcul.

Néanmoins, et en attendant la résolution des problèmes liés au couplage DEM-CNEM, la versatilité de la plate-forme de calcul par éléments discrets *GranOO* permet de modéliser l'outil à partir des fichiers CAO et de le faire interagir avec une petite plaque numérique du matériau désiré pour mettre en place les différentes lois de contact trouvées dans la bibliographie [RIRB08, FE07, FGE07].

Dans cette première expérience numérique, le premier millimètre de la pointe du pion de l'outil FSW utilisé lors des essais expérimentaux décrits au paragraphe précédent a été numérisé avec le logiciel de CAO *CATIA*. La figure 1.1 montre le résultat de cette numérisation.

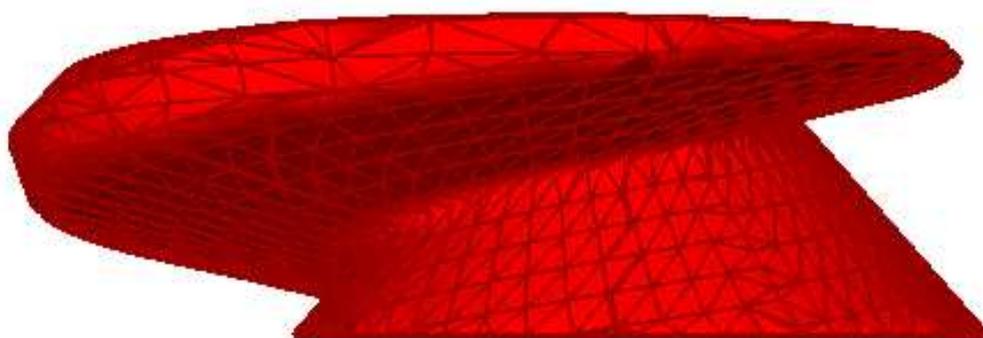


FIGURE 4.11 – Élément discret polyédrique représentant la pointe d'un pion fileté.

Le fichier de sortie de *CATIA* est considéré par la plate-forme de calcul *GranOO* comme un élément discret de forme polyédrique. La loi d'interaction entre cet élément discret et le reste des éléments discrets qui représentent le matériau est strictement répulsive et perpendiculaire à la surface de la facette du polyèdre la plus proche du barycentre de l'élément discret en contact. Il n'y a pas de frottement entre l'élément discret polyédrique et les éléments du domaine. Les échanges thermiques du polyèdre sont aussi nuls.

Une fois la pointe du pion ainsi que le reste des éléments discrets du domaine créés, le polyèdre commence à tourner à une vitesse de rotation de 1000 tours par minute et à descendre à 0,25 m par seconde.

La plongée de l'outil dans la matière crée une source de chaleur par déformation plastique de la plaque. L'image 4.12 illustre la faisabilité numérique de cette expérience utilisant la modélisation thermo-mécanique développée dans ce chapitre.

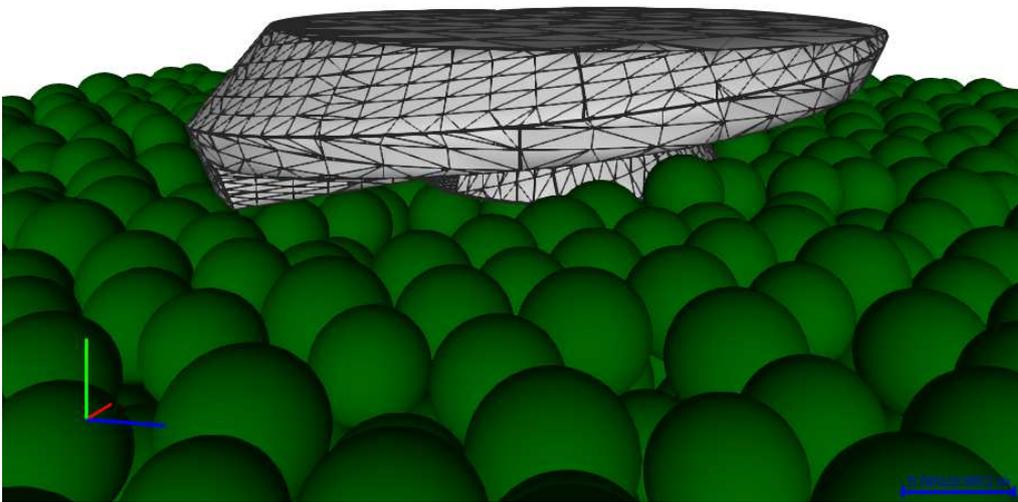


FIGURE 4.12 – Modélisation thermo-mécanique DEM de la pénétration du pion dans une éprouvette d'aluminium.

4.4 CONCLUSIONS

Les conclusions suivantes peuvent être extraites de ce chapitre :

- Le couplage de la méthode thermique du chapitre 2 et de la méthode mécanique du chapitre 3 est très simple et donne des résultats numériques du même ordre de grandeur que les résultats expérimentaux.
- Les méthodes désormais développées avec la méthode DEM pour traiter l'aspect mécanique et l'aspect thermique des domaines granulaires peuvent être directement intégrées dans la plate-forme de calcul utilisée tout au long de ce document. Cela fait que le couplage entre les domaines granulaires et continus soit direct et naturel.

4. SIMULATION DEM THERMO-MÉCANIQUE D'UN MATÉRIAU CONTINU ÉLASTO-PLASTIQUE

- Le développement d'une méthode pour calculer la chaleur évacuée par convection permettrait de comparer plus précisément les résultats numériques avec des résultats expérimentaux.
- Le couplage DEM-CNEM est nécessaire pour pouvoir mener au but des simulations des procédés réels en un temps raisonnable.
- Le modèle DEM développé dans ce chapitre semble avoir tous les ingrédients nécessaires pour simuler quantitativement le comportement thermo-mécanique des alliages d'aluminium. Il faudrait néanmoins qu'une étude approfondie sur les interactions thermo-mécaniques du matériau soit menée pour arriver à ce but.

Conclusions et perspectives

5.1 CONCLUSIONS

Un résumé des conclusions extraites des différentes études menées dans chaque chapitre de ce travail de thèse est présenté par la suite :

5.1.1 *Choix de la méthode*

La méthode des éléments discrets a été choisie à cause de sa naturelle adaptation aux problèmes de contact multi-corps et, plus généralement, aux problèmes liés à la tribologie.

Un des objectifs de ce travail de thèse a été de développer une technique pour simuler le comportement thermique et le comportement mécanique des matériaux continus à partir d'une formulation discrète. Plus précisément, le comportement mécanique du matériau continu à simuler est du type élasto-plastique endommageable.

L'obtention d'un tel modèle va permettre de faire le lien entre la problématique discrète et la problématique continue pour pouvoir ainsi traiter chacune avec la méthode la plus adaptée à ses besoins particuliers.

5.1.2 *Thermique continue*

La simulation de la conduction de la chaleur à travers d'un milieu continu à partir d'une formulation discrète a été traitée dans le chapitre 2. Cette méthode est rapide, efficace et simple, le nombre de voisins des éléments discrets étant le seul paramètre utilisé en dehors des propriétés thermiques du matériau. L'erreur relative commise avec cette méthode est acceptable même dans des cas complexes où de forts gradients de température sont présents.

En ce qui concerne le couplage avec des méthodes continues, il est relativement facile à implémenter à cause de la nature scalaire du champ de températures. En

effet, le travail de [HGF13] vérifie sa faisabilité et montre en plus que ce couplage fait diminuer notablement le temps de calcul.

La méthode décrite dans ce chapitre a fait l'objet d'une publication [TIC13].

5.1.3 Mécanique continue

La simulation d'un matériau élasto-plastique endommageable avec la méthode de éléments discrets donne des résultats quantitativement bons pour des expériences de traction et de chargement cyclique.

L'endommagement du matériau n'a pas fait l'objet d'une étude approfondie dans ce travail, mais l'algorithme de recherche de micro-fissures proposé dans le paragraphe 3.1.5 de la page 48 donne des pistes pour une future recherche à ce sujet.

Ce travail de thèse a aussi mis en évidence la difficulté de calibration existante pour trouver des comportements mécaniques macroscopiques désirés à partir des méthodes basées sur forces issues des potentiels. Cette méthode a cependant l'avantage de pouvoir simuler des grandes déformations sans pour autant déclencher l'endommagement du matériau, phénomène trouvé dans des procédés comme le soudage par friction malaxage, par exemple.

Un autre résultat à remarquer dans ce bilan est la constatation des différents mécanismes qui déclenchent un comportement plastique au niveau macroscopique :

- Dans la méthode basée sur les forces issues du potentiel de Lennard-Jones la plasticité est causée par le ré-arrangement des éléments discrets au sein du domaine.
- Dans la méthode basée sur les forces issues des liens microscopiques, par contre, le comportement plastique doit être imposé aux liens qui causent les forces et moments sur les éléments discrets.

Les méthodes étudiées dans ce chapitre ont été présentées aux congrès ECCOMAS 2012 et CSMA 2013.

5.1.4 Couplage thermo-mécanique

La méthode de couplage étudiée au chapitre 4 est simple et facile à implémenter dans le code de calcul utilisé au long de ce travail de thèse. Malgré sa simplicité, elle est capable de s'approcher des résultats expérimentaux trouvés dans la bibliographie [PCR12]. L'avantage principal du couplage développé est la facilité dont les travaux existants en mécanique et thermique des milieux granulaires peuvent être ajoutés au code de calcul. La méthode de modélisation par éléments discrets thermo-mécanique du matériau développée pourra donc être couplée facilement avec la modélisation par éléments discrets thermo-mécanique des interfaces développée par les travaux de RICHARD [RIRB08]. Le problème de l'interface outil matière et du comportement

du matériau dans son écoulement autour de l'outil pourront donc être modélisés au sein d'une même simulation par éléments discrets.

En plus des essais numériques, des essais expérimentaux instrumentés qui serviront à la validation d'un futur modèle thermo-mécanique amélioré ont été menés. Ils mettent en valeur la complexité du champ de température dynamique créé lors du procédé FSW.

Le modèle de couplage développé dans ce chapitre a été proposé pour le congrès WCCM 2014 qui se déroulera à Barcelone le mois de juillet de 2014.

5.2 PERSPECTIVES

Deux différentes voies exploratoires sont envisagées afin d'améliorer les performances des simulations en terme de comportement : l'amélioration du modèle et la réduction du temps de calcul.

En effet, ce travail a montré que des lois de comportement très simples nous permettent de retrouver le comportement mécanique macroscopique désiré. Or, l'influence de la température dans le comportement mécanique reste inexplorée et devrait être le sujet d'une étude plus approfondie. Un autre aspect du modèle susceptible d'être amélioré est le mécanisme d'endommagement. Ce mécanisme utilise un critère très simple pour identifier la création de micro-fissures à l'intérieur du matériau qui est lié à un paramètre C dont son influence sur l'endommagement n'a pas été objet d'une étude détaillée. Le critère de création de micro-fissures pourrait éventuellement être enrichi avec la possibilité de re-crédation des liens cassés pour permettre des très grandes déformations au sein du matériau simulé. Finalement, l'introduction d'un modèle métallurgique capable de calculer la concentration et la taille des précipités en fonction des conditions thermo-mécaniques locales serait très utile pour prédire, en l'occurrence, la tenue mécanique des joints soudés par FSW.

En ce qui concerne la réduction du temps de calcul, la première option envisagée — et désormais en cours d'étude — est le couplage de la méthode DEM avec une méthode de simulation basée sur la mécanique des milieux continus comme, par exemple, la FEM ou la C-NEM. Une deuxième option, moins originale mais en principe plus facile à implémenter, est la parallélisation du code de calcul. Cette option a été déjà mise en place pour le programme de création de domaines discrets mais le calcul de la boucle principale est encore mené par un seul processeur. Les améliorations dues à la parallélisation du code les plus importantes sont attendues dans les domaines à grand nombre d'éléments discrets, car un calcul parallélisé sur un petit domaine discret peut être plus long qu'un calcul non parallélisé dû au coût des algorithmes de parallélisation. Il faudra sans aucun doute travailler sur le couplage et la parallélisation simultanément pour pouvoir simuler un domaine représentatif sur une durée suffisante.

5. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

L'amélioration des performances des simulations en terme de comportement permettrait à moyen terme de concevoir des essais expérimentaux simples qui pourraient valider les résultats numériques obtenus. Cela permettrait de calibrer le comportement thermique, mécanique et métallurgique des matériaux numériques.

Géométrie des outils FSW

Cette annexe a pour objectif de montrer la variété de géométries des outils FSW couramment utilisés dans l'industrie. Les différences les plus remarquables se trouvent principalement dans le pion. Celui-ci peut être lisse ou fileté et peut en plus posséder des cannelures qui ont pour but de stimuler le flux de matière autour de l'outil. L'épaulement peut lui-même aussi avoir des variations géométriques comme, par exemple, des spirales gravées, avec le même objectif d'augmenter le flux de matière et le frottement créé.

A.1 EXEMPLES D'OUTILS FSW

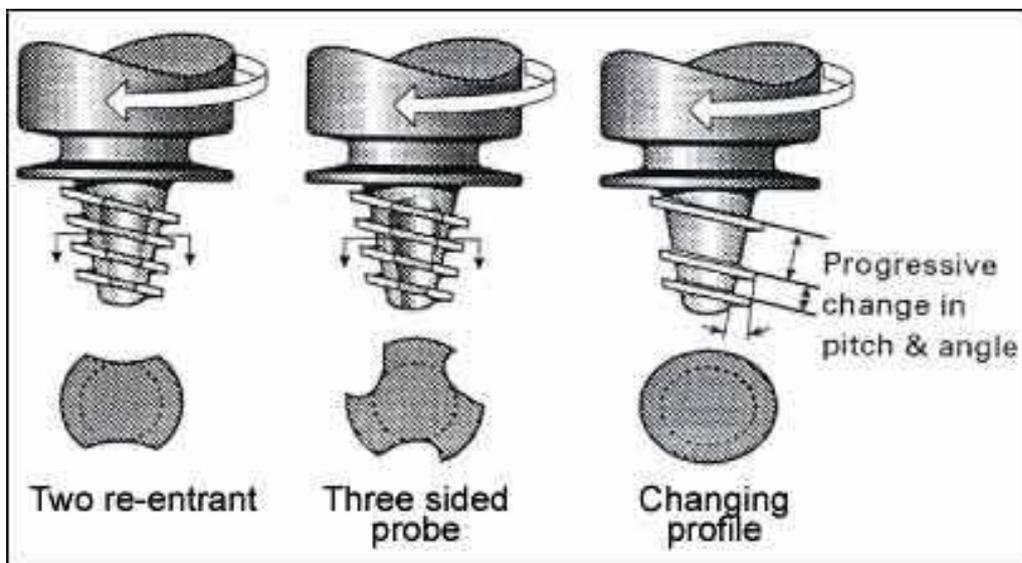


FIGURE A.1 – Image obtenue du site www.twi.co.uk.



FIGURE A.2 – Image obtenue du site www.tritontooling.co.uk.



FIGURE A.3 – Image obtenue du travail de VIJAY *et al.* [VM10].



FIGURE A.4 – Image obtenue du site www.twi.co.uk.

B

Méthode LCM

Comme mentionné dans le paragraphe 1.3.1, page 18, l'idée de base de la méthode LCM consiste à diviser le domaine discret en cellules pour limiter la recherche de contacts aux éléments discrets appartenant à des cellules voisines. Afin de faire cela, il faut d'abord définir la taille α de la cellule (voir : figure B.1), qui doit être au moins plus grande que le plus grand diamètre de l'ensemble des particules \varnothing_{max} . Une taille plus petite peut amener à ne pas trouver des contacts qui sont effectivement présents dans le domaine. Néanmoins, une taille trop grande amène à la perte d'efficacité de la méthode. Des jeux d'essai menés ont montré que le choix d'une taille de cellule α égale à $k \cdot \varnothing_{max}$, k étant égal à 1,004, donne un résultat adéquat.

Une fois α fixé, le numéro de colonnes, lignes et couches du domaine discrétisé est choisi. Le nombre total de colonnes est appelé C, et les nombres de lignes et de couches totales sont appelés R et L — *Row* et *Layer* en anglais, figure B.1 —. Il est à prévoir qu'il y aura des particules qui peuvent sortir du domaine — dans le cas des frontières périodiques, par exemple —. Afin que ce fait ne pose pas de problèmes, le domaine des cellules est libre de dépasser le domaine des particules.

Après avoir décidé le numéro de cellules et de les placer dans le domaine discret, il faut définir à quelle cellule appartient chaque élément discret en calculant les coordonnées de la cellule avec la formule :

$$\begin{aligned}c &= \left\lfloor \frac{x_i - x_m}{X} \right\rfloor + 1 \\r &= \left\lfloor \frac{y_i - y_m}{Y} \right\rfloor + 1 \\l &= \left\lfloor \frac{z_i - z_m}{Z} \right\rfloor + 1\end{aligned}$$

où la fonction $\lfloor \cdot \rfloor$ représente la partie entière de \cdot ; c , r et l représentent les coordonnées de la cellule de l'élément discret ; x_i , y_i et z_i les coordonnées de l'élément

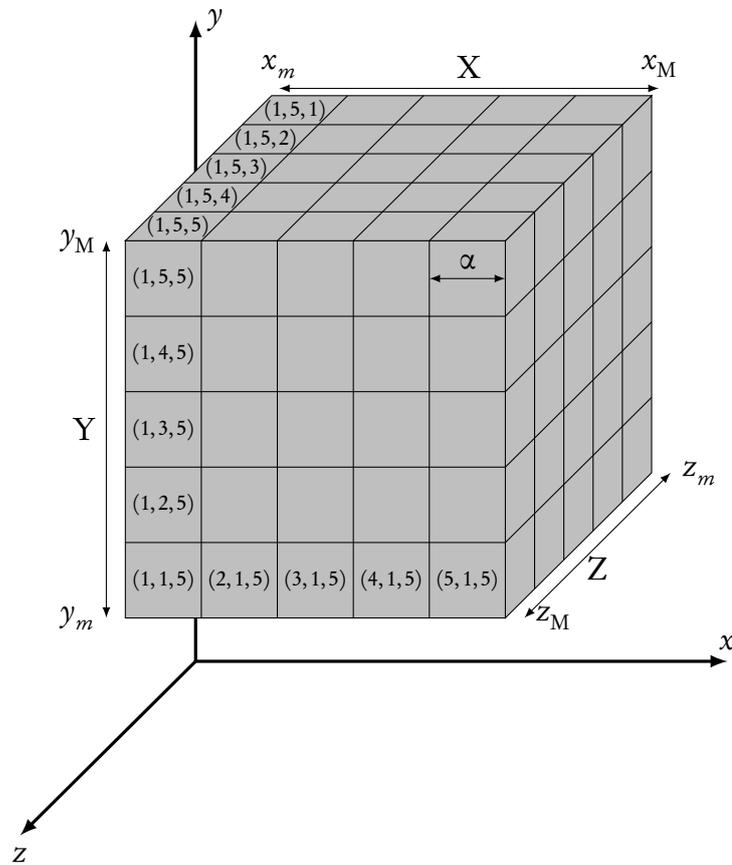


FIGURE B.1 – Domaine discrétisé en cellules.

discret ; x_m , y_m et z_m l'origine du domaine discrétisé et X , Y , Z la longueur totale du domaine selon x , y et z (voir : figure B.1).

Une fois que les éléments discrets sont affectés aux cellules, c'est le moment de trouver les contacts entre éléments discrets. Dû à la façon choisie de discrétiser le domaine, les contacts peuvent seulement apparaître entre éléments appartenant à la même cellule ou entre éléments contenus dans des cellules adjacentes. Étant donné qu'il ne faut rechercher les contacts entre les éléments d'une cellule i avec les éléments d'une cellule j que dans un seul sens (parce-que les résultats de la recherche dans le sens contraire vont être égaux), on peut optimiser le processus de recherche de la façon suivante :

- Une cellule donnée de coordonnées $[c, r, l]$ — cellule rouge sur la figure B.2 — est regardée et tous les contacts entre les éléments discrets qui contient sont enregistrés.
- Ensuite, pour chaque élément discret de la cellule rouge les contacts avec les

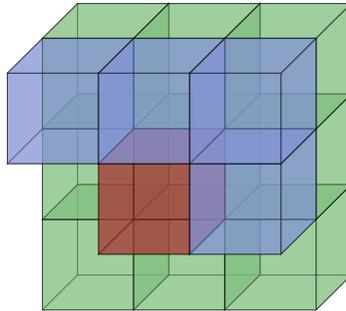


FIGURE B.2 – Cellules avec contacts potentiels.

éléments discrets des cellules bleues — avec les coordonnées $[c + 1, r, l]$ et $[c + j, r + 1, l]$ avec $j = [-1, 0, 1]$ — sont enregistrés.

- Finalement, les contacts entre les éléments discrets de la cellule rouge et les éléments discrets des cellules vertes sont identifiés et enregistrés — coordonnées $[c + j, r + j, l + 1]$ avec $j = [-1, 0, 1]$ —.

Cette méthode garantit la découverte de tous les contacts entre les éléments discrets du domaine. Ainsi, les lois d'interaction des méthodes DEM mécaniques qui seront exposées par la suite vont pouvoir être appliquées aux éléments discrets en contact avec toutes les garanties nécessaires.



Adimensionnement des paramètres mécaniques

Afin que deux matériaux aient le même comportement mécanique indépendamment de la taille moyenne des ses éléments discrets, les valeurs adimensionnés des paramètres qui définissent leur comportement mécanique doivent être identiques. Ayant en tête l'adimensionnement du modèle mécanique, on a choisi les paramètres suivants comme référence :

C.1 LONGUEUR

Le rayon moyen des éléments discrets a été choisi comme longueur de référence.

$$L_{\mu} = R_m$$

C.2 MASSE

La masse de référence a été calculée à partir de la densité du matériau continu.

$$M_{\mu} = \rho_0 R_m^3$$

C.3 TEMPS

Le pas de temps de référence est calculé à partir du module d'Young E_{μ} . Si on fait l'analyse dimensionnel :

$$\begin{aligned} [E_\mu] &= \text{N m}^{-2} = \text{kg m s}^{-2} \text{ m}^{-2} \\ &= \text{kg m}^{-3} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2} \\ &= [\rho_0] \cdot [R_m]^2 \cdot [T_\mu]^{-2} \end{aligned}$$

Le pas de temps de référence retenu est alors :

$$T_\mu = R_m \sqrt{\frac{\rho_0}{E_\mu}}$$

C.4 PARAMÈTRES ADIMENSIONNÉS

Voici l'adimensionnement de quelques paramètres utilisés lors des calculs mécaniques :

C.4.1 Raideur de contact

$$\bar{K} = \frac{K}{[\text{kg m s}^{-2} \text{ m}^{-1}]} = K \frac{T_\mu^2}{M_\mu} = K \frac{\left(R_m \sqrt{\frac{\rho_0}{E_\mu}}\right)^2}{\rho_0 R_m^3} = \frac{K}{E_\mu R_m}$$

C.4.2 Force maximale d'attraction

$$\bar{\gamma} = \frac{\gamma}{[\text{kg m s}^{-2}]} = \gamma \frac{T_\mu^2}{M_\mu L_\mu} = \gamma \frac{\left(R_m \sqrt{\frac{\rho_0}{E_\mu}}\right)^2}{\rho_0 R_m^4} = \frac{\gamma}{E_\mu R_m^2}$$

C.4.3 Distance maximale d'interaction

$$\bar{d}_{max} = \frac{d_{max}}{[\text{m}]} = \frac{d_{max}}{L_\mu} = \frac{d_{max}}{R_m}$$

C.4.4 Vitesse

$$\bar{v} = \frac{v}{[\text{m s}^{-1}]} = v \frac{T_\mu}{L_\mu} = v \frac{R_m \sqrt{\frac{\rho_0}{E_\mu}}}{R_m} = v \sqrt{\frac{\rho_0}{E_\mu}}$$

C.4.5 Coefficient de dissipation

$$\bar{c}_d = \frac{c_d}{[\text{kg m}^{-1}]} = c_d \frac{L_\mu}{M\mu} = c_d \frac{R_m}{\rho_0 R_m^3} = \frac{c_d}{\rho_0 R_m^2}$$

Modification du potentiel Lennard-Jones

Pour pouvoir maîtriser les paramètres mentionnés dans le paragraphe 3.1.1 du chapitre 3, le potentiel va être re-défini comme suit ¹ :

$$V_M(\delta) = \frac{\epsilon}{k} \left[\left(\frac{\delta_{eq}}{k(\delta - b)} \right)^n - 2 \left(\frac{\delta_{eq}}{k(\delta - b)} \right)^m \right]$$

En dérivant le nouveau potentiel la force entre les éléments discrets F_M est obtenue :

$$-\frac{dV_M}{d\delta} = F_M(\delta) = -\epsilon \left[\frac{n \delta_{eq}^n}{(k(\delta - b))^{n+1}} - \frac{2m \delta_{eq}^m}{(k(\delta - b))^{m+1}} \right]$$

si $n = 12$ et $m = 6$, la condition pour que δ_{eq} soit la distance d'équilibre entre deux éléments discrets est ² :

$$F_M(\delta_{eq}) = 0 \Leftrightarrow \frac{12\delta_{eq}^{12}}{(k(\delta_{eq} - b))^{13}} = \frac{12\delta_{eq}^6}{(k(\delta_{eq} - b))^7} \Rightarrow \delta_{eq}^6 = (k(\delta_{eq} - b))^6$$

$$\Rightarrow \delta_{eq} = \frac{\delta_{eq}}{k} + b \quad (D.1)$$

Ainsi, la condition pour que δ_{max} soit la distance de force maximale d'attraction est :

$$\left. \frac{dF_M}{d\delta} \right|_{\delta_{max}} = 12k\epsilon \left[\frac{-13\delta_{eq}^{12}}{(k(\delta_{max} - b))^{14}} - \frac{-7\delta_{eq}^6}{(k(\delta_{max} - b))^8} \right] = 0$$

1. Si $k = 1$ et $b = 0 \Rightarrow V_M = V_{LJ}$.
2. Il faut vérifier la condition $k(\delta_{eq} - b) > 0$.

$$\Rightarrow \frac{13}{7} \delta_{eq}^6 = (k (\delta_{max} - b))^6 \Rightarrow \delta_{max} = \sqrt[6]{\frac{13}{7} \frac{\delta_{eq}}{k}} + b \quad (D.2)$$

D.1 BILAN

Le potentiel modifié dévient alors :

$$V_M(\delta) = A \left[\left(\frac{\delta_{eq}}{B\delta - C} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\delta_{eq}}{B\delta - C} \right)^6 \right] \quad (D.3)$$

Et la nouvelle force est :

$$F_M(\delta) = D \left(\frac{\delta_{eq}^{12}}{(B\delta - C)^{13}} - \frac{\delta_{eq}^6}{(B\delta - C)^7} \right) \quad (D.4)$$

Avec les constantes :

$$\begin{aligned} A &= \epsilon \frac{\delta_{max} - \delta_{eq}}{\delta_{eq} \left(\sqrt[6]{\frac{13}{7}} - 1 \right)} & B &= \delta_{eq} \frac{\sqrt[6]{\frac{13}{7}} - 1}{\delta_{max} - \delta_{eq}} \\ C &= \delta_{eq} (B - 1) & D &= 12\epsilon \end{aligned}$$

D.1.1 Remarques :

La force d'attraction maximale $F_M(\delta_{max})$ est maintenant fixée avec le paramètre D , mais ϵ ne représente plus la valeur minimale du nouveau potentiel. Dans les cas où $b < 0$ la force $F_M(0)$ a une valeur finie, fait qui permet une interpénétration totale de deux éléments discrets mais qui évite aussi une éventuelle erreur numérique.

Boucle de calcul principale

E.1 FORCE ISSUE D'UN POTENTIEL

```

<Gran00 Version="1.0">

  <ComputeProblem OutDir="TractionTest" TotIteration="200000"/>
  <SampleFile File="./AA2024T351.gdd"/>

  <PreProcessing>
    <PlugIn Id="SetDensity3D" Density="2790" set="Global"/>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D"/>
    <PlugIn Id="SetCapteur"/>
    <PlugIn Id="DeleteBonds3D"/>
    <PlugIn Id="ContactFinder" ActionRadius="1.2"/>
    <PlugIn Id="SurfaceCreator" C="0.4"/>
    <PlugIn Id="ComputeOptimalTimeStep3D" Ratio="0.3" />
  </PreProcessing>

  <Processing>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D" IterLoop="3000"/>
    <PlugIn Id="Check3D" />
    <PlugIn Id="ResetLoad3D" />
    <PlugIn Id="ApplyBoundaryCondition3D" />
    <PlugIn Id="ContactFinder" ActionRadius="1.2"/>
    <PlugIn Id="SurfaceCreator" C="0.4"/>
    <PlugIn Id="ComputePiecewiseForce" k="1500000" gamma="25" c="0.08"/>
    <PlugIn Id="WriteSensorData3D" IterLoop="100" />
    <PlugIn Id="Verlet"/>
    <PlugIn Id="RemoveLonelyElements" MinimalBonds="3" IterLoop="100"/>
  </Processing>

  <PostProcessing>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D"/>
  </PostProcessing>

</Gran00>

```

E.2 FORCE ISSUE D'UN LIEN MICROSCOPIQUE

```
<Gran00 Version="1.0">

  <ComputeProblem OutDir="TractionTest" TotIteration="200000" />
  <SampleFile File="./AA2024T351.gdd"/>

  <PreProcessing>
    <PlugIn Id="SetDensity3D" Density="2790" set="Global"/>
    <PlugIn Id="SetThermalParameters" Temperature="298."
      Conductivity="134." Cp="880." set="Global"/>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D"/>
    <PlugIn Id="SetCapteur"/>
    <PlugIn Id="DeleteBonds3D"/>
    <PlugIn Id="NeighbourFinder" NeighbourActionRadius="1.2"/>
    <PlugIn Id="CreateSetOfSurface"/>
    <PlugIn Id="BondCreatorAndNeighbourFinder" BondActionRadius="1.0"
      NeighbourActionRadius="1.2" YoungModulus="75000000000"
      YieldStrain="0.005" RadiusRatio="0.5" MaxStrain="1.0"/>
    <PlugIn Id="SurfaceCreator" C="0.7"/>
    <PlugIn Id="ComputeOptimalTimeStep3D" Ratio="0.3" />
  </PreProcessing>

  <Processing>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D" IterLoop="3000"/>
    <PlugIn Id="Check3D" />
    <PlugIn Id="ResetLoad3D" />
    <PlugIn Id="BondCreatorAndNeighbourFinder" BondActionRadius="1.0"
      NeighbourActionRadius="1.2" YoungModulus="75000000000"
      YieldStrain="0.005" RadiusRatio="0.5" MaxStrain="1.0"/>
    <PlugIn Id="SurfaceCreator" C="0.7"/>
    <PlugIn Id="Conductivity" set="Global"/>
    <PlugIn Id="ApplyBondLoad3D" DeleteDisabledBonds="Yes"/>
    <PlugIn Id="RemoveLonelyElements" MinimalBonds="3" IterLoop="100"/>
    <PlugIn Id="WriteSensorData3D" IterLoop="100" />
    <PlugIn Id="IntegrateAccelerationLinear3D"/>
    <PlugIn Id="IntegrateAccelerationAngular3D"/>
    <PlugIn Id="ApplyBoundaryCondition3D" />
    <PlugIn Id="UpdateDiscreteShape3D" IterLoop="100" />
    <PlugIn Id="ComputeOptimalTimeStep3D" Ratio="0.3" IterLoop="100"/>
  </Processing>

  <PostProcessing>
    <PlugIn Id="SaveDomain3D"/>
  </PostProcessing>

</Gran00>
```

Plan de l'outil FSW

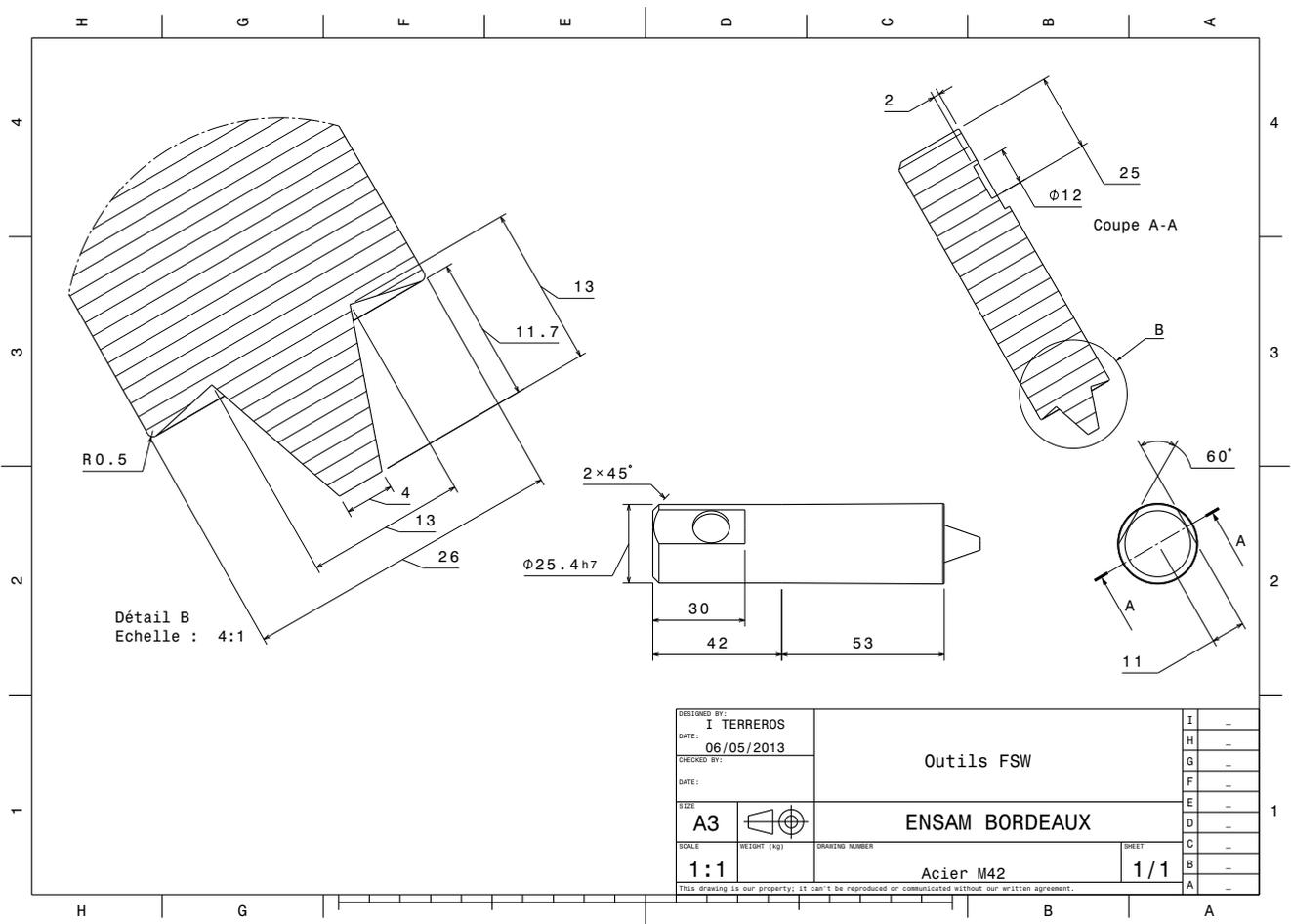


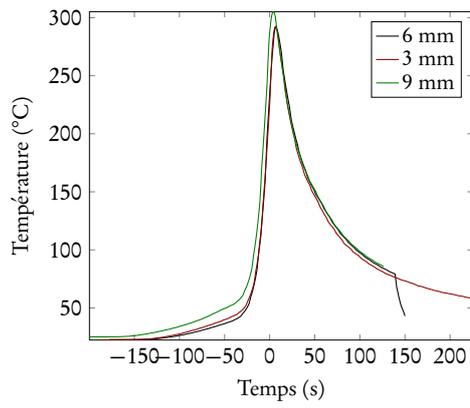
FIGURE F.1 – Plan de l'outil FSW.

101

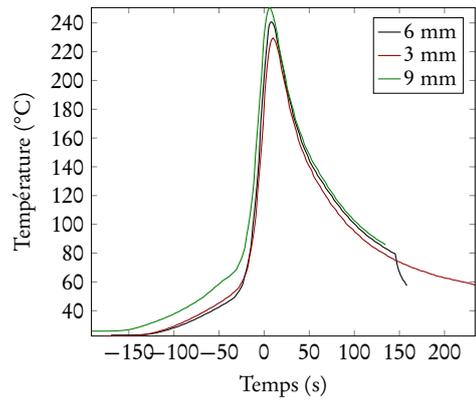
DESIGNED BY: I TERREROS		Outils FSW	I	-
DATE: 06/05/2013			H	-
CHECKED BY:		ENSAM BORDEAUX	G	-
DATE:			F	-
SIZE: A3		Acier M42	E	-
SCALE: 1:1			WEIGHT (kg)	D
DRAWING NUMBER		1/1	C	-
SHEET			B	-
A				

This drawing is our property; it can't be reproduced or communicated without our written agreement.

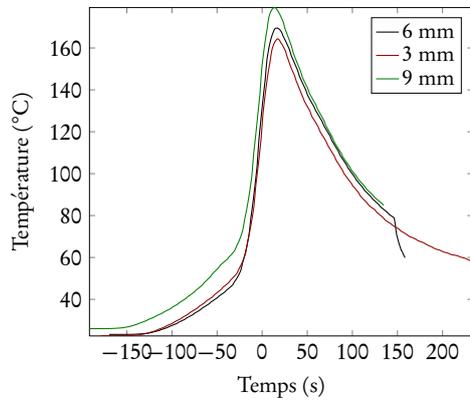
F



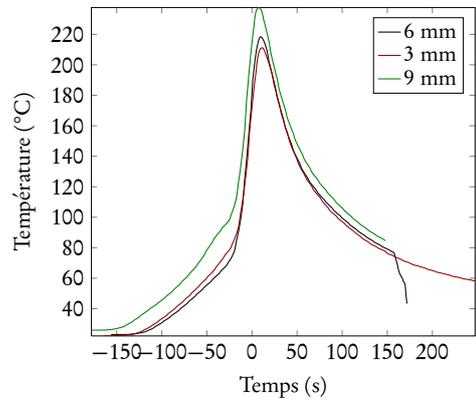
(a) Point 1



(b) Point 2

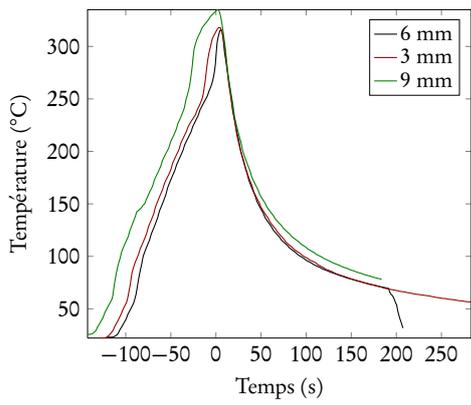


(c) Point 3

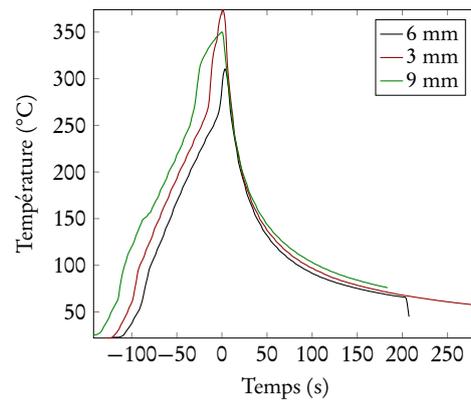


(d) Point 4

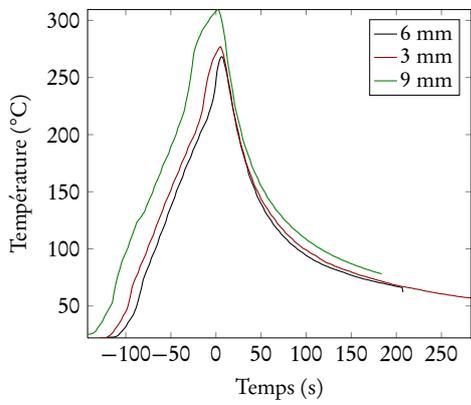
FIGURE F.2 – Températures des quatre premiers points de contrôle.



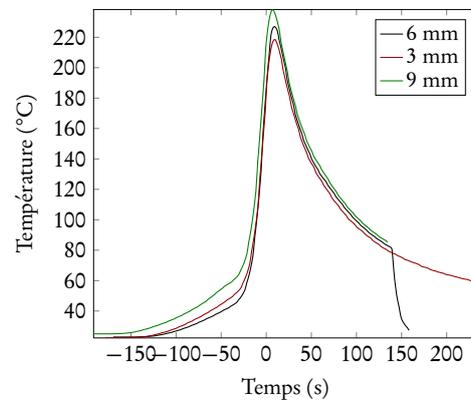
(a) Point 5



(b) Point 6



(c) Point 7



(d) Point 8

FIGURE F.3 – Températures des quatre derniers points de contrôle.

Bibliographie

- [AA12] H. ASHRAFIZADEH et M. ASHRAFIZAADEH : Influence of processing parameters on grinding mechanism in planetary mill by employing discrete element method. *Advanced Powder Technology*, 23:708–716, 2012.
- [AAAE12] P. ALVAREZ, E. ARRUTI, E. ALDANONDO et A. ECHEVERRIA : Understanding material flow in FSW and its implications. *In Friction Stir Welding and Processing, Saint Étienne, France, 2012.*
- [AICN12] D. ANDRÉ, I. IORDANOFF, J. L. CHARLES et J. NÉAUPORT : Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213–216:113–125, 2012.
- [ALH⁺12] J. N. AOH, J. S. LIN, C. W. HUANG, S. C. YANG et Y. P. HUANG : Friction stir welding and Fabricating of Particulate reinforced Al 6061/SiC Metal Matrix Composites. *In Proceedings of the Second International Conference Friction Stir Welding and Processing, 2012.*
- [ARP⁺09] I. ALFARO, G. RACINEUX, A. POITOU, E. CUETO et F. CHINESTA : Numerical simulation of friction stir welding by natural element methods. *International Journal of Material Forming*, 2:225–234, 2009.
- [Bar94] D. BARAFF : Fast Contact Force Coputation for Nonpenetrating Rigid Bodies. *In SIGGRAPH'94 : Proceedings of the 21st annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, Computer Graphics Proceedings, Annual Conference Series, pages 23–34, Robotics Institute, Carnegie Mellon University Pittsburgh, PA 15213, July 24-29 1994. ACM.
- [BB00] J. C. BASSETT et S. S. BIRLEY : Friction Stir Welding of Aluminium Armour. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [BBD⁺99] G. BIALLAS, R. BRAUN, C. DALLE DONNE, G. STANIEK et W. A. KAYSER : Mechanical properties and corrosion behavior of friction stir welded 2024-T3. *In Proceedings of the First International Symposium on Friction Stir Welding, Thousand Oaks, CA, USA, 1999.*
- [BHSP06] G. BUFFA, J. HUA, R. SHIVPURI et L. FRATINI : A continuum based fem model for friction stir welding-model development. *Materials Science and Engineering : A*, 419(1–2):389–396, 2006.

- [BI99] G. BUSSU et P. E. IRVING : Fatigue performance of Friction Stir Welded 2024-T351 aluminium joints. *In Proceedings of the First International Symposium on Friction Stir Welding, Thousand Oaks, CA, USA, 1999.*
- [BLM⁺99] S. BENAVIDES, Y. LI, L. E. MURR, D. BROWN et J. C. McCLURE : Low-temperature friction-stir welding of 2024 aluminum. *Scripta Materialia*, 41(8):809–815, 1999.
- [BNS00] G. J. BENDZSAK, T. H. NORTH et C. B. SMITH : An Experimentally Validated 3D Model for Friction Stir Welding. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [BvDKS00] M. J. BROOKER, A. J. M. van DEUDEKOM, S. W. KALLEE et P. D. SKETCHLEY : Applying Friction Stir Welding to the Ariane 5 Main Motor Thrust Frame. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [Cal96] W. D. CALLISTER : *Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales*. Reverté, 1996.
- [CCCL10] F. CHINESTA, S. CESCOTTO, E. CUETO et P. LORONG : *Natural Element Method for the Simulation of Structures and Processes*. ISTE-Wiley, London, décembre 2010.
- [CM03] I. CHARIT et R. S. MISHRA : High strain rate superplasticity in a commercial 2024 Al alloy via friction stir processing. *Materials Science and Engineering : A*, 359(1–2):290–296, 2003.
- [CM06] J. L. CHENOT et E. MASSONI : Finite element modelling and control of new metal forming processes. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 46(11):1194–1200, 2006.
- [CMD00] F. CAMBORDE, C. MARIOTTI et F. V. DONZÉ : Numerical study of rock and concrete behaviour by discrete element modelling. *Computers and Geotechnics*, 27:225–247, 2000.
- [CPGM00] P. COLEGROVE, M. PAINTER, D. GRAHAM et T. MILLER : 3 Dimensional Flow and Thermal Modelling of the Friction Stir Welding Process. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [Cra56] J. CRANK : *The Mathematics of Diffusion*. Oxford University Press, 2ème édition, 1956.

- [Cun71] P. A. CUNDALL : A computer model for simulating progressive, large-scale movements of blocky rock systems. *In Proceedings of the symposium of the International Society of Rock Mechanics*, volume 2, 1971.
- [FC04] J. FORTIN et P. COOREVITS : Selecting contact particles in dynamics granular mechanics systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168:207–213, 2004.
- [FE07] F. FLEISSNER et P. EBERHARD : Load Balanced Parallel Simulation of Particle-Fluid DEM-SPH Systems with Moving Boundaries. *Parallel Computing : Architectures, Algorithms and Applications*, 38:37–44, 2007.
- [FGE07] F. FLEISSNER, T. GAUGELE et P. EBERHARD : Application of the discrete element method in mechanical engineering. *Multibody System Dynamics*, 18:81–94, 2007.
- [FIB07] N. FILLOT, I. IORDANOFF et Y. BERTHIER : Modelling third body flows with a discrete element method, a tool for understanding wear with adhesive particles. *Tribology International*, 40:973–981, 2007.
- [FKW10] B. FREIREICH, M. KODAM et C. WASSGREN : An exact method for determining local solid fractions in discrete element method simulations. *AIChE Journal*, 56(12):3036–3048, 2010.
- [FL02] J. A. FERREZ et Th. M. LIEBLING : Dynamic triangulations for efficient detection of collisions between spheres with applications in granular media simulations. *Philosophical Magazine Part B*, 82(8):905–929, 2002.
- [FLM00] J. A. FERREZ, Th. M. LIEBLING et D. MÜLLER : Dynamic Triangulations for Granular Media Simulations. *In KlausR. MECKE et Dietrich STOYAN, éditeurs : Statistical Physics and Spatial Statistics*, volume 554 de *Lecture Notes in Physics*, pages 394–409. Springer Berlin Heidelberg, 2000.
- [Fou22] J. B. J. FOURIER : *Théorie de la chaleur*. F. Didot, 1822.
- [GDDdc05] C. GENEVOIS, A. DESCHAMPS, A. DENQUIN et B. DOISNEAU-COTTIGNIES : Quantitative investigation of precipitation and mechanical behaviour for AA2024 friction stir welds. *Acta Materialia*, 53(8):2447–2458, 2005.
- [GF05] S. GUERDOUX et L. FOURMENT : ALE formulation for the numerical simulation of Friction Stir Welding. *In Proceedings of the VIII International Conference on Computational Plasticity, Barcelone*, 2005.

- [GF07] S. GUERDOUX et L. FOURMENT : Error Estimation And Accurate Mapping Based ALE Formulation For 3D Simulation Of Friction Stir Welding. *In Proceedings of the IX International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes*, 2007.
- [GFE08] T. GAUGELE, F. FLEISSNER et P. EBERHARD : Simulation of material tests using meshfree Lagrangian particle methods. *In Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part K : Journal of Multi-body Dynamics*, volume 222, pages 327–338, Dec 2008.
- [Gre91] D. GREENSPAN : *Quasimolecular modelling*, volume 44 de *World scientific lecture notes in physics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1991.
- [HC07] Y. HORIE et S. CASE : Mesodynamics of shock waves in a polycrystalline metal. *Shock Waves*, 17:135–141, 2007.
- [HDW⁺01] F. HANNOUR, A. J. DAVENPORT, S. W. WILLIAMS, P. C. MORGAN et C. C. FIGGURES : Corrosion Behaviour of Laser Treated Friction Stir Welds In High Strength Aluminium Alloys. *In Proceedings of the Third International Symposium on Friction Stir Welding, Kobe, Japan*, 2001.
- [HGF13] H. HADDAD, M. GUESSASMA et J. FORTIN : Heat transfer by conduction using DEM-FEM coupling method. *Computational Materials Science*, In Press, 2013.
- [HJD⁺06] P. HEURTIER, M. J. JONES, Ch. DESRAYAUD, J. H. DRIVER, F. MONTHEILLET et D. ALLEHAUX : Mechanical and thermal modelling of Friction Stir Welding. *Journal of Materials Processing Technology*, 171(Issue 3, 1):348–357, février 2006.
- [HSKW11] M. HAHN, M. SCHWARZ, B. H. KRÖPLIN et T. WALLMERSPERGER : Discrete Element Method for the thermal field : Proof of concept and determination of the material parameters. *Computational Materials Science*, 50(10):2771–2784, 2011.
- [HWK10] M. HAHN, T. WALLMERSPERGER et B. H. KRÖPLIN : Discrete element representation of continua : Proof of concept and determination of the material parameters. *Computational Materials Science*, 50:391–402, 2010.
- [HY99] Y HORIE et K YANO : Discrete element modeling of shock compression of hexagonal boron nitride powder with and without copper addition. *Journal of Materials Processing Technology*, 85(1–3):109–114, 1999.

- [IBNC08] I. IORDANOFF, A. BATTENTIER, J. NÉAUPORT et J. L. CHARLES : A discrete element model to investigate sub-surface damage due to surface polishing. *Tribology International*, 41(Issue 11):957–964, novembre 2008.
- [ISB02] I. IORDANOFF, B. SEVE et Y. BERTHIER : Using Discrete Models to Simulate Solid Third Bodies : Influence of Inter-granule Forces on the Macroscopical Behaviour. *Tribology series*, 39:361–368, juillet 2002.
- [JCD⁺13] M. JEBABI, J. L. CHARLES, F. DAU, L. ILLOUL et I. IORDANOFF : 3D coupling approach between discrete and continuum models for dynamic simulations (DEM–CNEM). *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255(0):196–209, 2013.
- [Jon24] J. E. JONES : On the Determination of Molecular Fields. In *Proceedings of the Royal Society of London*, volume 106 de A, *Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, pages 441–462. The Royal Society, octobre 1924.
- [KAA⁺92] N. KUSANO, T. AOYAGI, J. AIZAWA, H. UENO, H. MORIKAWA et N. KOBAYASHI : Impulsive local damage analyses of concrete structure by the distinct element method. *Nuclear Engineering and Design*, 138(1):105–110, 1992.
- [KB05] T. KOZIARA et N. BIĆANIĆ : Bounding box collision detection. In *13th acme conference : university of sheffield*, 2005.
- [LL03] G. R. LIU et M. B. LIU : *Smoothed Particle Hydrodynamics, a meshfree particle method*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2003.
- [LMB⁺01] B. LONDON, M. MAHONEY, W. BINGEL, M. CALABRESE et D. WALDRON : Experimental methods for determining material flow in friction stir welds. In *Proceedings of the Third International Symposium on Friction Stir Welding, Kobe, Japan*, 2001.
- [Loh00] D. LOHWASSER : Application of Friction Stir Welding for Aircraft Industry. In *Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden*, 2000.
- [Loh01] D. LOHWASSER : Welding of Airframes by Friction Stir. In *Proceedings of the Third International Symposium on Friction Stir Welding, Kobe, Japan*, 2001.
- [LS01] S. LUDING et O. STRAUß : The equation of State for Almost Elastic, Smooth, Polydisperse Granular Gases for Arbitrary Density. In *Granular Gases*, volume 564 de *Lecture Notes in Physics*, pages 389–409. Springer Berlin Heidelberg, 2001.

- [Luc77] L. B. LUCY : A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The Astronomical Journal*, 82(12):1013–1024, 1977.
- [Mar01] F. MARIE : Development of Friction Stir Welding of 7000 serie extrusions for central wing box application. *In Proceedings of the Third International Symposium on Friction Stir Welding, Kobe, Japan*, 2001.
- [MJMH10] J. J. MCCARTHY, V. JASTI, M. MARINACK et C. F. HIGGS : Quantitative validation of the discrete element method using an annular shear cell. *Powder Technology*, 203:70–77, 2010.
- [MM05] R. S. MISHRA et Z. Y. MA : Friction stir welding and processing. *Materials Science and Engineering : R : Reports*, 50(1–2):1–78, 2005.
- [MMEL07] B. MUTH, M. K. MÜLLER, P. EBERHARD et S. LUDING : Collision Detection and Administration Methods for Many Particles with Different Sizes. *In 4th International Conference on Discrete Element Methods, DEM 2007, août 2007*.
- [MPB12] G. F. MIORI, E. F. PRADOS et G. F. BATALHA : Investigation of superplasticity in a friction stir processed AA 5054 alloy. *In Proceedings of the Second International Conference Friction Stir Welding and Processing*, 2012.
- [MSSH07] H. MIO, A. SHIMOSAKA, Y. SHIRAKAWA et J. HIDAKA : Cell optimization for fast contact detection in the discrete element method algorithm. *Advanced Powder Technol.*, 18(4):441–453, 2007.
- [Mun04] A. MUNJIZA : *The combined Finite-Discrete Element Methode*. John Wiley & Sons, 2004.
- [NBP00] A. F. NORMAN, I. BROUGH et P. B. PRANGNELL : High Resolution EBSD Analysis of the Grain Structure in an AA2024 Friction Stir Weld. *Materials Science Forum*, 331-337:1713–1718, 2000.
- [NI07] M. NOUARI et I. IORDANOFF : Effect of the third-body particles on the tool-chip contact and tool-wear behaviour during dry cutting of aeronautical titanium alloys. *Tribology International*, 40:1351–1359, 2007.
- [OL10] V. OGARKO et S. LUDING : Data structures and algorithms for contact detection in numerical simulation of discrete particle systems. *In 6th World Congress on Particle Technology*, 2010.
- [OL12] V. OGARKO et S. LUDING : A fast multilevel algorithm for contact detection of arbitrarily polydisperse objects. *Computer Physics Communications*, 183(4):931–936, 2012.

- [PCR12] J. L. PÉREZ-CASTELLANOS et A. RUSINEK : Temperature increase associated with plastic deformation under dynamic compression : Application to aluminium alloy Al 6082. *Journal of theoretical and applied mechanics*, 50(2):377–398, 2012.
- [PS05] T. PÖSCHEL et T. SCHWAGER : *Computational Granular Dynamics*. Springer-Verlag, 2005.
- [QB73] B. QUENTREC et C. BROT : New method for searching for neighbors in molecular dynamics computations. *Journal of Computational Physics*, 13(3):430–432, 1973.
- [REBM10] P. ROGNON, I. EINAV, J. BONIVIN et T. MILLER : A scaling law for heat conductivity in sheared granular materials. *EPL (Europhysics Letters)*, 89(5):58006, 2010.
- [Ric08] D. RICHARD : *Thermique des contacts avec troisième corps solide*. Thèse de doctorat, INSA Lyon, 20, avenue Albert Einstein, 69621 Villeurbanne Cedex (FRANCE), septembre 2008.
- [RIRB08] D. RICHARD, I. IORDANOFF, M. RENOUF et Y. BERTHIER : Thermal study of the dry sliding contact with third body presence. *ASME Journal of Tribology*, 130, Issue 3(031404):10, juillet 2008.
- [RK09] A. RUSINEK et J. R. KLEPACZKO : Experiments on heat generated during plastic deformation and stored energy for TRIP steels. *Materials and Design*, 30:35–48, 2009.
- [RS99] M. J. RUSSELL et H. R. SHERCLIFF : Analytical Modelling of Microstructure Development in Friction Stir Welding. *In Proceedings of the First International Symposium on Friction Stir Welding, Thousand Oaks, CA, USA, 1999*.
- [SA12] N. SUN et D. APELIAN : Effect of FSP and Post-FSP Heat Treatment on Tensile Properties of Cast A206 Al Alloy. *In Proceedings of the Second International Conference Friction Stir Welding and Processing, 2012*.
- [Sch99] A. SCHINNER : Fast algorithms for the simulation of polygonal particles. *Granular Matter*, 2:35–43, 1999.
- [SFC05] I. SANNI, J. FORTIN et P. COOREVITS : Gestion des contacts 3D pour une modélisation Éléments Discrets. *In 7ème colloque national en calcul des structures*, mai 2005.
- [SH05] H. SCHMIDT et J. HATTEL : A local model for the thermomechanical conditions in friction stir welding. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13:77–93, 2005.

- [She00] G. E. SHEPHERD : The potential for using solid phase welding to repair cracks that may occur on thin aluminium aircraft wing structure. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [SMB98] N. SUKUMAR, B. MORAN et T. BELYTSCHKO : The natural element method in solid mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43(5):839–887, nov 1998.
- [SMM⁺12] A. SIMAR, A. MERTENS, H. M. MONTRIEUX, J. LECOMTE-BECKERS, J. HALLEUX et F. DELANNAY : Microstructure and mechanical properties of friction stir processed magnesium matrix composites reinforced with carbon fibres. *In Proceedings of the Second International Conference Friction Stir Welding and Processing, 2012.*
- [Tan01] Z. P. TANG : Three-dimensional DEM theory and its application to impact mechanics. *Science in China (Series E)*, 44(6), décembre 2001.
- [TBLB00] R. TALWAR, D. BOLSER, R. LEDERICH et J. BAUMANN : Friction Stir Welding of Airframe Structures. *In Proceedings of the Second International Symposium on Friction Stir Welding, Gothemburg, Sweden, 2000.*
- [TGSK06] A. M. TARTAKOVSKY, G. GRANT, X. SUN et M. KHALEEL : Modeling of Friction Stir Welding (FSW) Process with Smooth Particle Hydrodynamics (SPH). *In Proceedings of the SAE 2006 World Congress, Detroit, USA, 2006.*
- [THM⁺03] M. TESCHNER, B. HEIDELBERG, M. MÜLLER, D. POMERANETS et M. GROSS : Optimized Spatial Hashing for Collision Detection of Deformable Objects. *In Proceeding of Vision, Modeling, Visualization VMV03*, pages 47–54, novembre 2003.
- [THP97] Z. P. TANG, Y. HORIE et S. G. PSAKHIE : *Discrete Meso-Element Modeling of Shock Processes in Powders*, chapitre 6, pages 143–176. High-Pressure Shock Compression of Solids IV. L. Davison et al., Springer New York, 1997.
- [TIC⁺09] I. TERREROS, I. IORDANOFF, J.L. CHARLES, D. COUPARD et S. TCHERNIAIEFF : Discrete element method, a tool to investigate complex thermo mechanical behaviour : application to friction stir welding. *International Journal of Material Forming*, 2:573–576, 2009.
- [TIC13] I. TERREROS, I. IORDANOFF et J. L. CHARLES : Simulation of continuum heat conduction using DEM domains. *Computational Materials Science*, 69:46–52, 2013.

- [TL01] Z. P. TANG et W. Y. LIU : Dynamic multi-pore collapse response with discrete meso-element method. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 35:39–45, 2001.
- [TNN⁺92] W. M. THOMAS, E. D. NICHOLAS, J. C. NEEDHAM, M. G. MURCH, P. TEMPLESMITH et C. J. DAWES : Improvements relating to Friction Welding. *European Patent EP0615480*, 1992.
- [TP07] F. A. TAVAREZ et M. E. PLESHA : Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70:379–404, 2007.
- [T⁺ZM⁺11] A. TIMESLI, H. ZAHROUNI, A. MOUFKI, V. FAVIER, B. BRAIKAT et H. LAHMAM : Modélisation du procédé de soudage FSW à l'aide de la méthode SPH. In *X Colloque National en Calcul des Structures, Presqu'île de Giens (Var)*, 2011.
- [Ver67] L. VERLET : Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*, 159(1):98–103, juillet 1967.
- [VM01] W. L. VARGAS et J. J. MCCARTHY : Heat Conduction in Granular Materials. *AIChE Journal*, 47(5):1052–1059, mai 2001.
- [VM02a] W. L. VARGAS et J. J. MCCARTHY : Conductivity of granular media with stagnant interstitial fluids via thermal particle dynamics simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45:4847–4856, 2002.
- [VM02b] W. L. VARGAS et J. J. MCCARTHY : Stress effects on the conductivity of particulate beds. *Chemical Engineering Science*, 57:3119–3131, 2002.
- [VM07] W. L. VARGAS et J. J. MCCARTHY : Thermal expansion effects and heat conduction in granular materials. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 76(4 Pt 1):041301, 2007.
- [VM10] S.J. VIJAY et N. MURUGAN : Influence of tool pin profile on the metallurgical and mechanical properties of friction stir welded Al–10 wt.% TiB₂ metal matrix composite. *Materials & Design*, 31(7):3585–3589, 2010.
- [VMPD03] W. L. VARGAS, J. C. MURCIA, L. E. PALACIO et D. M. DOMINGUEZ : Fractional diffusion model for force distribution in static granular media. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear and Soft Matter Physics*, 68(2 Pt 1):021302, 2003.

- [WB10] C.L. WU et A.S. BERROUK : Conceptual comparative study between efficient collision-handling algorithms used for Molecular Dynamics (MD) and Discrete Particle Model (DPM). *Powder Technology*, 198(3): 435–438, 2010.
- [WBN10] C.L. WU, A.S. BERROUK et K. NANDAKUMAR : An efficient chained-hash-table strategy for collision handling in hard-sphere discrete particle modeling. *Powder Technology*, 197(1–2):58–67, 2010.
- [WO99] J.R. WILLIAMS et R. O’CONNOR : Discrete element simulation and the contact problem. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 6:279–304, 1999.
- [YCLR05] J. YVONNET, F. CHINESTA, P. LORONG et D. RYCKELYNCK : The constrained natural element method (C-NEM) for treating thermal models involving moving interfaces. *International Journal of Thermal Sciences*, 44:559–569, 2005.
- [YH02] K. YANO et Y. HORIE : Mesomechanics of the α - ϵ transition in iron. *International Journal of Plasticity*, 18(11):1427–1446, 2002.
- [YRLC04] J. YVONNET, D. RYCKELYNCK, P. LORONG et F. CHINESTA : A new extension of the natural element method for non-convex and discontinuous problems : the constrained natural element method (C-NEM). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 60:1451–1474, 2004.
- [ZC04] X. K. ZHU et Y. J. CHAO : Numerical simulation of transient temperatures and residual stresses in friction stir welding of 304L stainless steel. *Journal of Materials Processing Technology*, 146:263–272, 2004.
- [Zoh05] T. I. ZOHDI : Charge-induced clustering in multifield particulate flows. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62:870–898, 2005.
- [ZTZ05] O. C. ZIENKIEWICZ, R. L. TAYLOR et J. Z. ZHU : *The Finite Element Method : Its Basis and Fundamentals*. Elsevier, 6^{ème} édition, 2005.
- [ZZ08] Z. ZHANG et H.W. ZHANG : A fully coupled thermo-mechanical model of friction stir welding. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 37:279–293, 2008.
- [ZZXM11] H.W. ZHANG, Q. ZHOU, H.L. XING et H. MUHLHAUS : A discrete element method study on the effective thermal conductivity of granular assemblies. *Powder Technology*, 205(1–3):172–183, 2011.

Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu : Vers la simulation du procédé FSW

Résumé : De nos jours, la gestion des flux de matière autour de la zone de contact représente un des principaux verrous scientifiques pour l'amélioration des simulations des procédés d'usinage comme, par exemple, le procédé FSW. Les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus sont couramment utilisées dans ces simulations mais elles rencontrent de nombreuses difficultés dans les zones de contact. Une explication « physique » à ces difficultés est l'utilisation des équations issues de la mécanique des milieux continus pour décrire des phénomènes discontinus. À ce point, la méthode des éléments discrets s'est révélée être une alternative aux approches continues pour traiter le problème causé par ces discontinuités. Cette méthode est en revanche très gourmande en terme de temps de calcul.

Une solution à long terme passe par un couplage entre méthodes continues et discrètes qui requiert une zone de recouvrement où les deux approches coexistent. Cette zone est classiquement placée dans une région continue et cela oblige à développer la méthode des éléments discrets pour qu'elle puisse opérer dans ce type de région. Le travail de thèse présente une méthode pour simuler la conduction de la chaleur et le comportement mécanique des milieux continus élasto-plastiques. Cette méthode peut travailler dans la zone continue de recouvrement et, en plus, elle peut être facilement couplée avec les méthodes discontinues classiques.

Le couplage entre l'aspect thermique et l'aspect mécanique est également étudié et comparé aux résultats expérimentaux issus de la bibliographie.

Mots clés : DEM, FEM, FSW, Continuum, Thermique, Mécanique

Thermo-mechanical DEM modelling of a continuous material: Towards the simulation of FSW

Abstract: Currently, almost all material manufacturing processes are simulated using methods based on continuum approaches. These methods, though widely studied, face difficulties with contact problems that are usually found in processes such as FSW. One "physical" explanation to this issue is given by the fact that these methods use equations based on continuum mechanics to describe discontinuous problems. In some cases, the Discrete Element Method is used to overcome these problems. However, it is known to be a very time-consuming method.

Thus, a long term solution consists of coupling both continuum and discontinuous approaches. This solution requires an overlapping zone where the two methods work together. This overlapping zone is classically placed on a continuous region. Consequently, the Discrete Element Method must be improved to be reliable in such a region. The present work describes a DEM approach to simulate elasto-plastic mechanical behaviour and heat conduction through a continuous material. This method can be used both to carry out calculations on the continuous overlapping zone as well as to be coupled with classical Discrete Element Method in order to deal with discontinuous problems.

Finally, coupling between thermal and mechanical aspects is studied and compared to experimental results found in the bibliography.

Keywords: DEM, FEM, FSW, Continuum, Thermics, Mechanics

