HAL
open science

Analyse thermomécanique multiéchelle de la transformation de phase dans les alliages à mémoire de forme

Silvère Vigneron

To cite this version:

Silvère Vigneron. Analyse thermomécanique multiéchelle de la transformation de phase dans les alliages à mémoire de forme. Mécanique [physics.med-ph]. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2009. Français. NNT : . tel-00486705

HAL Id: tel-00486705

https://theses.hal.science/tel-00486705

Submitted on 26 May 2010

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.

ACADÉMIE DE MONTPELLIER

UNIVERSITÉ MONTPELLIER 2

— SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC —

THÈSE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ MONTPELLIER 2

SPÉCIALITÉ :	MÉCANIQUE ET GÉNIE CIVIL
FORMATION DOCTORALE :	MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX ET DES MILIEUX COMPLEXES, DES STRUCTURES ET DES SYSTÈMES
ECOLE DOCTORALE :	INFORMATION, STRUCTURES ET SYSTÈMES.

ANALYSE THERMOMÉCANIQUE MULTIÉCHELLE DE LA TRANSFORMATION DE PHASE DANS LES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME

PAR

Silvère VIGNERON

Soutenue publiquement le 10 décembre 2009 devant le jury composé de :

MM.Christian LEXCELLENT	Professeur	Université de Besançon	Rapporteur
Ziad MOUMNI	Professeur	ENSTA, Paris	Rapporteur
André CHRYSOCHOOS	Professeur	LMGC, Montpellier 2	Directeur de thèse
Laurent STAINIER	Professeur	EC, Nantes	Examinateur
Loic DARIDON	Professeur	LMGC, Montpellier 2	Examinateur
Bertrand WATTRISSE	Professeur	LMGC, Montpellier 2	Co-directeur de thèse
Robert PEYROUX	Chargé de Recherche	3SR, Grenoble	Co-directeur de thèse

L’aboutissement d’une thèse est l’occasion de s’arrêter un instant et de tourner son regard sur le chemin parcouru. Chemin long et sinueux, un jour frais et lumineux, le lendemain âcre et sec. Mais cette aventure humaine n’est qu’en partie solitaire, et il est temps ici de remercier ceux qui l’ont adouci.

Les premiers, et les plus proches, sont ‘mes’ directeurs de thèse. André Chrysochoos, qui a su guider ma recherche avec délicatesse, soutenir mes choix, avec leurs parts de risques et d’inconnus, et parfois de doutes. Bertrand Wattrisse, pour sa disponibilité. Ce mot contient tous les autres, et témoigne de ma profonde reconnaissance à son égard. Robert Peyroux, pour sa passion, ses pistes fructueuses et ses conseils en termes de méthodologie numérique.

En second lieux je tiens à remercier les membres de mon jury. Messieurs Ziad Moumni et Christian Lexcellent pour l’intérêt qu’ils ont porté sur mon travail en tant que rapporteurs. Loïc Daridon, qui a eu la gentillesse d’accepter son rôle de président.

J’en profite également pour remercier Laurent Stainier dont la collaboration amicale a grandement aidé mes travaux numériques ; Andrea Tommasi et messieurs Merlet et Névado pour leur concours dans les études microscopiques. Enfin ma gratitude va au personnel technique et administratif qui facilite et allège notre travail.

Je tiens également à remercier tous ceux dont les échanges scientifiques m’ont permis d’avancer dans mon travail ; mécaniciens, physiciens, mathématiciens, numériciens… Mes également tous ceux dont les échanges furent plus prosaïques, qu’ils soient doctorants, amis ou parents. Ils ont su partagé ma vie, avec ses exaltations, ses débordements et ses tourments… Bien entendu une pensée toute particulière est pleinement consacrée à mon épouse Roula et à mes deux enfants, Souhel et Naya, deux bonheurs éclos en chemin…

Et maintenant, cher lecteur, *en route* !

Table des matières

Introduction générale **7**

1 Brefs rappels sur les AMF et positionnement du travail de recherche **11**

1.1 Description des alliages à mémoire de forme **12**
1.1.1 Transformation de phase martensitique 12
1.1.2 Diagramme de transformation 17
1.1.3 Effets macroscopiques 21

1.2 Positionnement et stratégie de travail **24**
1.2.1 Objet et légitimité de l'étude vis-à-vis de l'état actuel de la littérature 24
1.2.2 Modèle pour les AMF et simulation de front de changement de phase 25
1.2.3 Objectifs et mise en place de l'étude 29

2 Mesures couplées de champs cinématiques et calorimétriques appliquées aux AMF **33**

2.1 Cadre thermomécanique **34**
2.1.1 Description de l'état d'un système thermomécanique 34
2.1.2 Evolution de l'état thermomécanique 35
2.1.3 Loi de comportement et potentiel thermodynamique 36
2.1.4 Equation de diffusion de la chaleur 38
2.1.5 Bilan d'énergie et trajet thermomécanique 38

2.2 Méthodologie expérimentale **41**
2.2.1 Dispositif expérimental 41
2.2.2 Intercorrélation d'image 45
2.2.3 Thermographie infrarouge 54
2.2.4 Equation de la chaleur 62
2.2.5 Ecriture d'un bilan d'énergie local 67
2.2.6 Estimation des grandeurs thermomécaniques 69

2.3 Application à l'étude du CuAlBe **74**
2.3.1 Matériau et géométrie 74
2.3.2 Description des essais thermomécaniques réalisés 80
2.3.3 Analyse globale 82
2.3.4 Analyse locale 90
2.3.5 Analyse énergétique locale 94

3 Modèle thermomécanique pour un alliage à mémoire de forme **101**

3.1 Modèle d'alliage à mémoire de forme **102**
3.1.1 Potentiel énergie libre 102
3.1.2 Pseudo-potentiel de dissipation 106
3.1.3 Equations d'état – équations d'évolution – équation de la chaleur 107
3.1.4 Diagramme de transformation 108

3.2 Premiers résultats et discussion **112**
3.2.1 Implémentation 112
3.2.2 Paramètres du modèle retenus pour les simulations 113
3.2.3 Comportement d'un élément de volume 115

3.3 Etude du comportement de structures **120**
3.3.1 Comparaison des deux codes de calcul par élément finis 120
3.3.2 Comparaison qualitative avec l'expérience 127

4 Une modélisation de la transformation martensitique par dynamique moléculaire 139

4.1 Présentation générale de la dynamique moléculaire **142**
4.1.1 Problème mécanique 142
4.1.2 Système thermomécanique équivalent 147
4.1.3 Echanges d'énergie avec l'extérieur 152
4.1.4 Bilan énergétique 154

4.2 La méthode de DM pour l'étude des AMF **156**
4.2.1 Cristallographie des AMF 156
4.2.2 Diversité de l'utilisation – Intérêt de l'approche 159
4.2.3 Outils d'analyses adaptés à l'étude de la transformation de phase martensitique 166

4.3 Simulation de la transformation martensitique par DM **170**
4.3.1 Etude des réponses d'un modèle DM d'AMF 170
4.3.2 Influence de la taille de l'échantillon 177

Conclusions générales et perspectives **187**

Annexe A : Rappels de cristallographie 192

Références bibliographiques **194**

Introduction générale

Les alliages à mémoire de forme (AMF) sont des matériaux au comportement thermomécanique très particulier. Ils entrent dans la famille des matériaux actifs. Ces matériaux ont pour caractéristique de se déformer sous un chargement extérieur autre que mécanique ; ce chargement pouvant être thermique, électromagnétique, chimique… Dans le cas des AMF, c'est le chargement thermique qui joue ce rôle. Il s'accompagne d'une forte déformation. Ce phénomène est appelé effet mémoire. Un second comportement particulier aux AMF est la superélasticité. Elle permet au matériau de subir, de manière réversible, de très importantes déformations. Ces deux phénomènes ont pour origine une transformation de phase solide-solide. Lors de celle-ci, la symétrie du réseau cristallin se modifie et s'accompagne d'une libération d'énergie, la chaleur latente de transformation.

Ces propriétés remarquables ont, très tôt, intéressé les industriels dans de nombreux domaines comme l'attestent, par exemple, l'existence de brevets pour des machines thermiques [Schiller 02] ; des applications en robotique avec : le déploiement de panneaux solaires, la conception de mains [Kakeshita 00] ou de muscles artificiels [Safak 02] ; des applications médicales [Duerig 99] avec : des prothèses dentaires, des agrafes d'ostéotomie ou encore des stents [Kuribayachi 06] ; et plus récemment des projets d'ailes d'avion à forme variable ou encore des composants antisismiques pour le génie civil [Van Humbeeck 99a].

Cependant, plusieurs facteurs freinent le développement de l'utilisation des AMF. En premier lieu les difficultés d'élaboration métallurgique et de mise en forme rendent les procédés de production coûteux. S'ajoutent à cela des problèmes de vieillissement qui limitent la durée de vie des AMF (pour plus de précisions se référer à l'introduction proposée par [Gonzalez 02]). D'autre part, les AMF sont en concurrence directe avec les autres matériaux actifs (matériaux piézoélectriques, matériaux électro/magnétostrictifs, polymères éléctroactifs, fluides électro/magnétorhéologiques…), comme l'illustre [Gauthier 07] dans le champ d'application des actionneurs. Pour finir, le manque de modélisation suffisamment fiable rend délicat l'emploi des AMF par l'ingénieur, et augmente d'autant les coûts de conception. C'est sur ce dernier point que cette thèse se focalise.

Les difficultés de cette modélisation s'expliquent à la fois par l'aspect multi-physique de la transformation et par sa structuration successive à différentes échelles. Multi-physique car la mécanique et la thermique jouent toutes deux un rôle prépondérant dans le comportement des AMF. Ces interactions mécaniques et thermiques sont souvent négligées

dans les modèles proposés par la littérature, en limitant ces modèles au cas isotherme, et lorsque ce n'est pas le cas, la température n'est bien souvent qu'un paramètre de contrôle.

Multi-échelle car l'écart entre l'échelle cristallographique élémentaire de la transformation et celle ou s'expriment les besoins de l'ingénieur est plus qu'important. Ce second aspect a amené les auteurs à divers positionnements dans la construction de leurs modèles comportementaux. Certains d'entre eux se placent directement à l'échelle macroscopique, tandis que d'autres partent de l'échelle cristallographique, et remontent éventuellement à l'échelle de l'ingénieur via un processus de changement d'échelle.

A ces difficultés théoriques et numériques, s'ajoute naturellement un besoin d'informations expérimentales fiables sur la physique du phénomène. Un grand nombre de résultats de la littérature sont fondés sur des observations macroscopiques, c'est-à-dire réalisées à une échelle qui correspond à la partie utile de l'éprouvette. Or l'apparition d'hétérogénéités sur cette partie utile remet en cause la pertinence de ces résultats. Les techniques de mesures de champs offrent un outil privilégié dans l'étude de cette problématique [Shaw 95].

Dans ce qui suit, on s'intéressera principalement au comportement dit *pseudoélastique* dans le cas d'un AMF monocristallin de CuAlBe. Ce travail de thèse cherchera à montrer qu'au cours d'un chargement mécanique les variations thermiques ont un rôle non négligeable sur les mécanismes de déformation. En effet, lorsque le matériau change de phase sous contrainte, il libère une chaleur latente qui fait varier la température de la matière. Ces variations de températures modifient alors la cinétique de changement de phase et, par voie de conséquence, le champ de déformation. Sur le plan de la modélisation, l'existence de ce couplage liant la mécanique à la thermique nous a conduits à considérer le changement de phase comme un mécanisme de couplage thermomécanique fort, stable, et pas ou faiblement dissipatif.

Le modèle développé permettra notamment de rendre compte du caractère endo-exothermique de la transformation, associé à une forte sensibilité à la température du comportement mécanique. Ce mécanisme de couplage permettra aussi, *via* la diffusion de la chaleur, de retrouver un certains nombre d'effets mécaniques observés : existence d'une boucle d'hystérésis, d'un adoucissement cyclique, de mécanismes de fluage et de relaxation, ou encore la propagation d'un ou de plusieurs fronts de changement de phase.

Le 2ème aspect développé dans cette thèse est lié au caractère multi-échelle de la transformation. On distinguera à cet effet 3 échelles. Une première, dite macroscopique, représente typiquement la partie utile des échantillons testés. La seconde échelle, qualifiée de mésoscopique, sera associée à un élément de volume représentatif de la matière. Cette échelle

est typiquement définie par la résolution spatiale du système d'imagerie utilisé. Ce système d'imagerie permettra de construire des cartes de déformation et de température. Ces champs de mesures nous permettront de suivre le développement des hétérogénéités et de juger du caractère dissipatif ou non de la transformation. Nous proposerons alors une loi de comportement qui, nous le verrons, rend possible le développement d'hétérogénéités similaires à celles observées expérimentalement. Nous aborderons enfin le problème du changement de phase pour une 3ème échelle : l'échelle microscopique. Elle correspond cette fois à l'échelle pour laquelle la transformation de phase s'identifie à un changement de réseau cristallographique. On se proposera alors d'utiliser les outils numériques associés à une approche de type dynamique moléculaire. Cette approche permettra de construire une énergie interne puis une énergie libre non convexe associée au système. Cette construction sera initialement réalisée dans un cadre purement mécanique réversible, avant de s'inscrire dans un cadre thermodynamique complet. L'objectif poursuivi sera alors de voir si l'augmentation de la taille du système «moléculaire» permet de régulariser le potentiel énergétique (convexification). Cette étude permettra d'éclaircir le lien existant entre ce potentiel non convexe microscopique et le potentiel convexe proposé dans le modèle mésoscopique précédent.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante. Le chapitre I propose quelques rappels sur la métallurgie des AMF. Ensuite, il définit et positionne le travail de thèse par rapport à la littérature. Le chapitre II rappelle brièvement le cadre théorique d'interprétation retenu. Il définit la forme du bilan d'énergie en se focalisant tout particulièrement sur le bilan d'énergie associé à un cycle de charge-décharge. Il présente ensuite les moyens d'essai et les méthodes expérimentales mises en œuvre pour observer thermiquement et cinématiquement les effets macroscopiques et mésoscopiques du changement de phase. Un modèle d'AMF monocristallin est ensuite construit dans le chapitre III en s'appuyant à la fois sur l'analyse expérimentale réalisée et sur les résultats des études antérieures. Ce modèle, dans sa version tridimensionnelle, sera limité au cas isotrope, univariant. Les résultats issus des simulations numériques seront ensuite systématiquement confrontés aux résultats expérimentaux. L'importance des effets de couplage sur le comportement sera mise en avant tant au travers des résultats expérimentaux du chapitre II que des simulations numériques du chapitre III. Enfin, le chapitre IV proposera une contribution à l'étude du potentiel non convexe construit à partir d'arguments de changement de symétrie cristalline. La discussion s'appuiera sur un premier modèle (rudimentaire) de changement de phase utilisant les outils de la dynamique moléculaire. Dans un tel contexte, le caractère non convexe du potentiel thermodynamique sera rediscuté.

CHAPITRE 1

Brefs rappels sur les AMF et positionnement du travail de recherche

Sommaire

1.1 Description des alliages à mémoire de forme
1.1.1 Transformation de phase martensitique
1.1.2 Diagramme de transformation
1.1.3 Effets macroscopiques

1.2 Positionnement et stratégie de travail
1.2.1 Objet et légitimité de l'étude vis-à-vis de l'état actuel de la littérature
1.2.2 Modèle pour les AMF et simulation de front de changement de phase
1.2.3 Objectifs et mise en place de l'étude

1.1 Description des alliages à mémoire de forme

Les alliages à mémoire de forme (AMF) sont des matériaux dont le champ d'application industriel est vaste. Ces applications se basent sur des propriétés thermomécaniques remarquables telles que les effets « mémoire » simple et double-sens, les effets dits caoutchoutiques et la pseudoélasticité. Plus précisément, les effets « mémoire » permettent de jouer sur un ou deux états «enregistrés » par le composant AMF. L'accès à ces états est ensuite possible *via* un chargement mécanique et/ou thermique, généralement de faible intensité. Le comportement pseudoélastique permet au matériau de retrouver son état initial de façon quasi-réversible, et ce après des déformations de plusieurs pourcent. Dans d'autres situations encore, il pourra être intéressant pour l'ingénieur de mettre à profit les effets «caoutchoutiques» qui confèrent aux composants AMF un fort pouvoir amortissant.

D'une façon générale, l'origine de ces propriétés est une transformation de phase solide-solide, qui se caractérise par un changement de structure cristalline, interprété comme un changement de phase. Ce changement de phase s'accompagne d'une chaleur latente, ce qui le classe dans les transitions de phase du premier ordre. Le travail de thèse qui suit se focalisera uniquement sur les aspects du comportement des AMF liés à la pseudoélasticité.

Dans une première partie de ce chapitre, on se propose de rappeler les concepts fondamentaux liés à la transformation de phase dans les AMF. Pour ce faire, on commencera par décrire les phénomènes prenant place à l'échelle microscopique, pour arriver à une physique suffisamment macroscopique pour pouvoir être intégrée dans des outils numériques de simulation et d'aide à la conception, et, à terme, être utilisée par l'ingénieur afin de dimensionner des structures utilisant les propriétés pseudoélastiques des AMF.

1.1.1 Transformation de phase martensitique

Historiquement [Wechsler 53], le terme de transformation martensitique fut employé pour décrire l'apparition d'une phase métastable, la martensite, après la trempe d'un acier. Par analogie avec ce phénomène, la phase basse température d'une transformation martensitique est appelée martensite tandis que la phase haute température est appelée austénite. Les domaines d'existence de ces deux phases sont délimités par une température de transformation. Rappelons que les AMF ne sont pas les seuls matériaux à présenter une transformation martensitique : certaines céramiques [Kelly 02], le zirconium [Goldak 66], le lithium ou le sodium [Blaschko 99], les pérovskites [Dove 97], [Fu 04], présentent eux aussi une transformation de type martensitique.

La transformation de phase martensitique peut être qualifiée de :

- ***solide-solide*** : les phases austénitiques et martensitiques sont toutes deux à l'état solide. En outre, il s'agit de deux phases cristallines.

- ***displacive*** : le passage de la phase austénitique à la phase martensitique (A→M) est réalisé par un déplacement coopératif des atomes. Ce réagencement a pour conséquence de modifier le réseau cristallin. Les transformations displacives s'opposent aux transformations diffusives, lesquelles se caractérisent par une modification chimique du matériau selon une cinétique particulière, comme par exemple lors d'une transformation ordre-désordre du type précipitation [Boussinot 09].

- ***transition du premier ordre*** : la transition s'accompagne d'une production d'une chaleur positive lors de la transformation A→M (phénomène exothermique), et négative lors de la transformation inverse M→A (phénomène endothermique)

Pour résumer, la transformation de phase se manifeste par :

- une déformation du réseau cristallin qui s'accompagne, souvent, d'une déformation du matériau à l'échelle mésoscopique,

- un dégagement de chaleur.

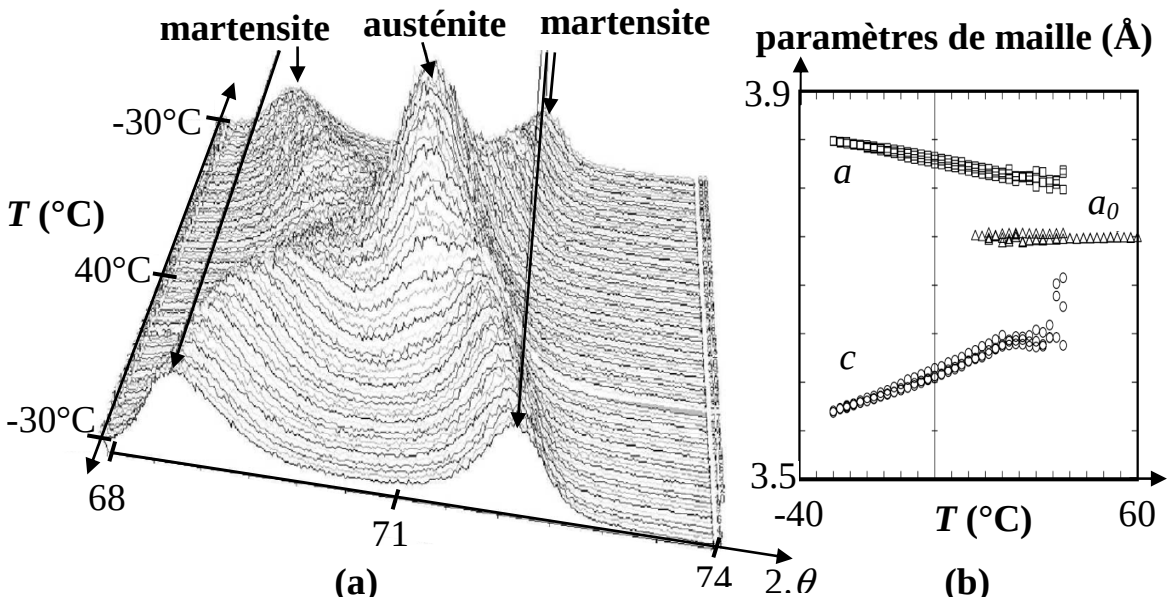


Fig.1.1.1 – *Transformation cubique-tétragonale du Fe_7Pd_3 [Cui 04] (a) évolution du diffractogramme (d'angle θ) et (b) évolution des paramètres de maille*

La modification du réseau peut être caractérisée par microscopie, par exemple, par diffraction des rayons X comme l'illustre la figure 1.1.1.a. Cette figure représente l'évolution du diffractogramme en fonction de la température *T* lors d'un cycle de charge-décharge thermique sur un échantillon de fer-palladium. Cet essai permet d'estimer l'évolution des paramètres de maille représentés sur la figure 1.1.1.b. Ces paramètres sont définis sur la figure 1.1.2.

Dans le cas du matériau considéré à la figure 1.1.1, la transformation correspond au passage d'une phase austénitique à symétrie cristalline cubique à une phase martensitique à symétrie tétragonale, comme cela est schématisé sur la figure 1.1.2. La connaissance de ce changement de géométrie permet de remonter théoriquement à la déformation (**tenseur des déformations de Bain**) associé au passage de la phase austénitique à la phase martensitique [James 00].

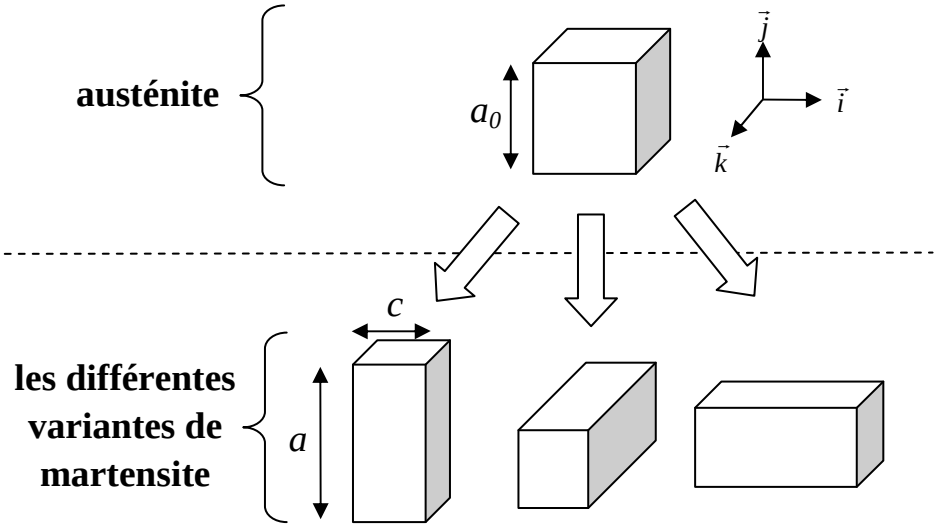


Fig.1.1.2 – *Schéma de la transformation cubique-tétragonale*

De plus, la figure 1.1.2 permet de constater que la symétrie de la phase martensitique est plus faible que celle de la phase austénitique. Par exemple, la martensite la plus à gauche n'est plus invariante sous l'action d'une rotation de 90° selon l'axe $\vec{i}$ ou selon l'axe $\vec{k}$ contrairement à l'austénite. Cette perte de symétrie engendre l'existence d'autres **variantes** de martensite, également représentées sur la figure 1.1.2.

Cette multiplicité de variantes permet au matériau de développer un mélange de variantes minimisant les contraintes mécaniques. Dans le cas où le chargement mécanique est nul, la transformation est dite induite thermiquement (**T-induite**). Le coût énergétique de chaque variante est alors identique [Ball 87], ce qui a pour conséquence l'apparition de

structures auto-accommodées [James 00], constituées d'un assemblage de variantes séparées par des interfaces et permettant au système de rester libre de contrainte. La figure 1.1.3.a représente l'une de ces structures observée expérimentalement sur le haut (top) de l'échantillon et sur son coté (side). Elle se compose bien d'un mélange de nombreuses variantes.

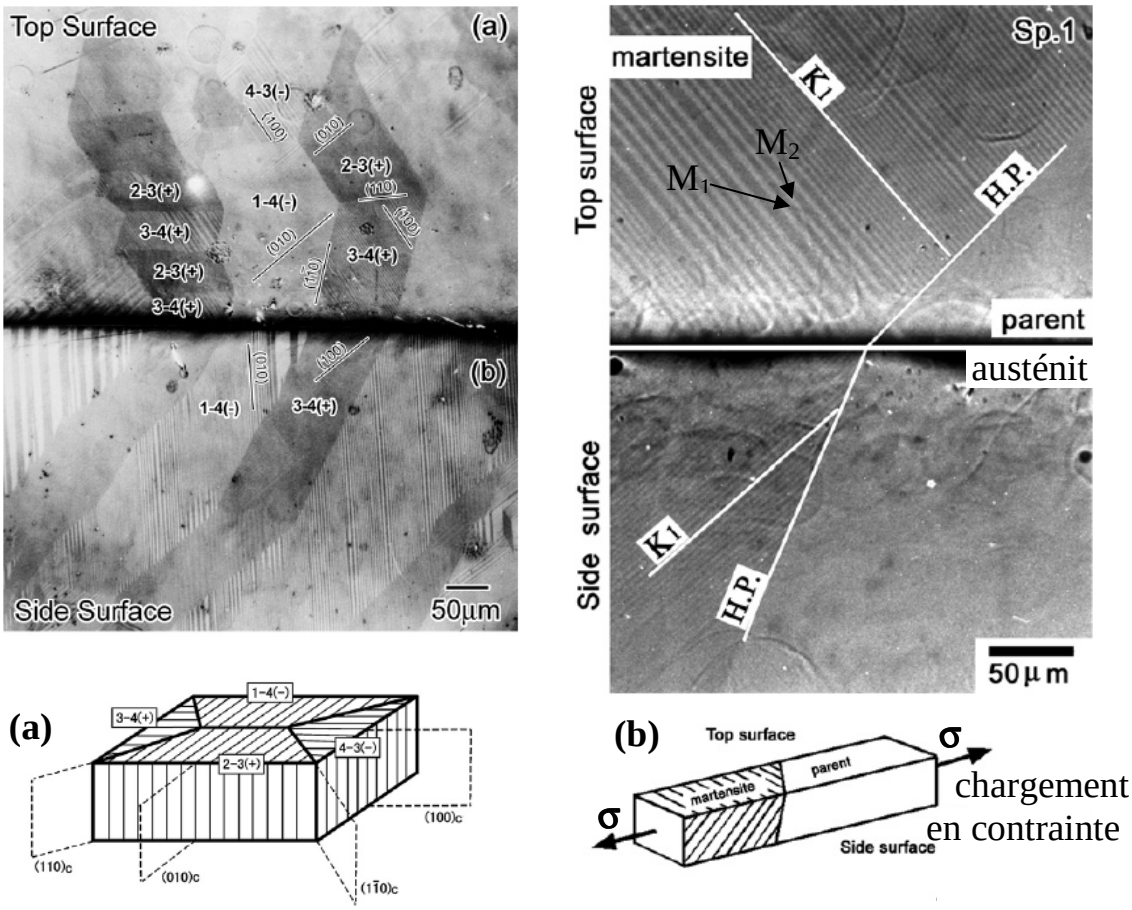


Fig.1.1.3 – *(a) Structure auto-accommodée T-induite et (b) structure jumelée séparée par un plan d'habitat (H.P.) σ-induite dans le cas d'un monocristal $Au_{49.5}Cd$ [Murakami 07]*

Par contre, dans le cas d'un chargement mécanique (transformation **σ-induite**), certaines orientations de variantes sont privilégiées, pouvant conduire à 2 types de microstructures différentes. La première est illustrée sur la figure 1.1.3.b. Il apparaît dans la partie de l'éprouvette transformée une alternance de deux variantes M_1 et M_2 ([Brinson 02], [Besseghini 04], [Zhang 00a]) qui sont dite jumelées (twinning), et séparées de la partie de l'éprouvette non transformée par une interface inclinée, appelée **plan d'habitat**, et décrites théoriquement par exemple dans [Shield 95] ou [Zhu 03].

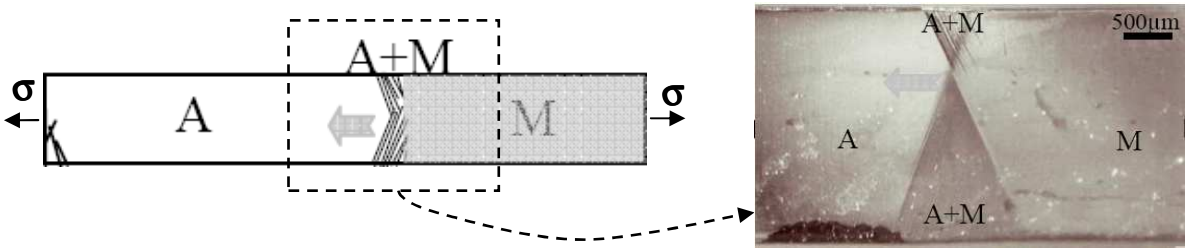


***Fig.1.1.4** – Transformation σ-induite à 1 variante - monocristal de CuAlBe [Kaouache 06]*

Dans d'autres cas, une autre microstructure se développe (*cf.* fig.1.1.4). Cette fois une seule variante de martensite M apparait. Elle est séparée de la partie non transformée A par une phase de mélange austénite-martensite, noté ici A+M.

Un cas hybride prend pour point de départ un état auto-accommodé. Un chargement mécanique s'accompagne alors d'une **réorientation** progressive des variantes. La proportion des variantes privilégiées par le chargement augmente tandis les autres variantes, défavorisées par le chargement, disparaissent progressivement. La figure 1.1.5 présente un exemple de cette réorientation, avec pour point de départ une variante M_2 (fig.1.1.5.a) stabilisée. Sous un chargement mécanique, celle-ci se transforme successivement en une variante M_1 (fig.1.1.5.b) puis une variante M_5.

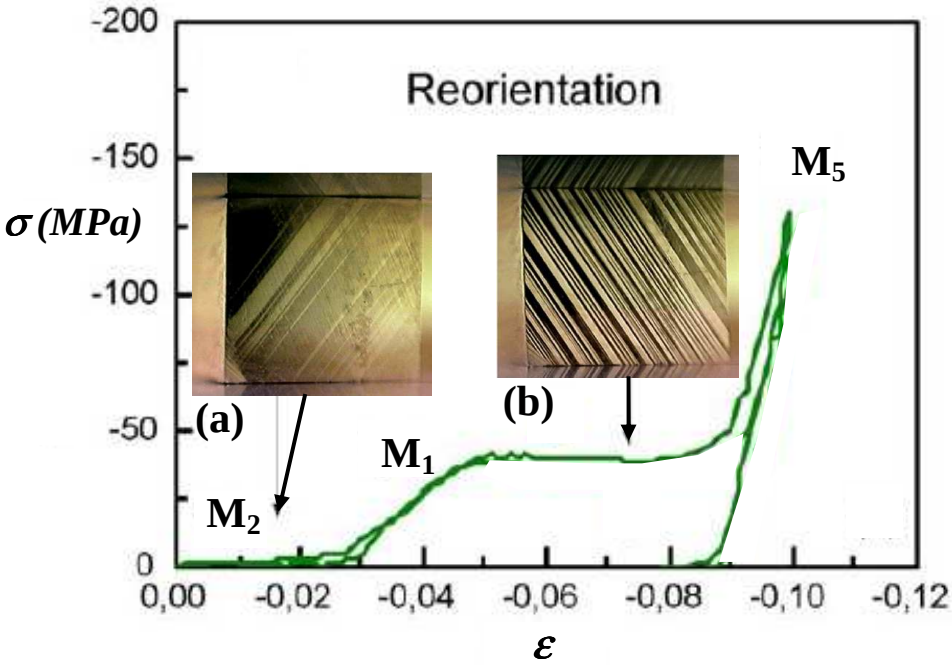


***Fig.1.1.5** – Réorientation de variantes sous chargement mécanique [Novak 06]*

La description qui précède, et les fondements théoriques qu'elle sous-entend, suppose le cristal idéal, sans défaut. Or dans la réalité, la présence de dislocations, de précipités [Baron 98], [Lovey 99], et éventuellement de joints de grain dans le cas de polycristaux, va modifier le comportement. En effet, ces défauts créent localement des champs de contrainte (*cf.* par exemple l'étude de [Kaouache 06] pour le cas du polycristal) qui peuvent privilégier certaines variantes. L'exemple précédent (fig. 1.1.5) illustre ce phénomène avec une seule variante existante à contrainte nulle, alors qu'on attendrait plutôt un groupe de variantes auto-accommodantes. Ces défauts sont de plus à l'origine du mécanisme de mémoire signalé plus haut, leur organisation privilégiant certaines variantes et guidant le changement de forme. Leur présence est aussi la cause d'irréversibilités comme les effets de « frottement » accompagnant la mise en mouvement des interfaces signalés par [Van Humbeeck 03], et se traduisant, cycle après cycle, par l'apparition de mécanismes de fatigue [Gastien 03], [Nemat-Nasser 06].

1.1.2 Diagramme de transformation

Comme il a été dit plus haut, la transformation de phase se caractérise à la fois par un dégagement de chaleur latente et un changement de maille cristalline. Ce changement de cristallographie entraîne la déformation du matériau ainsi qu'une modification plus ou moins importante de ses propriétés thermiques, mécaniques, phoniques, électriques, magnétiques… La transformation peut donc être, en principe, détectée expérimentalement en suivant l'évolution de l'une de ces propriétés. En pratique, la libération de chaleur peut être mesurée par DSC (differential scanning calorimetry) [Wang 06]. L'évolution cristallographique peut, elle, être détectée de manière plus ou moins directe par l'intermédiaire des pics de diffraction [Pattabi 07], de la longueur de l'échantillon mesurée par dilatomètrie [Uchil 01], de l'évolution de la courbe de vitesse de propagation d'une onde dans le milieu en fonction de sa fréquence[1] [Nishitani 01] [Otsuka 05], des constantes élastiques [Otsuka 05], de la capacité calorifique mesurée par calorimétrie adiabatique [Fraile-Rodriguez 06], de la résistivité [Colombo 06] ou, dans le cas de certains matériaux, de la magnétisation [Bosako 04], [Liang 06], [Kakeshita 00].

Or ces mesures, présentées par exemple sur la figure 1.1.6, font apparaître un phénomène d'**hystérésis**. Ce phénomène d'hystérésis, se caractérise par un trajet lors de la transformation « directe » (A→M) qui est différent de celui emprunté lors de la transformation inverse (M→A). Plus précisément, on définit pour la transformation directe et inverse deux températures (norme [AFFNOR 90]) : une température de début de transformation (avec en indice 's', pour 'start') définie par 10% de phase transformée, et une

[1] courbe de dispersion des phonons

température de fin de transformation (avec en indice 'f' pour 'finish') définie par 90% de phase transformée (*cf.* fig.1.1.6). Ainsi pour la transformation directe définira-t-on les 2 températures A_s et A_f caractérisant respectivement les températures de début et de fin de transformation (avec par construction $A_f \geq A_s$). Il en sera de même pour la transformation inverse qui sera caractérisée par les températures M_s et M_f (avec $M_f \leq M_s$).

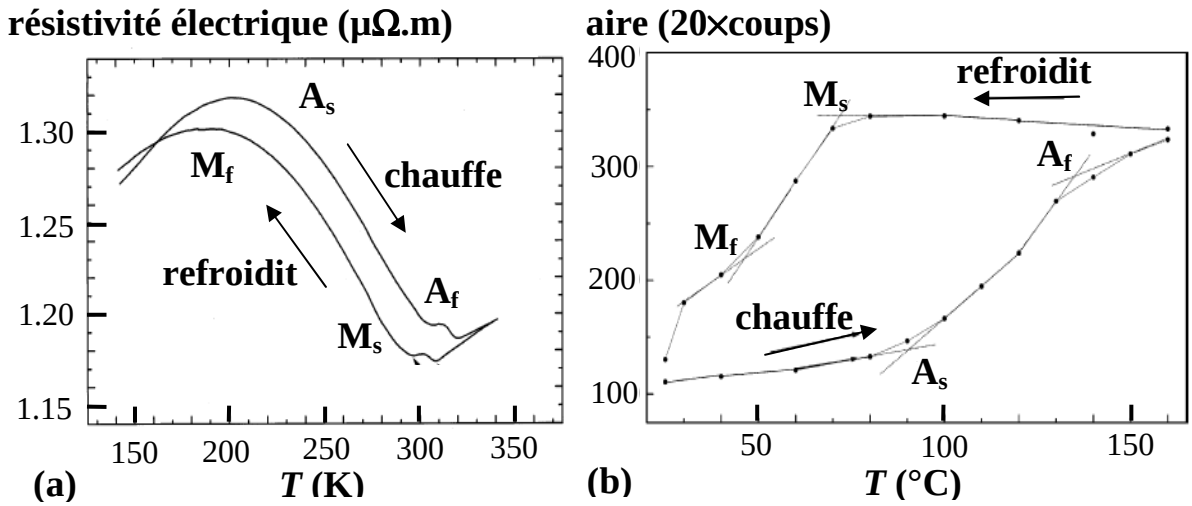


Fig.1.1.6 – *Evolution en fonction de la température (a) de la résistivité [Ren 99] (b) du pic de diffraction correspondant à l'austénite [Pattabi 07]*

De manière générale, le phénomène d'hystérésis s'interprète comme une perte d'énergie, par exemple provoquée par la viscosité dans certains caoutchoucs, ou encore par le mouvement dissipatif d'interface (paroi de Bloch) en ferromagnétisme [Varga 08], [Legoff 07]… Dans le cas des AMF l'interaction des défauts avec les interfaces est souvent invoquée pour expliquer la présence de l'hystérésis. Nous verrons néanmoins dans le cadre de cette étude que d'autres mécanismes dissipatifs, notamment associés à la diffusion de la chaleur, elle-même induite par des sources de couplage thermomécanique, peuvent eux aussi expliquer l'existence de cette hystérésis.

Dans le cas particulier d'une transformation σ-induite, (implicitement à température constante), la littérature définit à partir de la boucle d'hystérésis mécanique (fig.1.1.7.a), des contraintes de transformation austénite-martensite $\left(\sigma^{M_s}, \sigma^{M_f}\right)$, à la charge, différentes de celles de la transformation martensite-austénite $\left(\sigma^{A_s}, \sigma^{A_f}\right)$, à la décharge. Ces contraintes de transformation dépendent fortement de la température ambiante à laquelle est réalisé l'essai (fig.1.1.7.a). De manière réciproque, les températures de transformations varient, elles-aussi, en fonction de la pression [Daroczi 00] ou de la contrainte (fig.1.1.7.b) développées par un chargement mécanique. Ce phénomène illustre l'existence d'un couplage thermomécanique fort entre état thermique et mécanique lié à la transformation de phase.

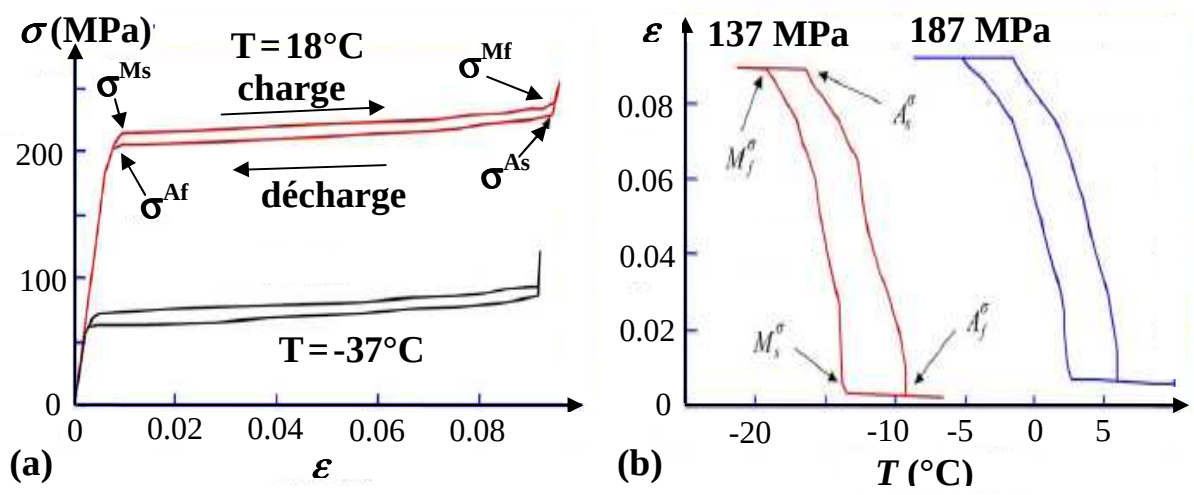


***Fig.1.1.7** – Hystérésis mécanique et mise en évidence de l'influence mutuelle entre contrainte et température – $Cu_{69}Zn_{16}Al_{11.5}$ [Gautier 97]*

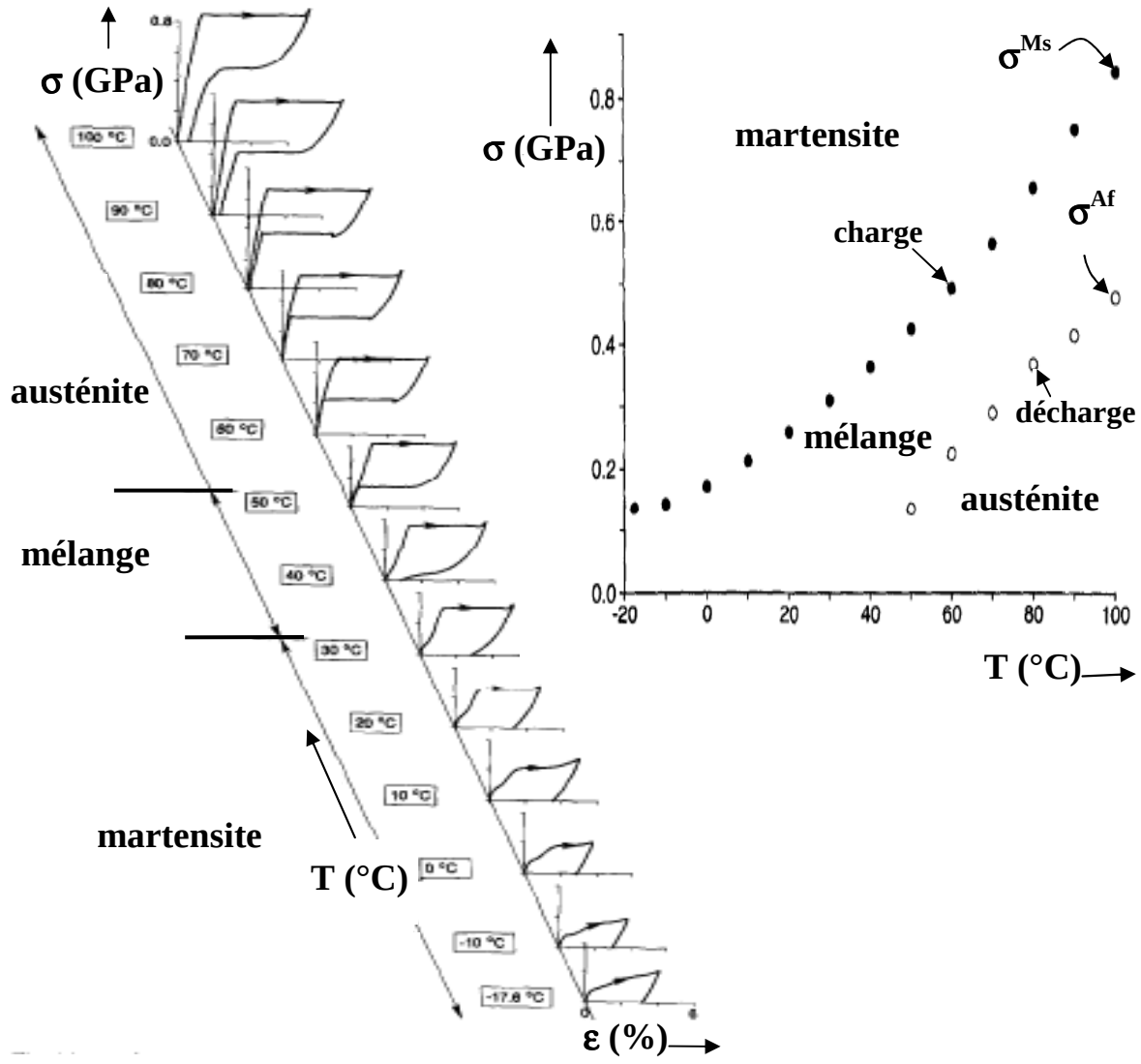


***Fig.1.1.8** – Définition du diagramme de transformation [Shaw 95]*

De manière plus systématique, la figure 1.1.8 représente l'évolution de l'hystérésis mécanique en fonction de la température. De plus, elle reporte les contraintes de transformation définies par ces hystérésis dans le plan contrainte-température σ-T. Il apparaît alors un domaine d'existence pour la phase austénitique, un second domaine pour la phase martensitique, ainsi qu'une zone de mélange : c'est le **diagramme de phase**. Les lignes de transition délimitant les domaines d'existence des phases sont relativement linéaires et parallèles, du moins tant que l'on se limite à des chargements en traction simple. Dans le cas de monocristaux, et pour une construction semblable à celle représentée sur la figure 1.1.8, la pente des lignes de transition est de l'ordre de 2.5 MPa.K^{-1} pour une variété de NiTi [Otsuka 05], de 2.8 MPa.K^{-1} pour un CuZnAl [Siredey 99], et de 2.1 MPa.K^{-1} pour un CuAlBe [Cingolani 99].

Même dans le cas uniaxial, ce diagramme de transformation peut être plus complexe. Ainsi, il peut apparaître une seconde transformation de phase solide-solide come par exemple pour le CuAlBe (fig.1.1.9.a), ou le NiMnGa [Chernenko 05]. Cette transformation est elle aussi caractérisée par un plateau mécanique et une contrainte de transformation. D'autre part, on peut compléter le diagramme en introduisant la contrainte critique à partir de laquelle un grand nombre de dislocations commencent à être mises en mouvement, et provoquent l'apparition d'une plasticité mésoscopique. Certains auteurs font d'ailleurs remarquer qu'au delà d'une certaine température, notée M_d, ('martensite death'), la plasticité précède la transformation de phase, perturbant considérablement le phénomène de transformation. Ceci est parfois souhaitable pour des applications où l'on associe la transformation de phase à la plasticité pour mettre en forme la matière de façon permanente tout en réduisant les irréversibilités induites par la plastification (acier TRIP [Cherkaoui 00]).

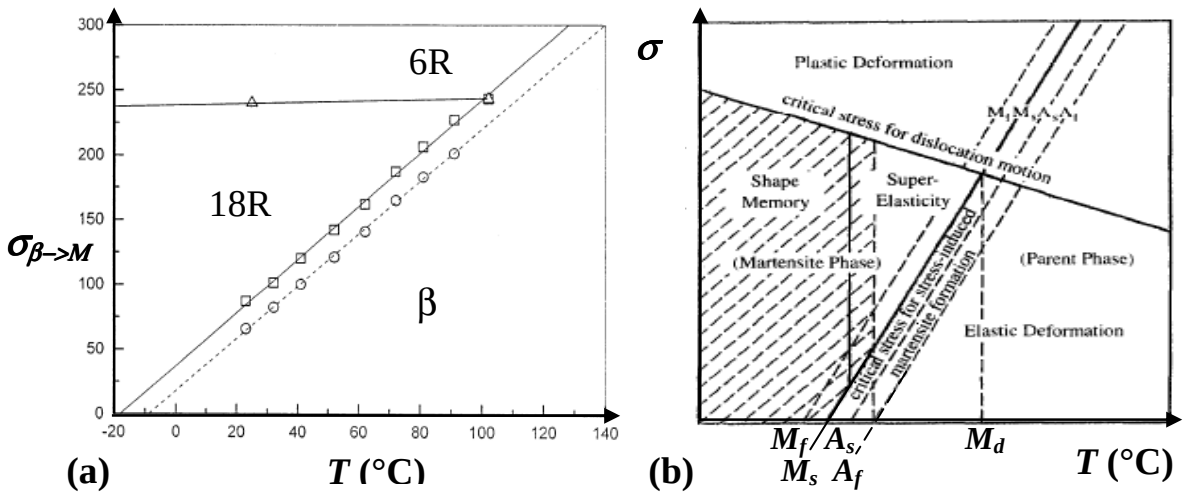


Fig.1.1.9 – *Diagramme de transformation complété par (a) une seconde transformation de phase (18R→6R) [Cingolani 99] (b) la zone de plasticité [Hosada 98]*

Comme souligné plus haut, ces diagrammes sont associés à des sollicitations particulièrement simples (chargements uniaxiaux). La prise en compte de chargements plus complexes (essais multiaxiaux, chargements non proportionnels …) va naturellement modifier l'activation des variantes [Novak 06], [Novak 97], [Lexcellent 02], [Fang 99].

1.1.3 Effets macroscopiques

Si le changement de réseau cristallographique est le mécanisme microstructural central associé aux AMF, il est toutefois intéressant de décrire brièvement les différents effets macroscopiques qui peuvent lui être associés [Patoor 90], [Patoor 06]. Ces effets macroscopiques sont la pseudoélasticité, l'effet mémoire simple sens et double sens, et l'effet caoutchoutique. Les domaines d'existence de ces comportements sont indiqués sur le diagramme de transformation précédent (fig.1.1.9.b), avec 'superelasticity' pour la pseudoélasticité et 'shape memory' pour l'effet mémoire de forme.

Pseudoélasticité : Un AMF dont la température est supérieure à la température de transformation A_f présente lors d'un chargement mécanique (σ-induit) un comportement pseudoélastique. Ce comportement se caractérise par la capacité du matériau à subir une déformation importante de façon quasi-réversible. Cette déformation peut être de quelques pour-cent pour les polycristaux à plus d'une dizaine de pour-cent pour les monocristaux. La réponse mécanique est semblable à la figure 1.1.7.a et présente une hystérésis. Au niveau thermique, on sait que le changement de phase s'accompagne d'une libération (*resp.* d'une absorption) de chaleur latente, ce qui a pour conséquence d'élever (*resp.* d'abaisser) la température de l'échantillon, et cela même dans le cas où la température ambiante est régulée et maintenue constante.

Effets mémoires : Pour une température située en dessous de A_f, l'AMF ne récupère par sa forme initiale après un essai de charge-décharge (fig.1.1.10). Trois cas sont à distinguer :

- la phase de départ est partiellement austénitique ($T > M_s$), figure 1.1.10.a, et se transforme totalement sous l'action mécanique en martensite. Lors de la décharge la température n'est pas assez importante ($T < A_f$) pour que la transformation inverse s'accomplisse totalement, ce qui a pour conséquence de maintenir une déformation résiduelle bloquée.

- la phase de départ est martensitique ($T < M_f$) avec la coexistence de plusieurs variantes jumelées. L'action mécanique a pour conséquence la réorientation des

variantes (*cf.* plus haut) [Van Humbeeck 99b], qui se bloquent lors de la décharge, probablement du fait des défauts (*cf.* le chemin 2-3-4 sur la figure 1.1.10.b).

- la phase de départ est un mélange d'austénite et de martensite ($M_s < T < M_f$), et les deux phénomènes précédents se combinent [Popov 07].

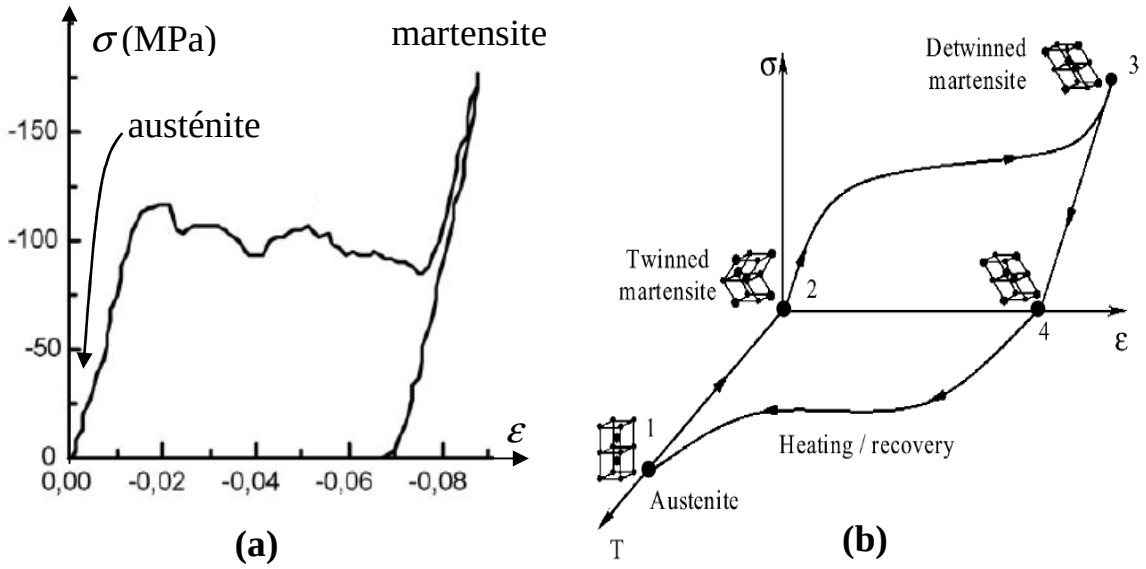


Fig.1.1.10 – *Effet mémoire avec pour phase de départ : (a) l'austénite [Novak 06] (b) un jumelage (twinned) de variantes de martensite [Patoor 06]*

Cette déformation résiduelle de plusieurs pour-cent peut ensuite être annulée par une élévation de la température de l'AMF, comme le montre le chemin 4-1 sur la figure 1.1.10.b. Ce recouvrement de la déformation s'explique par le retour du matériau en phase austénitique. Enfin, le retour à l'équilibre thermique (chemin 1-2 sur la figure) entraîne une transformation de phase sous contrainte nulle. Le phénomène d'accommodation prend alors place et reforme le mélange de variante de martensite initial : c'est l'effet mémoire simple sens.

Dans certains cas, la configuration basse température (étape 2 sur la figure 1.1.10) peut présenter une déformation, on parle alors de mémoire double sens. Cette seconde forme est « mémorisée » par le matériau par l'intermédiaire d'un traitement thermique préalable, nommé éducation, qui consiste en une suite de chargements thermiques cycliques sous un chargement mécanique constant imposant le maintien de la forme basse température désirée [Otsuka 05], [Liu 98], [Lopez-Cuellar 03], [Tan 04]. Les transformations successives provoquées par les cycles thermiques vont réorganiser les défauts et générer un champ de contrainte interne. C'est ce dernier qui orientera les variantes en l'absence d'effort extérieur et permettra au matériau de retrouver la forme mémorisée.

Effet caoutchoutique : pour une température inférieure à M_f, le matériau est auto-accommodé avec la coexistence de nombreuses variantes séparées par de multiples interfaces. Lors d'un chargement mécanique, la réorientation va entrainer le déplacement des interfaces, qui vont interagir avec les défauts et provoquer un phénomène de « frottement ». La mesure de la friction interne (fig.1.1.11) permet d'observer ce phénomène, avec un coefficient très faible pour la phase austénitique (« frottement » uniquement dû au mouvement des dislocations), fort pour la phase martensitique du fait de l'accommodation des variantes, et très important au cours de la transformation, avec le déplacement de l'interface austénite-martensite. Ces phénomènes confèrent à l'AMF un pouvoir amortissement très important et intéressant [Van Humbeeck 03]. Parmi les utilisations envisagées [Van Humbeeck 99a], [Song 06], [Janke 05], l'utilisation des AMF pour concevoir des câbles servant à dissiper l'énergie de vibration de certaines structures du Génie Civil (pont haubanés) est un sujet de recherche actif.

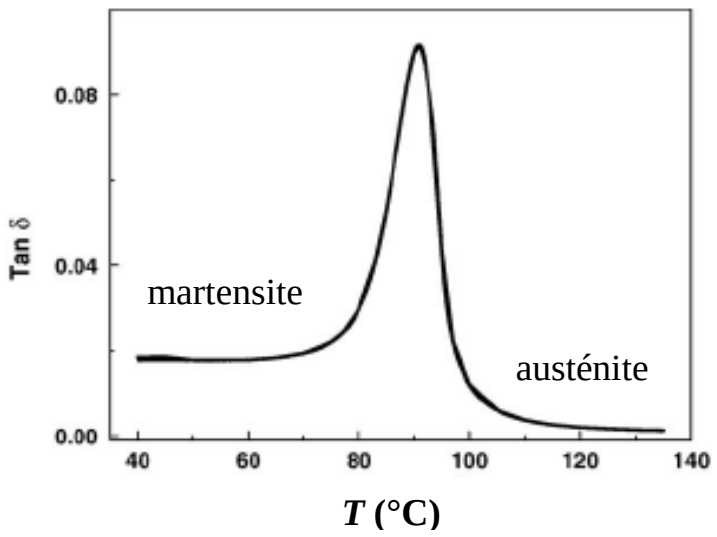


Fig.1.1.11 – *Friction interne des AMF [Li 07]*

1.2 Positionnement et stratégie de travail

Comme on vient de le voir, les phénomènes mis en jeu lors de la transformation de phase sont riches, complexes et multiples. Il est donc nécessaire de délimiter clairement le champ d'étude abordé dans ce manuscrit. C'est l'objet du présent paragraphe.

1.2.1 Objet et légitimité de l'étude vis-à-vis de l'état actuel de la littérature

Dans toute la suite du manuscrit nous limiterons notre étude des AMF à :

- des alliages à base de cuivre, qui ont l'avantage de ne pas présenter de 2nde transformation martensitique comme la phase R dans le cas des AMF à base de nickel-titane [Otsuka 05].

- des monocristaux, de manière à éviter les problèmes liés aux joints de grain. Ce choix n'est cependant pas idéal sur le plan de l'observation expérimentale dans la mesure où la transformation de phase se produit souvent de façon localisée dans des bandes étroites et mobiles.

- des sollicitations σ-induites, pour ne pas à avoir à prendre en compte le phénomène de réorientation.

- l'effet pseudoélastique (σ-induit) qui permet de restreindre l'étude à une unique variante (fig.1.1.4), ou tout du moins à un couple de variantes jumelées (fig.1.1.3.b).

- peu de cycles, c'est-à-dire que l'on effectuera suffisamment peu de cycles sur un même échantillon pour ne pas avoir à s'intéresser ici aux phénomènes de fatigue.

L'aboutissement naturel de ce travail d'analyse est la proposition d'un modèle de comportement pseudoélastique d'alliages à mémoire de forme monocristallins apte à rendre compte des effets de couplage thermomécanique, et notamment des effets thermiques qui accompagnent la transformation de phase σ-induite. Cet objectif passe par une bonne compréhension du changement de phase. Or, une problématique actuelle liée à l'étude des AMF est l'existence et la propagation d'un front de changement de phase au cours d'un essai mécanique simple. Cette localisation du comportement peut remettre en question certains constats fondés sur des observations réalisées à l'échelle correspondante à la partie utile des échantillons (réponses macroscopiques). Elle rend nécessaire l'utilisation de moyens expérimentaux donnant accès à des mesures plus locales et d'un cadre théorique

d'interprétation afin d'analyser ces interactions thermomécaniques. Notre choix s'est naturellement porté sur l'utilisation combinée de techniques d'imagerie quantitatives faisant appel à une caméra visible (mesures cinématiques) et une caméra infrarouge (mesures thermiques). Sur le plan théorique, le cadre de travail retenu est celui des Matériaux Standards Généralisés (MSG), cadre particulièrement bien adapté pour introduire les interactions thermomécaniques, qu'elles soient de nature dissipative ou liées à une forte thermo-sensibilité du matériau. Le choix d'un tel cadre avait déjà été retenu dans les précédentes études des AMF réalisées au sein du LMGC [Pham 94], [Löbel 95], [Peyroux 98], [Balandraud 00], [Leclercq 01], [Chrysochoos 03].

Sur le plan expérimental, la présence d'un front de changement de phase a été étudiée dans la littérature par l'intermédiaire de dispositifs expérimentaux variés. Tout d'abord par microscopie [Zhang 00a], [Brinson 02], [Besseghini 04], [Kaouache 06], mais aussi via l'utilisation de plusieurs jauges de déformation [Liu 98], d'un dispositif de thermographie infrarouge ([Shaw 95], [Balandraud 01], [Gadaj 02], [Sun 05], [Chang 06], [An 06], [Favier 07]), ou encore, plus rarement, un dispositif de mesure de champ cinématique [Favier 07]. La première originalité de ce travail est de coupler ces deux dernières techniques, et d'obtenir ainsi de manière non seulement locale, mais également simultanée, des informations cinématiques, thermiques et énergétiques au cours du chargement. Notons que cette approche a également été suivie par P. Schlosser dans sa thèse soutenue il y a quelques mois, dans l'étude de polycristaux d'AMF de type NiTi [Schlosser 08]. La seconde originalité de ce travail est la réalisation d'un bilan énergétique local permettant d'affiner l'analyse du phénomène de changement de phase.

1.2.2 Modèles pour les AMF et simulation de front de changement de phase

1) Revue des modèles

Pour construire un modèle de comportement des AMF, la littérature adopte trois grands types d'approche. On distinguera :

(i) l'approche dite ***phénoménologique*** qui s'attache à décrire ce qui se passe au niveau macroscopique en se fondant sur des observations réalisées à cette échelle. Cette approche peut très aisément être développée dans un cadre thermomécanique,

(ii) l'approche parfois qualifiée de ***micromécanique*** qui introduit des arguments microstructuraux, issus d'observations réalisées à des échelles plus fines que

celle de l'utilisation du modèle, par l'intermédiaire d'une procédure de changement d'échelle,

(iii) l'approche que l'on nommera ici ***cristallographique*** car s'appuyant sur l'origine de la transformation de phase à savoir le changement de symétrie cristalline.

L'approche ***phénoménologique*** peut elle-même se scinder en un premier groupe de modèles qui s'inspirent directement de la plasticité. En effet les transformations solide-solide partagent avec la plasticité, l'existence de seuil et de la mise en mouvement d'interface dans le matériau (dislocation en plasticité et plan d'habitat pour les AMF). La transformation de phase est alors considérée comme un mécanisme dissipatif soit :

- dans le cadre de la plasticité généralisée [Auricchio 97], [Auricchio 04],
- avec la proposition d'une fonction de durcissement ou d'une loi de flux liée à une surface de transformation, analogue à la surface de charge en plasticité. Une synthèse de ces modèles peut être consultée dans [Lagoudas 06].

Le second groupe de modèles phénoménologiques s'inscrit dans un cadre thermomécanique avec :

- le modèle de [Frémond 02], [Bonfanti 04], dissipatif, bivariant, basé sur le formalisme des MSG et largement repris dans la littérature [Baeta-Neves 04], [Paiva 05],
- les propositions de [Zaki 05], [Zaki 06], récemment étoffées par [Moumni 09] qui proposent un cadre général de modélisation, fondé sur le formalisme MSG avec liaisons internes, et qui permet de considérer la transformation de phase comme dissipative ou non, tout en tenant compte des effets de réorientation et de plasticité,
- le modèle anisotherme développé dans [Peyroux 98] et qui sera repris et adapté aux monocristaux dans le cadre de cette thèse,
- le modèle de [Chang 06] qui « force » la localisation en introduisant un adoucissement mécanique lors de la transformation. C'est un modèle thermomécanique, dissipatif, pouvant rendre compte des évolutions thermiques.

L'approche ***micromécanique*** adopte le plus souvent le schéma autocohérent en utilisant des arguments d'homogénéisation (de type inclusion d'Eshelby). Un exposé complet

de cette approche est consultable dans [Patoor 06]. Ces types de modèles sont largement diffusés et utilisés [Huang 98], [Siredey 99], [Sun 00], [Gao 02]. Leur principale différence est la manière de prendre en compte les interactions entre variantes de martensite [Gao 02]. Ce sont souvent des modèles dissipatifs, isothermes, et compte tenu de la finesse de l'échelle de description, lourds en charge de calcul. Concernant la prise en compte des effets thermiques par ces types de modèles, il convient de signaler les premiers travaux, uniques à notre connaissance de [Entemeyer 00].

L'approche ***cristallographique*** consiste à utiliser la théorie de Landau pour décrire les transformations de phase [Izyumov 84], [Toledano 87], [Toledano 96], [Héritier 98]. Cette approche propose de construire un potentiel thermodynamique non-convexe, possédant plusieurs puits de potentiels identifiés aux différentes phases en présence, soit pour le cas qui nous concerne, l'austénite et les variantes de martensite. La stabilité de ces phases est fonction de la température et de la contrainte. Ce type de potentiel a fait l'objet d'études mathématiques poussées [Zanzotto 03] et a été appliqué à des cas complexes multivariants [Abeyaratne 01], [Vedentam 05], [Hormann 07]. Le formalisme attenant s'appuie sur un passage discret-continu connue sous le nom d'hypothèse de Cauchy-Born [Zanzotto 96] et permet de construire le potentiel multi-puits à partir de la prise en compte du changement de symétrie induit par la transformation de phase (*cf.* fig.1.1.2) [Smith 58], [Thionnet 03].

Ce potentiel est ensuite utilisé soit à l'échelle microscopique soit à l'échelle macroscopique. Dans le premier cas, il a permis :

- de comprendre la stabilité de la microstructure auto-accommodée à contrainte nulle (transformation T-induite) [Ball 87], [Luskin 98], [Dolzmann 03],

- de retrouver la microstructure qui apparaît lors de la transformation de phase σ-induite, aussi bien pour un échantillon monocristallin que polycristallin [Wang 97], [Albers 04], [Ahluwalia 06], [Finel 09] (méthode des champs de phase).

A l'échelle macroscopique l'utilisation est plus contrastée avec :

- les travaux qui ont, les premiers, proposé l'utilisation de la théorie de Landau pour la modélisation de la transformation de phase dans les AMF [Falk 80], [Falk 90],

- des approches phénoménologiques qui considèrent la transition de phase comme une instabilité pouvant être décrite via un assemblage, non convexe, de trois potentiels thermodynamiques [Abeyaratne 97], [Bhattacharya 97], et en utilisant éventuellement la physique statistique pour proposer une probabilité de transitions de phase [Müller 01],

- des modèles qui permettent de générer des fronts dans un cadre thermomécanique avec :
    - l'approche de l'équipe [Sprekels 98], [Mackin 97], [Bubner 00],
    - l'approche de [Melnik 02], [Wang 05] qui utilise la thermodynamique étendue,
    - l'approche de [Hall 02], [Hall 07].

2) Capacité des modèles à générer un front de changement de phase

Les modèles de l'approche phénoménologique et de l'approche cristallographique ont touts deux permis la génération de fronts de changement de phase en employant :

- des approches phénoménologiques dans un cadre thermomécanique, dissipatif, avec surface de charge [Anand 03] ou bien sans [Liu 07],
- l'approche thermomécanique non dissipative qui se base sur des effets de couplage thermomécanique [Peyroux 98], [Chrysochoos 03],
- le modèle de [Chang 06] que ce soit dans sa restriction isotherme [Azadi 07], ou dans sa formulation générale qui tient compte de la température [Faciu 02], [Chang 06]. L'existence du front est favorisée par l'adoucissement mécanique du modèle,
- l'approche cristallographique adoptée par [Bubner 00] avec néanmoins l'inconvénient de générer des oscillations sur la réponse mécanique.

Les modèles permettant de reproduire l'hétérogénéité semblent indiquer que la littérature interprète la propagation d'un front de changement de phase associée à une localisation forte des déformations, soit comme un effet matériel d'adoucissement à une échelle mésoscopique, soit comme une instabilité microstructurale décrite par une énergie libre non convexe et donnant une réponse mécanique non monotone.

Dans la suite de l'étude, nous nous proposons de montrer qu'une autre voie pour décrire cette localisation de la transformation est possible. Cette voie se fonde sur une analyse expérimentale et théorique des phénomènes énergétiques qui accompagnent le changement de phase solide-solide à l'échelle mésoscopique. La démarche suivie est succinctement décrite dans le paragraphe qui suit. Nous verrons que cette démarche n'est pas incompatible avec ce qui précède et peut, notamment, se raccrocher aux concepts d'instabilité invoqués pour décrire la transition à une échelle atomique.

1.2.3 Objectifs et mise en place de l'étude

Les modèles de la littérature évoqués précédemment considèrent en général peu ou pas les effets thermiques accompagnant une transition de phase sous contrainte. Certes les effets de la température sur le comportement des AMF sont reconnus au travers de la définition du diagramme de phase et de la température ambiante à laquelle le matériau est sollicité. Mais l'idée que les auto-échauffements (ou auto-refroidissements) induits par la transformation modifient fortement la cinétique de changement de phase reste peu répandue, ou mal comprise, et en tous cas, peu partagée. Pourtant ces effets thermiques associés à la transformation sont induits par des chaleur latentes qui sont d'un ordre de grandeur 10 fois plus élevé que celui des énergies mécaniques mises en jeu durant la transformation [Chrysochoos 96], [Löbel 95]. La thèse qui suit défendra ce point de vue dans le cas particulier des monocristaux pour lesquels la localisation de la transformation de phase amplifie plus encore le rôle de la température. En effet, les sources sont plus localisées pour les monocristaux que pour les polycristaux, ce qui a pour conséquence de générer des gradients de température plus importants [Löbel 95], [Balandraud 00].

Nous rappelons que la suite de ce mémoire est structurée de la façon suivante : le chapitre II rappelle brièvement le cadre d'interprétation retenu. Il définit la forme du bilan d'énergie en se focalisant sur un cycle de charge-décharge. Il présente ensuite les moyens d'essai et les méthodes expérimentales mises en œuvre pour observer thermiquement et cinématiquement les effets du changement de phase. En particulier, nous verrons comment la richesse des champs de mesures thermomécaniques obtenus permet de suivre de manière fine le(s) front(s) de changement de phase. D'autre part, la confrontation des données cinématiques et calorimétriques permettra de valider certaines équations comportementales et d'en identifier les paramètres matériels.

Le modèle d'AMF monocristallin est ensuite construit dans le chapitre III en s'appuyant sur l'analyse expérimentale réalisée ainsi que sur des études antérieures. Le modèle est ensuite implémenté dans un code de calcul éléments finis utilisant la « bibliothèque comportementale » MATLIB développée par L. Stainier[2]. Le code commercial Comsol Multiphysics ® sera également utilisé afin de contrôler la validité des prédictions numériques. Le modèle, dans sa version tridimensionnelle, sera limité au cas isotrope, univariant, monocristallin. Sa généralisation au cas polyvariant polycristallin a déjà été abordée dans la thèse de [Balandraud 00] et ne présente que peu d'intérêt dans le cadre de cette étude, où l'on étudie uniquement un monocristal et l'effet pseudoélastique monovariant.

[2] Université de Liège, puis Ecole Centrale Nantes

Les résultats issus des simulations numériques seront ensuite systématiquement confrontés aux résultats expérimentaux.

Les effets du couplage sur le comportement seront mis en avant tant au travers des résultats expérimentaux du chapitre II que des simulations numériques du chapitre III. Le lecteur pourra, à cette occasion, jauger du bien fondé des hypothèses retenues pour la modélisation du comportement des AMF, pseudoélastiques et monocristallins. On y discutera de l'importance relative des effets dissipatifs et de couplage, ainsi que de la taille du domaine de transition. On pourra notamment imposer de façon arbitraire au modèle une dissipation intrinsèque nulle et/ou un domaine de transition réduit à une simple ligne.

Enfin, le chapitre IV se proposera de reprendre l'analyse des réponses mécaniques non monotones prédites par les approches dont le potentiel est non convexe. On reviendra aussi sur la présence de l'hystérésis mécanique. La discussion s'appuiera sur un premier modèle (rudimentaire) de changement de phase utilisant les outils de la dynamique moléculaire (DM). Dans ce but, un code de dynamique moléculaire a été développé, pour lequel on a réduit l'éprouvette monocristalline soumise à un essai de traction à un monocristal idéal et équiatomique, soumis à une charge suivant le sens de l'orientation cristalline. Dans un tel contexte, le caractère non convexe du potentiel thermodynamique sera rediscuté.

CHAPITRE 2

Mesures couplées de champs cinématiques et calorimétriques appliquées aux AMF

Sommaire

2.1 Cadre thermomécanique
2.1.1 Description de l'état d'un système thermomécanique
2.1.2 Evolution de l'état thermomécanique
2.1.3 Loi de comportement et potentiel thermodynamique
2.1.4 Equation de diffusion de la chaleur
2.1.5 Bilan d'énergie et trajet thermomécanique

2.2 Méthodologie expérimentale
2.2.1 Dispositif expérimental
2.2.2 Intercorrélation d'image
2.2.3 Thermographie infrarouge
2.2.4 Equation de la chaleur
2.2.5 Ecriture d'un bilan d'énergie local
2.2.6 Estimation des grandeurs thermomécaniques

2.3 Application à l'étude du CuAlBe
2.3.1 Matériau et géométrie
2.3.2 Description des essais thermomécaniques réalisés
2.3.3 Analyse globale
2.3.4 Analyse locale
2.3.5 Analyse énergétique locale

2.1 Cadre thermomécanique

Le cadre théorique retenu est celui des Matériaux Standards Généralisés (MSG) [Halphen 75]. Le recours à un cadre thermomécanique tel que celui-ci est fondamental, car le phénomène de transition de phase peut être tout aussi bien le résultat d'une sollicitation mécanique que thermique. De plus, ses conséquences sont elles aussi à la fois mécaniques, avec une déformation de transformation, et thermiques, avec la libération exo-endothermique d'une chaleur latente de transformation. On va voir que négliger les effets thermiques associés à la transformation de phase n'est pas envisageable. En effet, la chaleur latente de changement de phase a une importance énergétique dominante devant les autres contributions énergétiques. De plus, il existe une interaction forte entre les états mécaniques et thermiques de la matière. Même dans les applications industrielles, les composants en AMF restent rarement à température constante. Il peut alors s'avérer primordial d'être capable de prendre en compte ces variations de température lors de la phase de conception du composant ; que ces variations soient imposées par le chargement *ou* induites par les effets de couplage thermomécanique [Kohl 02], [Eaton-Evans 06]. Enfin le choix d'un tel cadre va permettre d'établir un bilan d'énergie complet et, en particulier, d'analyser le contenu énergétique des boucles d'hystérésis associées à des cycles de chargement.

2.1.1 Description de l'état d'un système thermomécanique

Un milieu continu est considéré comme un système thermodynamique hors équilibre siège de processus irréversibles. Ici les systèmes seront considérés comme fermés, c'est-à-dire que les échanges avec l'extérieur seront limités aux échanges énergétiques.

Nous considérons dans la suite que les processus sont à la fois :

(i) mécaniquement quasi-statiques, c'est-à-dire que les quantités d'accélération restent négligeables, ou encore que la puissance des efforts extérieurs fournie au système s'équilibre avec la puissance des efforts intérieurs développée par le système,

(ii) mais aussi thermodynamiquement quasi-statiques, c'est-à-dire qu'au cours d'une évolution thermodynamique le système considéré passe par une suite continue d'états d'équilibre.

Cette seconde hypothèse est conforme à l'axiome de l'état local énoncé par [Boccara 68], [Balian 82], [Germain 83], qui suppose qu'à chaque instant, tout système thermodynamique hors-équilibre peut être considéré comme une réunion de sous-systèmes

thermodynamiques homogènes en état d'équilibre. Cet axiome sous-entend que le temps de retour à l'équilibre thermostatique de chaque sous-système est infiniment plus petit que le temps caractéristique du système global. Ces sous-systèmes thermodynamiques à l'équilibre sont, en général, définis par un élément de volume au voisinage des points matériels du milieu continu. L'état d'équilibre de chaque particule est décrit par un ensemble fini de variables d'états. On distingue généralement parmi ces variables d'état les variables observables (la température absolue *T*, la déformation totale…) des variables internes qui permettent de rendre compte des phénomènes microstructuraux internes au système (évolution de la population de dislocations, de microfissures, de taux de phase transformée…). On appellera potentiel thermodynamique une fonction à valeur scalaire de ces variables d'état.

2.1.2 Evolution de l'état thermomécanique

L'évolution du système est régie par les lois de conservations [Coleman 63], comprenant les deux principes de la thermodynamique. Ces lois peuvent être écrites sur l'ensemble du système sous forme d'intégrale de volume, ou localement sur un élément de volume. C'est cette seconde approche qui est retenue dans la suite de cette présentation.

Le premier principe de la thermodynamique, correspondant à la conservation de l'énergie du système, s'exprime localement[3] :

$$\rho.\dot{e} = -w_{\text{int}} + r - div\left(\vec{q}\right) \tag{2.1.1}$$

avec ρ la masse volumique du système, *e* l'énergie interne spécifique, w_{int} la puissance des efforts intérieurs par unité de volume, égale en HPP à $-\overline{\overline{\sigma}}:\dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}$ si $\overline{\overline{\sigma}}$ est la contrainte de Cauchy et $\overline{\overline{\varepsilon}}$ la déformation linéarisée, *r* la chaleur volumique engendrée par des actions à distance (magnétisme…) et $\vec{q}$ le flux de chaleur échangé à la frontière du volume élémentaire.

Le second principe s'écrira, quant à lui :

$$\rho.\dot{s} = \frac{r}{T} - div\left(\frac{\vec{q}}{T}\right) + \frac{d}{T} \tag{2.1.2}$$

avec *s* l'entropie spécifique, qui est, elle aussi, un potentiel thermodynamique, et d/T la source d'entropie volumique toujours positive, soit encore une dissipation volumique *d* positive, qui rend compte des irréversibilités internes à l'élément de volume.

[3] par l'intermédiaire du théorème de l'énergie cinétique et du théorème de la divergence

En combinant les deux équations, on retrouve l'inégalité de Clausius-Duhem qui doit être vérifiée pour que le processus soit thermodynamiquement admissible (c'est-à-dire qu'il vérifie le second principe de la thermodynamique) :

$$\underbrace{-\rho.(\dot{e}-T.\dot{s})+\overline{\overline{\sigma}}:\dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}}_{d_1}\underbrace{-\vec{q}\frac{\vec{\nabla}T}{T}}_{d_2}=d\geq 0 \qquad (2.1.3)$$

La dissipation volumique d peut alors être partitionnée en une dissipation thermique volumique d_2 et une dissipation intrinsèque volumique d_1. On admet classiquement [Germain 73] que ces deux dissipations sont séparément positives.

2.1.3 Loi de comportement et potentiel thermodynamique

A ce stade, le problème n'est pas mathématiquement fermé puisqu'il existe plus d'inconnues que d'équations de conservation. Pour compléter le système d'équations, des lois décrivant les propriétés du matériau doivent être ajoutées, ce sont les lois de comportement. Avant de les décrire, on rappelle que l'énergie interne e est un potentiel thermodynamique, c'est-à-dire une fonction des n variables d'état du système, soit l'entropie s et l'ensemble des autre variables internes α_j, pour $(j=1...n)$. Or l'entropie n'est pas accessible expérimentalement, on définit alors le potentiel thermodynamique énergie libre comme la transformée de Legendre de l'énergie interne par rapport à l'entropie :

$$\psi(T,\alpha_j)=e(s,\alpha_j)-\frac{\partial e}{\partial s}s=e-Ts \qquad (2.1.4)$$

où la température T apparaît comme la variable conjuguée de l'entropie, température qui reste positive, l'énergie interne étant, par construction, une fonction monotone croissante de l'entropie.

Les lois de comportement peuvent être regroupées en deux sous ensembles :

les équations d'état : la différentielle de l'énergie libre permet de définir les variables conjuguées, dérivées partielles du potentiel par rapport à chacune des ses n+1 variables d'état :

$$d\psi=\sum_{j=0}^{n}\frac{\partial\psi}{\partial\alpha_j}.d\alpha_j \qquad (2.1.5)$$

Les équations définissant les variables conjuguées sont appelées équations d'état :

$$s = -\frac{\partial \psi}{\partial T} \tag{2.1.6}$$

$$\frac{\overline{\overline{\sigma}}^{r}}{\rho} = \frac{\partial \psi}{\partial \overline{\overline{\varepsilon}}} \tag{2.1.7}$$

$$\frac{A_j}{\rho} = \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_j} \quad ,\left(j = 2...n\right) \tag{2.1.8}$$

avec $\overline{\overline{\sigma}}^{r}$ la contrainte réversible.

Les équations d'évolution : dans l'inégalité de Clausius-Duhem, la dissipation d peut s'exprimer sous la forme d'une somme de produit forces-flux, les forces thermodynamiques étant définies plus bas et les flux correspondants à $\left(\vec{q}, \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}, \dot{\alpha}_j\right)$:

$$d = \frac{\vec{\nabla} T}{T}\left(-\vec{q}\right) + \underbrace{\left(\overline{\overline{\sigma}} - \overline{\overline{\sigma}}^{r}\right)}_{\overline{\overline{\sigma}}^{ir}} : \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}} - \sum_{j=2}^{n} \frac{\partial \psi}{\partial \alpha_j} . \dot{\alpha}_j \geq 0 \tag{2.1.9}$$

avec $\overline{\overline{\sigma}}^{ir}$ la contrainte irréversible. Les lois d'évolutions se définissent par des relations entre les forces et les flux assurant la positivité de la dissipation. Dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles (TPI) linéaire cette relation est décrite par une matrice, symétrique, définie positive [Callen 85]. Cette hypothèse est cependant insuffisante pour modéliser des comportements non-linéaires et/ou non réguliers (à seuil). Il est alors commode de faire appel au formalisme des matériaux standards généralisés (MSG), qui postule l'existence d'un pseudo-potentiel de dissipation $\varphi\left(\vec{q}, \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}, \dot{\alpha}_j\right)$ convexe, différentiable, positif et minimal en (0, 0, …), hypothèses qui assurent la positivité de la dissipation [Halphen 75]. Les équations d'évolution sont alors définies par la différentielle de φ (quand celui-ci est suffisamment régulier), et définissent les forces thermodynamiques $\left(-\vec{\nabla} T / T, \overline{\overline{\sigma}}^{ir}, X_j\right)$:

$$-\frac{\vec{\nabla} T}{T} = \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{q}} \tag{2.1.10}$$

$$\overline{\overline{\sigma}}^{ir} = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}} \tag{2.1.11}$$

$$X_j = -A_j = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\alpha}_j} \quad ,\left(j = 2...n\right) \tag{2.1.12}$$

2.1.4 Equation de diffusion de la chaleur

Les deux principes de la thermodynamique peuvent être combinés de manière à décrire l'évolution de la température, sous la forme de l'équation de diffusion de la chaleur. Elle se construit en partant du constat suivant :

$$\rho T.\dot{s} = -\rho T \frac{d}{dt}\frac{\partial \psi}{\partial T} = \underbrace{-\rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2}}_{\rho C}.\dot{T} \underbrace{- \rho T \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \bar{\bar{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\bar{\varepsilon}}} - \rho T \sum_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \alpha_j} \dot{\alpha}_j}_{p_{ctm}} \tag{2.1.13}$$

où C est la chaleur spécifique, à $\bar{\bar{\varepsilon}}$ et α_j constants, et p_{ctm} est la puissance associés aux couplages thermomécaniques, c'est-à-dire les sources de chaleur crées par les interactions entre la température et les autres variables d'état. L'équation de la chaleur s'obtient finalement en combinant les équations 2.1.3 et 2.1.13 :

$$\rho C\dot{T} - r + div\vec{q} = d_1 + p_{ctm} \tag{2.1.14}$$

Le premier terme, $\rho C\dot{T}$, correspond à l'absorption/désorption de la chaleur par le matériau, le second, r, à la chaleur massique reçue de l'extérieur et le troisième, $div\vec{q}$, à la diffusion de la chaleur dans le matériau. Les deux derniers termes décrivent les sources dissipatives et les sources de couplage.

2.1.5 Bilan d'énergie et trajet thermomécanique

L'équation de la chaleur offre la possibilité de réaliser un bilan d'énergie. Considérons un chemin thermomécanique résultant d'un essai de charge-décharge ($\sigma_{\mathcal{A}} = \sigma_{\mathcal{B}}$), s'initiant en un état $\mathcal{A} = (T_{\mathcal{A}}, \varepsilon_{\mathcal{A}}, \alpha_{\mathcal{A}})$, α étant l'ensemble des variables internes au système, et se terminant en $\mathcal{B} = (T_{\mathcal{B}}, \varepsilon_{\mathcal{B}}, \alpha_{\mathcal{B}})$. Trois cas sont alors distingués et schématisés sur la figure 2.1.1 :

(i) $\mathcal{A} \neq \mathcal{B}$: cas général,

(ii) $\mathcal{A} \neq \mathcal{B}$ et $\varepsilon_{\mathcal{A}} = \varepsilon_{\mathcal{B}}$: une boucle d'hystérésis mécanique est associée au chemin thermodynamique,

(iii) $\mathcal{A} = \mathcal{B}$: le cycle mécanique et aussi un cycle thermodynamique.

En notant $t_{\mathcal{B}} - t_{\mathcal{A}}$ la durée de l'essai, les équations 2.1.1 et 2.1.14 permettent d'écrire l'énergie de déformation $W_{def}^{\mathcal{AB}}$ associée au cycle charge-décharge :

$$W_{def}^{\mathcal{AB}} = -\int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} w_{int}\, dt = \int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} d_1.dt + \int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} \left(\rho \dot{e} - \rho C\dot{T} + p_{ctm}\right) dt \tag{2.1.15}$$

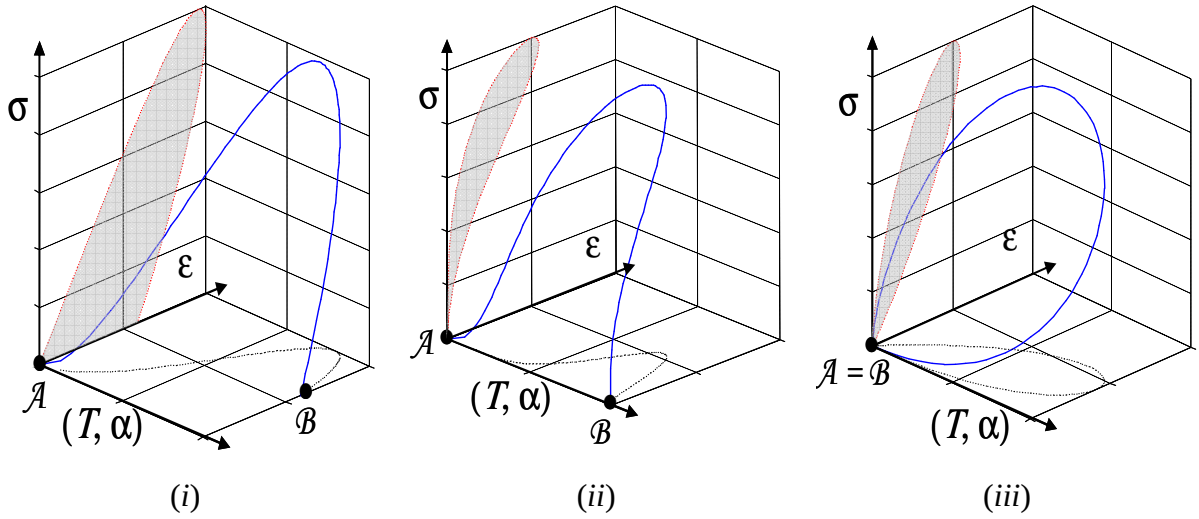


Fig.2.1.1 – *Trajets thermomécaniques et projections dans le plan mécanique*

Cette équation montre que :

(i) dans le cas général, l'énergie de déformation peut s'écrire en fonction de l'énergie dissipée, des variations d'énergie interne, de la chaleur absorbée durant l'essai de charge-décharge et de la chaleur mise en jeu par les couplages thermomécaniques,

(ii) lorsque l'essai mécanique engendre une boucle d'hystérésis, l'énergie de déformation correspond à l'énergie A_h de l'aire de la boucle d'hystérésis (en grisé sur la figure 2.1.1.*(ii)*), dans le cas où l'essai est uniaxial,

(iii) lors d'un cycle thermodynamique, l'énergie de déformation est due aux effets dissipatifs intrinsèques et aux mécanismes de couplages, le produit ρC étant considéré comme constant.

Dans ce dernier cas, le bilan d'énergie s'écrit sous la forme simplifiée :

$$W_{def}^{\mathcal{AB}} = \int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} \overline{\overline{\sigma}} : \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}.dt = \int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} d_1.dt + \int_{t_{\mathcal{A}}}^{t_{\mathcal{B}}} p_{ctm}.dt \qquad (2.1.16)$$

Cette équation établit plusieurs conditions restrictives quant à l'identification de l'énergie dissipée à l'aire d'une boucle d'hystérésis :

– sur un plan mécanique, l'énergie de déformation $W_{def}^{\mathcal{AB}}$ n'est égale à l'aire d'hystérésis que dans le cas où l'essai est uniaxial. Dans le cas contraire, les contributions multiaxiales doivent être prises en compte,

– l'équation 2.1.16 montre que les sources de couplages peuvent elles aussi influencer l'importance de l'aire d'hystérésis,

– si le cycle mécanique n'est pas un cycle thermodynamique, alors l'aire d'hystérésis sera influencée par les variations d'énergie interne sur le cycle.

Par conséquent, l'évaluation de la dissipation par la seule estimation de l'aire d'hystérésis peu s'avérer biaisée. Ce constat renforce l'intérêt d'estimer les sources de chaleur par l'intermédiaire de l'équation 2.1.16, et ce dans le but d'évaluer l'importance relative des effets dissipatifs et de couplage.

2.2 Méthodologie expérimentale

Cette seconde partie présente les techniques expérimentales mises en œuvre dans le but d'accéder à des champs de mesures cinématiques, thermiques et énergétiques au cours d'un essai mécanique. Depuis peu, la mise en correspondance de ces mesures, à la fois sur le plan spatial et temporel, est rendue possible par le dispositif SynchroCAM, développé au sein de l'équipe ThM2 [Chrysochoos 09]. Mon travail s'inscrit naturellement dans cet effort, avec une première phase de validation de ce nouveau dispositif, réalisée au cours de mon DEA [Vigneron 05], suivie ici de son exploitation dans l'étude des alliages à mémoire de forme qui présentent, entre autres, l'apparition de fronts de changement de phases.

2.2.1 Dispositif expérimental :

Fig.2.2.1 – *Dispositif expérimental*

Le dispositif expérimental, illustré par la figure 2.2.1, est constitué d'une machine de traction MTS et de deux caméras : l'une sensible au rayonnement visible (Camélia 8M de la société ATMEL), l'autre au rayonnement infrarouge (Jade 3 de la société CEDIP).

Le dispositif expérimental complet est présenté sur le schéma de la figure 2.2.2. La machine de traction et les caméras sont reliées à leurs ordinateurs de pilotage respectifs. Ils forment 3 sous-ensembles hachurés sur la figure 2.2.2. Le quatrième sous-ensemble est associé au dispositif électronique, réalisé au LMGC, et baptisé SynchroCAM, qui a pour but de synchroniser les différents systèmes d'acquisition. Les communications entre les éléments sont représentées soit par des traits pleins, pour les flux de consigne, soit par des lignes en pointillés, pour les flux de données. Enfin, les flèches indiquent les directions de transfert.

Dans ce qui suit, les principales caractéristiques de la machine de traction utilisée sont rappelées. Ensuite, celles du dispositif SynchroCAM sont brièvement évoquées, ses performances étant plus amplement reprises dans la section 2.2.5. Enfin, les caméras visible et infrarouge sont respectivement décrites.

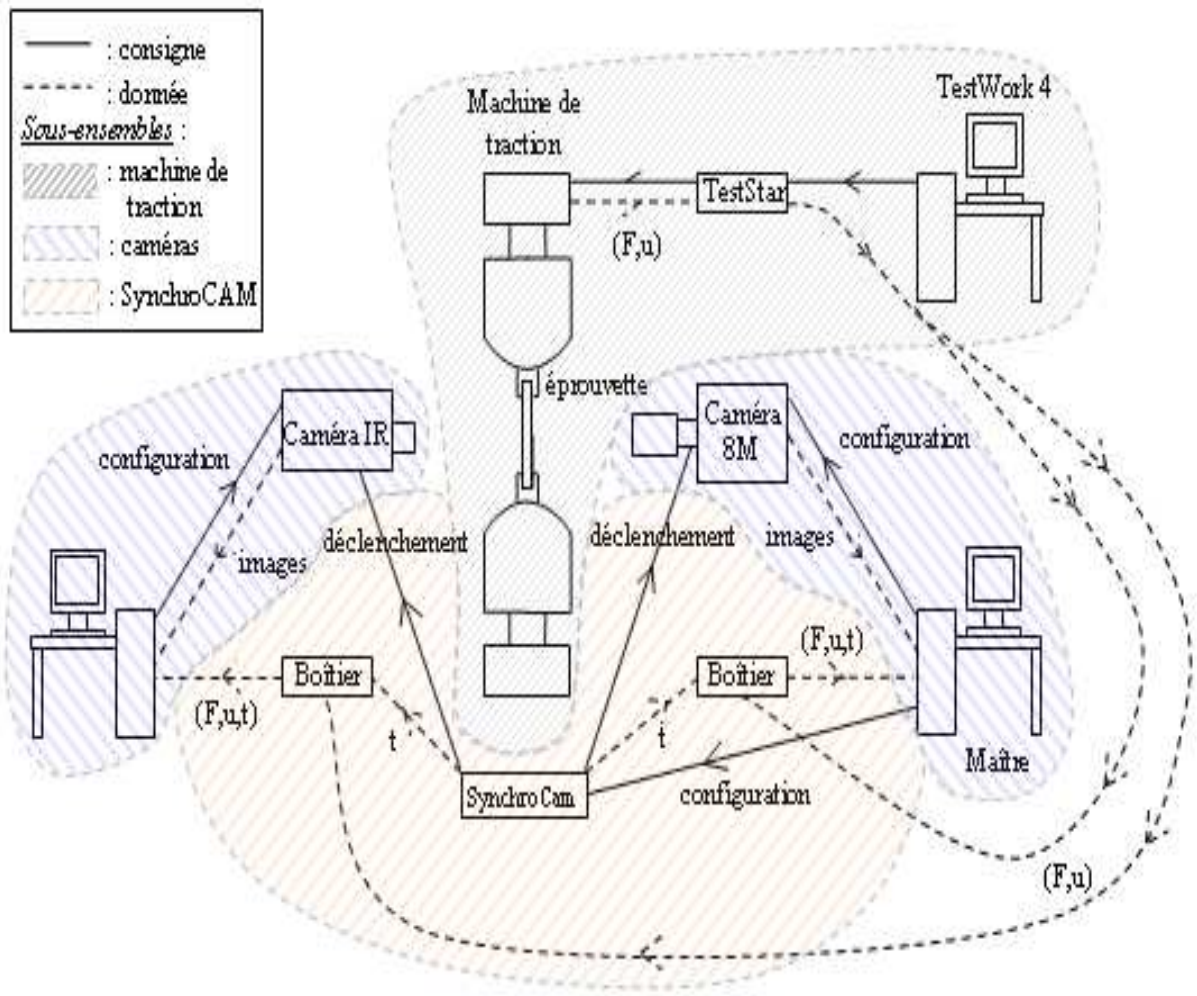


Fig.2.2.2 – *Schéma du dispositif expérimental*

La machine de traction utilisée est une MTS 810 hydraulique. Sa traverse est munie d'un capteur de déplacement de type LVDT. Sa course maximale est de ±100mm, sa précision est de 0.25mm entre ±20mm et de 0.5mm au-delà. Entre la traverse et le mors supérieur de la machine de traction est montée une cellule de force de 25kN, de classe 0.5 (ISO 7500-1) ; ce qui correspond à une précision supérieure à 125 N. Lors d'une vérification effectuée le 26/06/02 cette précision était plutôt de 70N.

Une éprouvette, constituée du matériau à étudier, est placée dans les mors auto-serrants de la machine de traction. Ces mors permettent d'imposer une pression de serrage

réglable et asservie durant le déroulement de l'essai. La sollicitation de chargement est, quant à elle, paramétrée par l'intermédiaire du logiciel TestWork v4. Cette sollicitation peut porter sur différents canaux : déplacement, force ou éventuellement sur un signal extérieur (extensomètre, thermocouple…) L'asservissement est assuré par le contrôleur numérique TestStar (fig2.2.2). La réponse de l'éprouvette à cette sollicitation est filmée sur la face avant et sur la face arrière par les deux caméras (fig.2.2.1) et est accompagnée des réponses des capteurs de déplacement *u* et de force *F* (fig.2.2.2). Pour l'une ou l'autre des caméras, l'acquisition d'une image du film est déclenchée par un signal extérieur délivré par le boîtier SynchroCAM. A chaque acquisition d'images, les signaux issus des capteurs de force (*F*) et d'allongement (*u*) sont numérisés et stockés avec les images.

La caméra, située à droite sur les figures 2.2.1 et 2.2.2, est une caméra Camélia 8M de la société ATMEL. Elle est munie d'une matrice de capteurs CCD possédant la réponse spectrale reportée sur la figure 2.2.3.a. On observe que les capteurs couvrent une gamme spectrale de 0.4-1µm, ce qui englobe bien le domaine visible du spectre électromagnétique. La résolution de la caméra est de 2300×3500 pixels, son pitch est égal à 10µm.

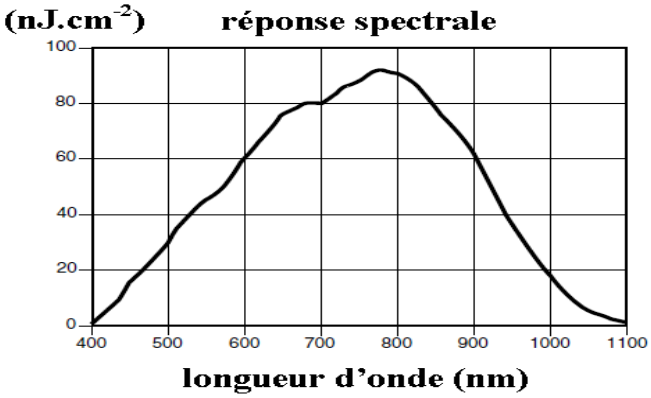


Fig.2.2.3 – *Réponse spectrale d'un capteur de la caméra 8M [Atmel]*

L'objectif utilisé pour les essais est de type Nikon Sigma EX DG Macro, de focale égale à 105 mm et de nombre d'ouverture réglable entre 32 et 2.8.

Le temps d'ouverture de l'obturateur (temps d'intégration), peut être réglé entre 1 et 2000 ms par pas de 1 ms. Ce paramètre ainsi que d'éventuels gains et offsets, avant ou après numérisation, sont réglés par l'ordinateur de contrôle de la caméra (figure 2.2.2), et permettent d'ajuster l'histogramme de l'image.

La seconde caméra, à gauche sur la figure 2.2.2, est une caméra infrarouge de type Jade 3, produite par la société CEDIP, de résolution 320×256 pixels carrés et de pitch 30µm.

Elle possède des capteurs de type InSb dont la sensibilité est optimale sur la plage 3-5µm (fig.2.2.3.b), ce qui correspond au proche infrarouge du spectre électromagnétique.

L'objectif possède une focale de 25mm, et un nombre d'ouverture de 2.

Le temps d'intégration peut varier de 10 µs à plusieurs millisecondes par pas de 1µs. Il est choisi de manière à augmenter le rapport signal sur bruit tout en évitant la saturation des capteurs. Par la suite, le temps d'intégration retenu est de l'ordre d'une milliseconde permettant des mesures optimales sur la plage de température 15-36°C.

Pour résumer, les données collectées par le dispositif au cours de l'essai sont :

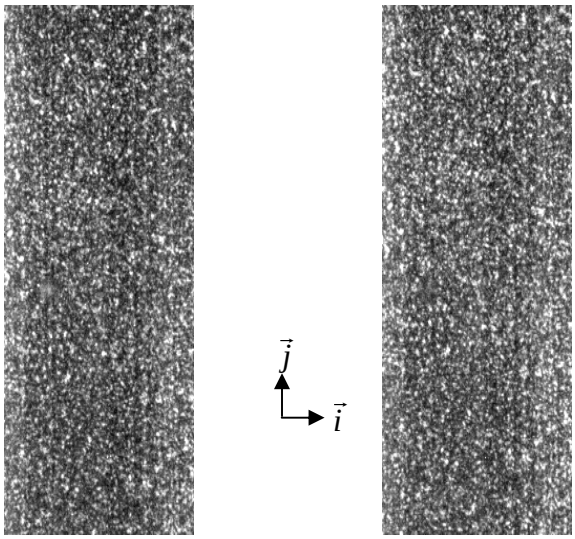
- la mesure des capteurs de déplacement u et de force F,
- le temps t, qui est fourni par la base de temps commune issue du boîtier SynchroCAM. Pour plus de détail, le lecteur pourra se reporter à la section 2.2.5.
- les images visibles,
- les images infrarouges.

Dans la section suivante, le principe de la méthode d'intercorrélation d'image est rappelé. Elle permet d'estimer le champ de déplacement à la surface de l'éprouvette à partir des images visibles. Ensuite, la méthode permettant de déduire des images infrarouges le champ de température à la surface de l'éprouvette est décrite. Enfin, la forme générale du bilan local d'énergie sera présentée.

2.2.2 Intercorrélation d'image

Parmi les alternatives aux mesures cinématiques globales, le recours à la méthode d'intercorrélation d'image s'impose de plus en plus, comme l'atteste une littérature abondante et en pleine expansion. Le principal intérêt de cette méthode est la réalisation d'une mesure locale, non destructive et quantitative du déplacement. De plus, la flexibilité de la méthode ouvre la possibilité de son adaptation au cas des fluides avec la technique de « Particle Image Velocimetry » [Heitz 07], [Cuzol 07]. En ce qui nous concerne, la mesure cinématique locale fournie par la méthode d'intercorrélation d'image va nous permettre d'approfondir l'étude des fronts de changement de phase des alliages à mémoire de forme, dont la présence a déjà été attestée dans un certain nombre de travaux ([Shaw 95], [Liu 98], [Balandraud 01], [Gadaj 02], [Sun 05], [An 06], [Chang 06], [Favier 07]).

2.2.2.1 Principe



(a) **(b)**

Fig.2.2.4 – *(a) image de référence* $I_r(\vec{X})$ *(b) image déformée* $I_d(\vec{x})$

L'image visible de l'éprouvette, reportée sur la figure 2.2.4.a, correspond à l'image de référence du calcul des déplacements. Elle correspond à la fonction de répartition des niveaux de gris $I_r(\vec{X})$ numérisée sur 12 bits, où $\vec{X}$ est la position d'un pixel dans le repère $(\vec{i}, \vec{j})$ de l'image. L'histogramme de cette fonction, tracé sur la figure 2.2.5.a, révèle la distribution des niveaux de gris, d'écart type 173,3. L'étalement de cette distribution résulte de la présence d'un mouchetis de peinture apposé avant l'essai, visible sur la figure 2.2.4.a, dont le contraste

est optimisé à la fois par l'éclairage de la cible par une source froide Moritex (réf. MHF-M1002) et par l'ajustement du temps d'intégration, comme précisé plus haut.

La figure 2.2.5.b représente la fonction d'autocorrélation normalisée de l'image, accompagnée par son profil radial (fig.2.2.5.c). La présence d'un unique maximum indique l'absence de périodicité dans l'image, rendant compte de l'aspect aléatoire du mouchetis. La largeur à mi-hauteur de la fonction d'autocorrélation normalisée est prise comme indicateur du rayon moyen du mouchetis (fig.2.2.5.c) [Rubin 04]. Il est ici de 1.5 pixels, soit environ 36 µm.

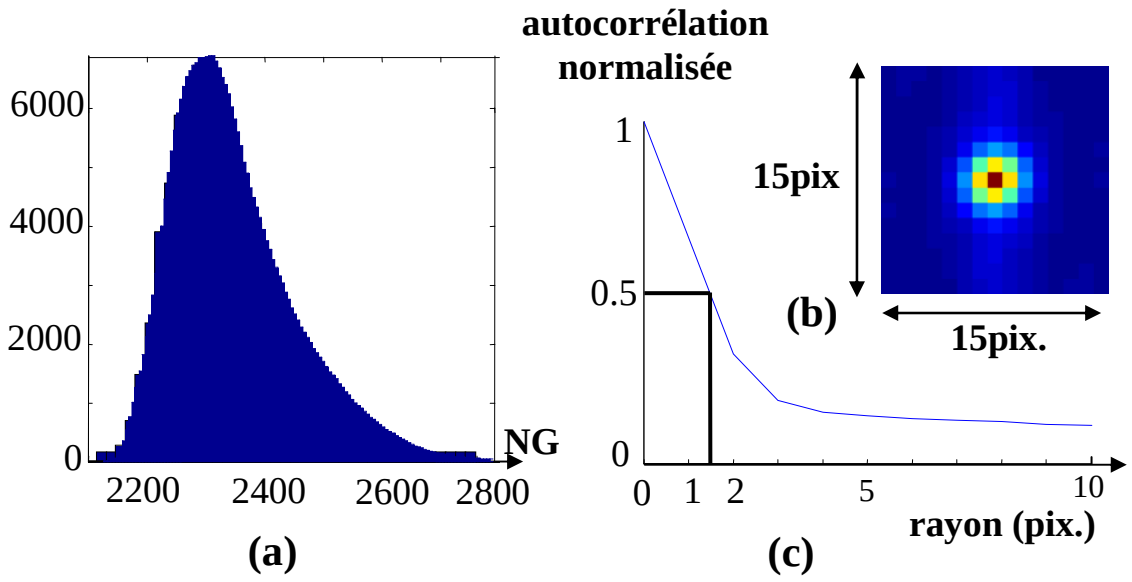


Fig.2.2.5 – *(a) Histogramme des niveaux de gris (80 barres) – (b) Fonction d'autocorrélation – (c) Profil radial de la fonction d'autocorrélation*

L'image 2.2.4.b correspond à l'éprouvette déformée. La fonction de répartition des niveaux de gris est notée $I_d(\vec{x})$. Au voisinage d'un point *M* donné, l'évolution de cette fonction entre l'image de référence et l'image déformée est décrite, dans l'hypothèse de conservation du flux optique, par une transformation matérielle Φ_M [Bornert 08] :

$$I_r(\vec{X}) = I_d(\Phi_M(\vec{X})) \qquad \text{avec} \qquad \vec{x} = \Phi_M(\vec{X}) \tag{2.2.1}$$

La méthode d'intercorrélation d'image consiste, à partir des deux fonctions de niveau de gris $I_r(\vec{X})$ et $I_d(\vec{x})$, à estimer la transformation matérielle Φ_M au voisinage d'un ensemble de point *M* répartis sur la surface de l'échantillon.

2.2.2.2 Intercorrélation d'image

Les points de mesures M_0 sont régulièrement répartis sur une grille rectangulaire, reportée sur la figure 2.2.6, de pas horizontal GS_x et de pas vertical GS_y (GS pour « grid step » en anglais). La transformation matérielle réelle $\Phi_{M_0}(\vec{X})$ au voisinage de M_0 est approchée par une fonction polynomiale $\varphi_{M_0}(\vec{X})$ [Lu 00] :

$$\varphi_{M_0}(X,Y)=\begin{pmatrix} a_1+a_3(X-X_0)+a_5(Y-Y_0)+a_7(X-X_0).(Y-Y_0)+a_9(X-X_0)^2+a_{11}(Y-Y_0)^2\ldots \\ a_2+\underbrace{a_4(X-X_0)+a_6(Y-Y_0)+a_8(X-X_0).(Y-Y_0)+a_{10}(X-X_0)^2+a_{12}(Y-Y_0)^2\ldots}_{\varphi^{\varepsilon}_{M_0}(X,Y)} \end{pmatrix} \quad (2.2.2)$$

Les deux premiers paramètres a_1 et a_2 correspondent à la translation de la zone de corrélation (Z_c), et par suite de son centre (X_0, Y_0) ; les autres termes $\varphi^{\varepsilon}_{M_0}$ décrivent la déformation à son voisinage, et les gradients de cette déformation.

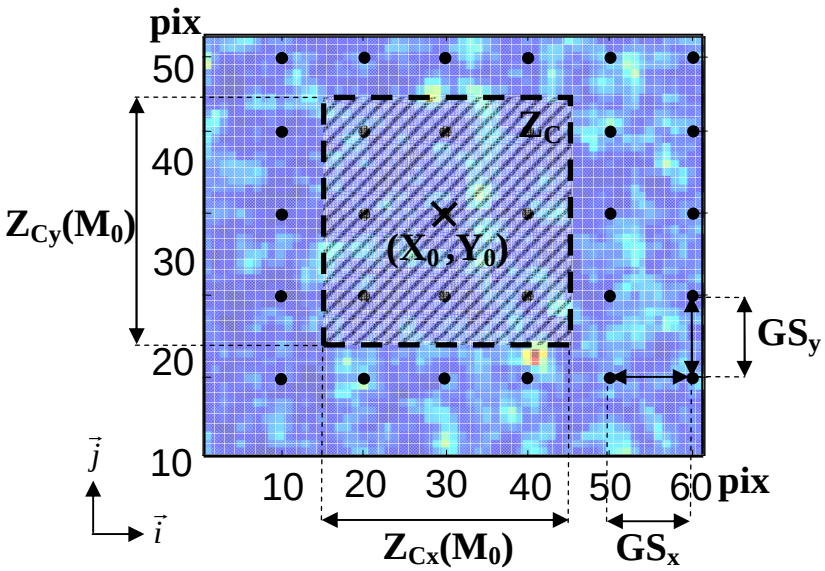


Fig.2.2.6 – *Pas de la grille GS (10 ×10 pix.) de sous-échantillonnage de l'image, et zone de corrélation $Z_C(M_0)$ (30 ×30 pix.) d'un point matériel $M_0(X_0,Y_0)$ sur cette grille*

Il existe plusieurs possibilités pour définir un critère de corrélation entre les images de références et les images déformées. Le critère le plus naturel correspond à la norme L_2 de la différence entre les images (éq.2.2.3) noté C_{SSD}. Le calcul de cette norme est restreint à un voisinage rectangulaire de M_0 : la Zone de Corrélation $Z_C(M_0)$ de dimension (Z_{Cx}, Z_{Cy}), représentée sur la figure 2.2.6.

$$C_{SSD}(\varphi)=\int_{Z_C(M_0)}\left(I_r(\vec{X})-I_d\left(\varphi_{M_0}(\vec{X})\right)\right)^2 d\vec{X} \quad (2.2.3)$$

Le principe de la Corrélation d'Images Numériques (CIN) consiste à rechercher les paramètres de φ_{M_0} qui permettent de vérifier « au mieux » la conservation du flot optique (éq. 2.2.1). Ceci revient en pratique à rechercher l'extremum du critère de corrélation retenu. [Chambon 03] propose un éventail de coefficients de corrélation. Parmi ceux-ci, nous avons adopté le coefficient de corrélation croisé normalisé $C_{NCC}(\varphi)$:

$$C_{NCC}(\varphi)=\frac{\int_{Zc(M_0)} I_r\left(\vec{X}\right) I_d\left(\varphi_{M_0}\left(\vec{X}\right)\right) d\vec{X}}{\sqrt{\int_{Zc(M_0)} I_r\left(\vec{X}\right) d\vec{X}^2}\sqrt{\int_{Zc(M_0)} I_d\left(\varphi_{M_0}\left(\vec{X}\right)\right) d\vec{X}^2}} \tag{2.2.4}$$

Appliqué à des signaux discrets, il se réécrit :

$$\tilde{C}_{NCC}(\varphi)=\frac{\sum_{I=-Z_{C_x}/2}^{Z_{C_x}/2}\sum_{J=-Z_{C_y}/2}^{Z_{C_y}/2} I_r(I,J) I_d\left(\varphi_{M_0}(I,J)\right)}{\sqrt{\sum_{I=-Z_{C_x}/2}^{Z_{C_x}/2}\sum_{J=-Z_{C_y}/2}^{Z_{C_y}/2} I_r(I,J)^2}\sqrt{\sum_{I=-Z_{C_x}/2}^{Z_{C_x}/2}\sum_{J=-Z_{C_y}/2}^{Z_{C_y}/2} I_d\left(\varphi_{M_0}(I,J)\right)^2}} \tag{2.2.5}$$

La méthode retenue ici pour obtenir cet optimum est itérative, et chaque itération comporte deux étapes. La première consiste à estimer uniquement les paramètres de translation pour un certain nombre de points situés au voisinage de M_0. Pour cela, on calcule la valeur de $\tilde{C}_{NCC}(\varphi)$ pour des valeurs entières des paramètres de translation a_1 et a_2, les autres étant fixées aux valeurs obtenues à l'itération précédente. On calcule alors les valeurs optimales de $\tilde{C}_{NCC}(\varphi)$ par interpolation polynomiale quadratique autour du maximum discret [Wattrisse 01a] :

$$\vec{u}=\underset{(a_1,a_2)}{\arg\max}\,\tilde{C}_{NCC} \tag{2.2.6}$$

Le champ de déplacement local au voisinage de M_0 est alors approximé au sens des moindres carrés par un polynôme de degré égal à celui de φ_{M_0} pour obtenir tous les coefficients (a_i) de la transformation.

On itère les deux étapes précédentes autant de fois que nécessaire pour atteindre la convergence[4].

Nous allons maintenant caractériser l'erreur commise dans l'estimation des déplacements, et les moyens mis en œuvre pour son atténuation. Nous commencerons par caractériser l'erreur induite par la méthode numérique. Nous verrons ensuite les erreurs inhérentes au dispositif physique.

[4] Le critère de convergence porte sur la différence entre le déplacement calculé au point M_0 entre deux itérations successives. La valeur seuil retenue est de 0.01 pixel.

2.2.2.3 Sources d'erreurs liées à la CIN

La méthode numérique comporte plusieurs approximations qui peuvent être critiques [Bornert 08] : la fonction de forme retenue $\varphi_{M_0}(\vec{X})$, la fonction d'interpolation nécessaire au calcul de $I_d(\varphi_{M_0}(\vec{X}))$, la discrétisation de l'intégration, la présence de bruit sur les images, …

Deux principaux régimes d'erreur peuvent être rencontrés : le régime d'erreur de modèle, prépondérant dès que la fonction de forme retenue $\varphi_{M_0}(\vec{X})$ n'est pas assez riche pour rendre compte de la transformation réelle, et le régime d'erreur ultime, rencontré quand $\varphi_{M_0}(\vec{X})$ est bien adaptée à la transformation réelle [Bornert 08]. L'erreur ultime est principalement liée aux approximations consenties dans la mise en œuvre de la méthode numérique (interpolation, discrétisation), et aux écarts à la conservation du flot optique (bruit, …).

L'erreur ultime fait apparaître deux contributions : une erreur systématique (qui évolue de façon sensiblement sinusoïdale en fonction du déplacement imposé [Wattrisse 01a]), et une erreur aléatoire. L'erreur aléatoire tire son origine du bruit présent sur les images. Ce bruit résulte de la chaîne d'acquisition : biais induit par la source lumineuse, bruit photonique, bruit électronique, numérisation et erreur de quantification [Triconnet 09]. Afin de caractériser l'ensemble de ces sources de bruit, une surface immobile est filmée. La figure 2.2.7.a représente l'une des images de ce film à laquelle on a soustrait l'image moyennée sur 100 images. L'histogramme correspondant est reporté sur la figure 2.2.7.b. Il révèle la distribution de l'erreur, de type gaussienne, d'écart-type égal à 38.6 niveaux de gris. Cette erreur est atténuée dans le calcul des déplacements par un effet de moyenne sur la zone de corrélation [Wattrisse 01a]. L'opération de filtrage appliquée par la suite au signal (*cf.* section 2.2.6) accentue encore cette atténuation.

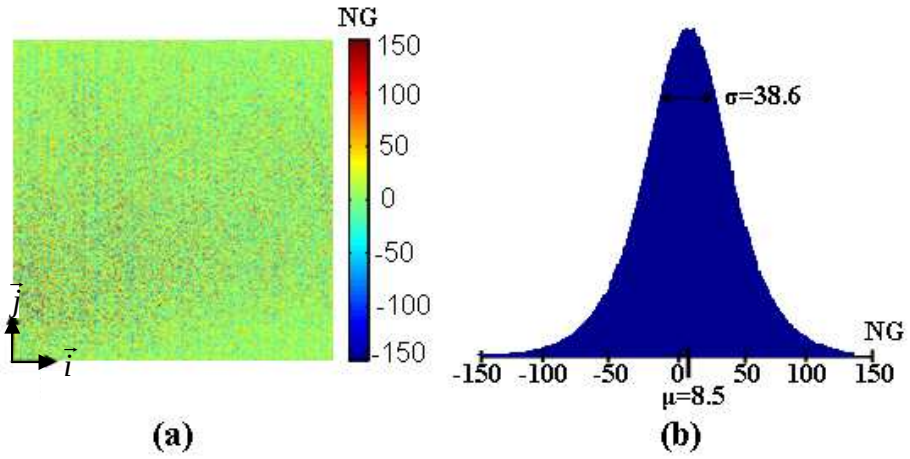


***Fig.2.2.7** – (a) Bruit des capteurs – (b) Histogramme avec moyenne μ et écart-type σ*

2.2.2.4 Source d'erreurs 'optiques'

Parallèlement à ces erreurs d'origine électroniques et numériques, il existe des erreurs d'origine optique qui faussent le calcul du déplacement, en modifiant la topologie de l'image. En premier lieu, la projection $\mathbf{\Psi}_P$ de la scène filmée, par l'optique de la caméra, sur le plan de la matrice de capteurs, transforme l'image. Ainsi, un défaut de parallélisme de l'éprouvette vis-à-vis du capteur CCD aura pour effet de dilater l'image (ou de la contracter selon l'orientation du défaut de parallélisme) au cours d'une translation, comme l'illustre la figure 2.2.8. Pour réduire ce biais, la caméra est montée sur une table micrométrique à trois rotations, permettant d'optimiser le parallélisme capteur-éprouvette.

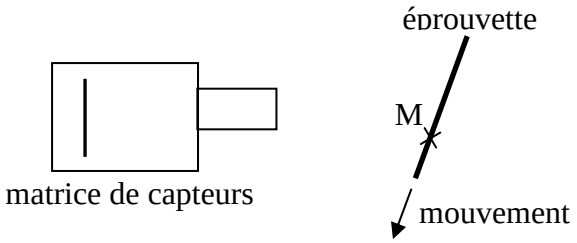


Fig.2.2.8 – *Défaut de parallélisme*

Une deuxième source d'erreur est associée aux distorsions de l'image par l'optique (fig.2.2.9). La figure 2.2.9.a représente l'image originale *I* qui serait numérisée par la caméra si l'optique était parfaite. Pour fixer les idées, on suppose que cette image parfaite correspond à une grille régulière. La figure 2.2.9.b représente l'image $\tilde{I}$ après la transformation $\mathbf{\Psi}_D$ représentant les distorsions de l'optique. C'est en fait cette image qui est numérisée par le CCD. On suppose que cette transformation est purement radiale et à symétrie cylindrique, et que $\vec{X}_0$, le centre de l'optique, est un invariant de la transformation.

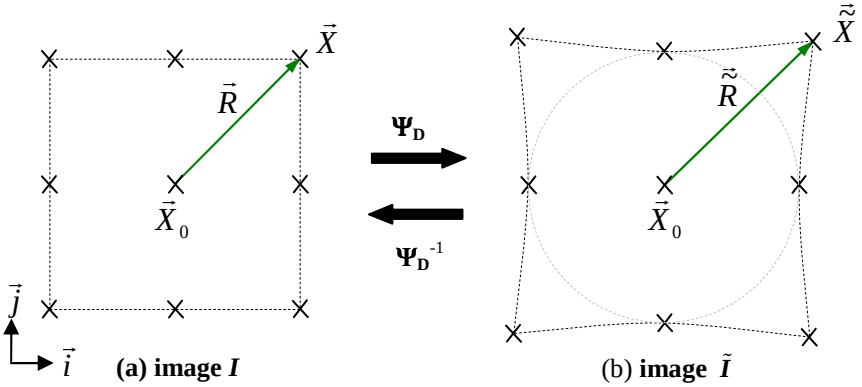


Fig.2.2.9 – *Transformation de l'image par la fonction Ψ_D modélisant les distorsions*

Les distorsions vont se traduire par un déplacement apparent des points $\vec{X}$ de l'image originale I qui vont ainsi se retrouver en $\vec{\tilde{X}}$ dans l'image réelle $\tilde{I}$. On propose alors de modéliser cette transformation par un déplacement $\vec{u}_D = \vec{\tilde{X}} - \vec{X}$ purement radial (*i.e.* porté par $\vec{R} = \vec{X} - \vec{X}_0$) de centre $\vec{X}_0$, approché par un développement de Taylor (éq.2.2.7). Selon ce modèle, on cherche le déplacement $\vec{u}_D$ sous la forme :

$$\vec{u}_D : \vec{X} \rightarrow \vec{\tilde{X}} = \vec{X}_0 + \vec{R}\left(1 + \sum_{i=0}^{d_r} a_i \left\|\vec{R}\right\|^i\right) \tag{2.2.7}$$

soit :

$$\vec{\tilde{R}} = \vec{R}\left(1 + \sum_{i=0}^{d_r} a_i \left\|\vec{R}\right\|^i\right) \tag{2.2.8}$$

Dans ce développement (éq. 2.2.7 et 2.2.8), le terme d'ordre 0 doit être nul et le terme d'ordre 1 correspond au défaut de parallélisme. Dans la pratique, on se restreint ici à des polynômes de degré d_r égal à 4. La figure 2.2.10 représente, en bleu, le champ de déplacement imposé à l'objet réel (une translation verticale uniforme : $\vec{\delta}$) et celui observé sur l'image distordue $\tilde{I}$. Nous noterons $\vec{x}$ (*resp.* $\vec{\tilde{x}}$) la position du point après déplacement dans l'image I (*resp.* $\tilde{I}$). Le déplacement effectivement mesuré par CIN entre ces deux images sera donc : $\vec{\tilde{x}} - \vec{\tilde{X}}$.

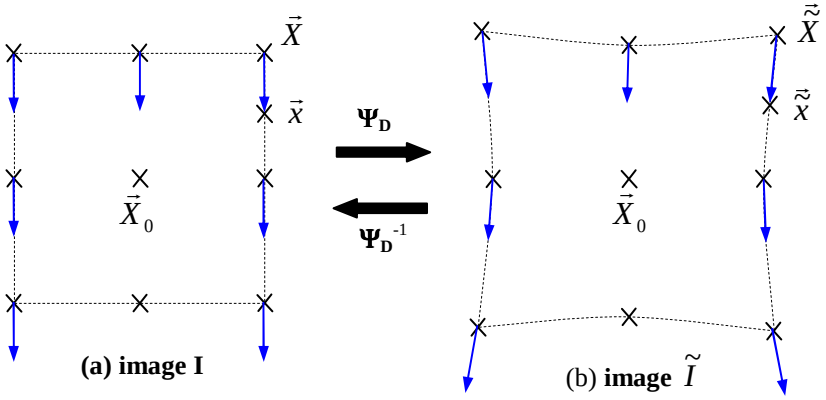


***Fig.2.2.10** – Transformation d'un déplacement vertical par dilatation*

Ainsi, le champ de déplacement observé dans l'image $\tilde{I}$ ne correspond pas au déplacement dans I, avec, en particulier, une composante horizontale qui apparaît. Par exemple, lors d'un essai réel, pour lequel on déplace verticalement de 10 mm une plaque mouchetée fixée au seul mors mobile de la machine de traction, on obtient le champ de déplacement reporté sur la figure 2.2.11.

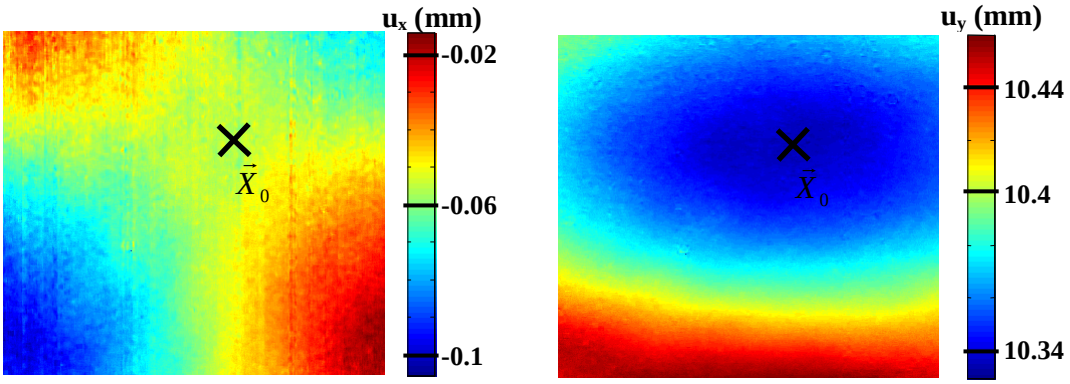


Fig.2.2.11 – *Champ de déplacement calculé par intercorrélation d'image lors d'un déplacement imposé de 10mm*

Le modèle proposé (éq. 2.2.8) permet d'évaluer le champ de déplacement $\vec{\tilde{u}}$ dans l'image déformée,

$$\vec{\tilde{u}} = \vec{\tilde{x}} - \vec{\tilde{X}} = \underbrace{\left(\vec{X} + \vec{\delta} + \vec{u}_D\left(\vec{X} + \vec{\delta}\right)\right)}_{\vec{\tilde{x}}} - \underbrace{\left(\vec{X} + \vec{u}_D\left(\vec{X}\right)\right)}_{\vec{\tilde{X}}} \tag{2.2.9}$$

On propose d'identifier les paramètres du modèle en minimisant la différence entre le déplacement mesuré $\vec{u}$ et le champ le déplacement $\vec{\tilde{u}}$ associé au modèle de distorsion. En pratique, cette minimisation est réalisée par la méthode Quasi-Newton BFGS, qui est une méthode de descente de gradient dont la Hessienne est approchée :

$$\min_{\left(\vec{X}_0, \{a_i\}_{i=1\ldots r}\right)} \left(\vec{u} - \vec{\tilde{u}}\right) \tag{2.2.10}$$

Afin d'illustrer cette méthode, l'essai correspondant à la figure 2.2.11 est pris pour identifier le modèle. Ensuite, l'image de référence et une seconde image, différente de celle qui a permis l'identification du modèle sont corrigées par la transformation inverse. La seconde image choisie correspond à un déplacement vertical imposé de 12.5 mm. Le champ de déplacement calculé entre ces deux images dans lesquelles les distorsions ont été corrigées (fig.2.2.12) possède une faible variation aléatoire. Les résidus observés sont interprétés comme des écarts à la symétrie sphérique de l'optique réelle, non prises en compte dans le modèle de distorsion.

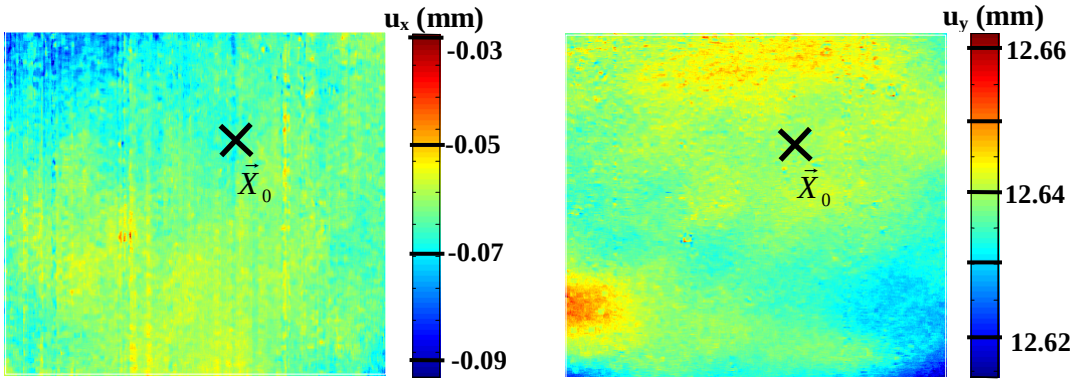


Fig.2.2.12 – *Champs de déplacement calculés sur les images dont les distorsions ont été corrigées, pour un déplacement imposé de 12 mm*

De manière générale, une fois le modèle identifié on peut corriger toute image $\tilde{I}$ acquise par la caméra visible, pour des conditions expérimentales similaires à celle pour laquelle la configuration a été réalisée, en appliquant la transformation inverse :

$$\Psi_D^{-1} : \tilde{I} \rightarrow I : \vec{\tilde{X}} \mapsto \vec{X} \qquad (2.2.11)$$

Le défaut de parallélisme éprouvette-capteur dans la direction du mouvement correspond au terme de degré 1 dans l'expression de $\vec{u}_D$.

L'ensemble de ces précautions : parallélisme éprouvette-capteur, correction des distorsions des images par l'intermédiaire de Ψ_D^{-1}, mais aussi choix optimal à la fois de la zone de corrélation Z_C et de la méthode d'intercorrélation vis-à-vis de la situation expérimentale rencontrée, assure à la méthode d'intercorrélation d'image d'estimer les déplacements avec une précision de l'ordre de 1/20e de pixel, comme nous le rappellerons à la section 2.2.6.

2.2.3 Thermographie infrarouge

La thermographie infrarouge va enrichir l'étude des alliages à mémoire de forme en associant des champs de température aux champs cinématiques. Cette technique est développée au sein du laboratoire depuis 20 ans, avec par exemple les thèses de [Louche 99] ou plus récemment [Honorat 06]. Cette seconde mesure de champ n'est pas une fin en soi, bien qu'elle permette à elle seule, sous certaines conditions, de mettre en évidence la présence du front de changement de phase (par exemple dans [Shaw 95]). En effet les variations de température sont à la fois le résultat des sources de chaleur mises en jeu lors de la transformation, mais également la conséquence des échanges de chaleur avec le milieu ambiant (*cf.* section 2.2.4). On verra donc dans la prochaine section comment la mesure de la température permet de remonter à la « source » de ces variations thermiques, c'est-à-dire, dans le cas des AMF, au dégagement de chaleur associé à la transformation de phase.

2.2.3.1 Principe physique

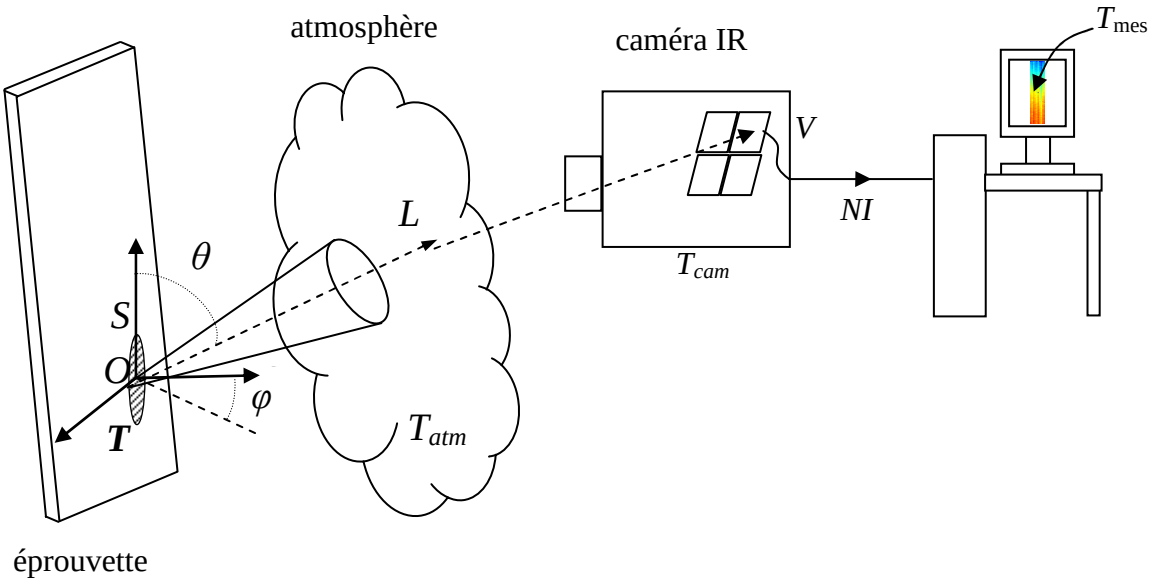


Fig.2.2.13 – *Schéma du chemin du rayonnement issu de l'éprouvette*

Le schéma de la figure 2.2.13 illustre le dispositif de mesure par thermographie infrarouge. Un élément de surface S de l'éprouvette, de température T ($T > 0$ K), émet un rayonnement thermique. Ce rayonnement se propage jusqu'à un capteur de la caméra dont il change l'état électrique. Cette variation de tension V du capteur est numérisée sur l'image IR,

pour le pixel $\vec{X}$ correspondant, sous la forme d'un niveau informatique $NI(\vec{X})$. Un exemple d'image infrarouge obtenue par ce processus est reporté sur la figure 2.2.14.a, c'est un thermosignal brut exprimé en niveau informatique. Or la grandeur que nous souhaitons manipuler n'est pas le rayonnement infrarouge mais la température, il nous faut donc procéder à une conversion de ce thermosignal (NI) en température (K), c'est l'objet de cette section. La figure 2.2.14.b correspond à l'image de la figure 2.2.14.a au terme de cette conversion *NI-T*[5].

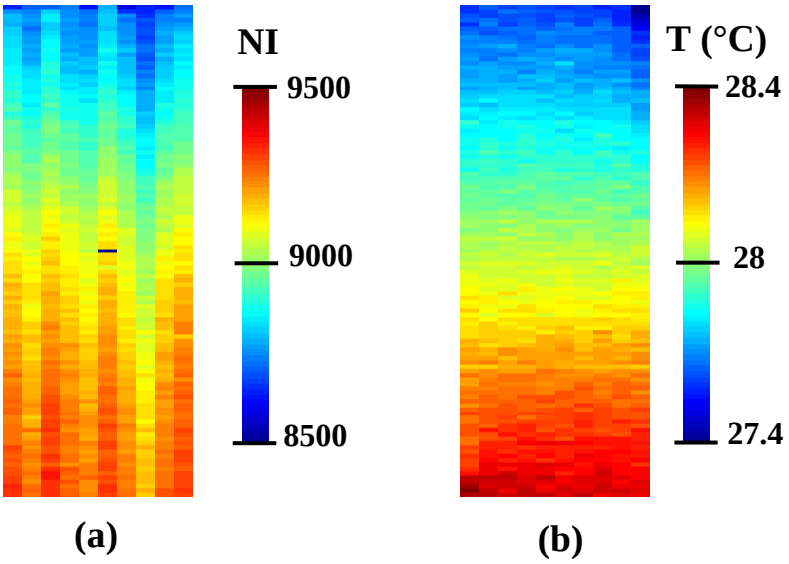


Fig.2.2.14 – *Image infrarouge brute (a) et après étalonnage (b)*

Dans ce qui suit nous allons étudier l'évolution de l'information, depuis son origine à laquelle nous voulons accéder, c'est-à-dire la température *T* à la surface de l'éprouvette (fig.2.2.13), jusqu'à son aboutissement, qui est son enregistrement numérique sous forme de niveaux informatiques *NI*. Cette étude nous permettra de proposer deux approches de conversion *NI-T*. L'exposé suivra naturellement le chemin de l'information schématisé sur la figure 2.2.13. Nous commencerons ainsi par décrire la relation qui unit le rayonnement de la source à sa température. Puis nous suivrons le parcours de ce rayonnement, depuis son émission jusqu'à sa captation et sa numérisation par la caméra infrarouge. Le lecteur souhaitant approfondir les points abordés au cours de cet exposé pourra se reporter à [Gaussorgues 89].

[5] Par commodité nous confondrons T et T_{mes}, ce qui correspond à une conversion *NI-T* idéale.

2.2.3.1.1 Rayonnement d'un corps noir – rayonnement de l'éprouvette.

Chaque photon rayonné possède une énergie $h\nu$, où ν est la fréquence du photon et h la constante de Planck[6]. L'ensemble du rayonnement émis par une source ponctuelle O (fig.2.2.13) est caractérisé par un flux énergétique Φ_e de photons dont l'intensité I est égale à la puissance en Watt $d\Phi_e$ par unité d'angle solide $d\Omega$ (stéradian) :

$$I = \frac{d\Phi_e}{d\Omega} \qquad L = \frac{d\Phi_e}{d\Omega dS\cos\theta} \qquad M = \frac{d\Phi_e}{dS} = \int_V L.\cos\beta.d\Omega \qquad (2.2.12)$$

De la même manière, la luminance L est l'intensité d'une source étendue S (*cf.* fig.2.2.13), dans une direction donnée (θ, φ) et par unité de surface apparente (dS cos θ), tandis que l'émittance M est la puissance émise par une source étendue S sur l'ensemble d'un hémisphère défini par un angle β (éq.2.2.12). La loi de Lambert $M = \pi.L$ relie l'émittance à la luminance dans le cas d'une source isotrope.

Tout corps S émet un flux Φ_e mais reçoit également un flux incident extérieur Φ_i qu'il peut transmettre Φ_t, absorber Φ_a ou réfléchir Φ_r (fig.2.2.15). La conservation de l'énergie incidente se traduit par l'équation 2.2.13, écrite en fonction des facteurs de transmission τ_S, d'absorption α_S et de réflexion ρ_S, tandis que la condition d'équilibre thermique du corps S est traduite par la relation 2.2.14.

$$\Phi_i = \Phi_t + \Phi_a + \Phi_r = \tau_S.\Phi_i + \alpha_S.\Phi_i + \rho_S.\Phi_i \qquad (2.2.13)$$

$$\Phi_a = \Phi_e \qquad (2.2.14)$$

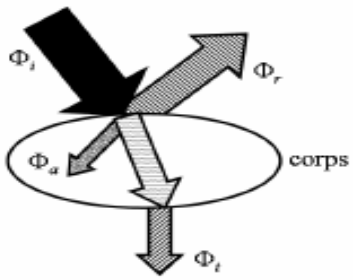


Fig.2.2.15 – *Bilan énergétique*

Un corps noir est un corps dont la totalité du rayonnement incident est absorbé, quelle que soit la longueur d'onde[7] $\lambda = c/\nu$. C'est le corps de référence, dont la luminance spectrale est décrite par la loi de Planck 2.2.15, illustrée sur la figure 2.2.16.

---

[6] $h \approx 6.62606896.10^{-34}\,J.s$

[7] $c = 299792458.m.s^{-1}$, vitesse de la lumière

$$L_{CN}(\lambda,T)=\frac{2hc^2}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1} \qquad (2.2.15)^8$$

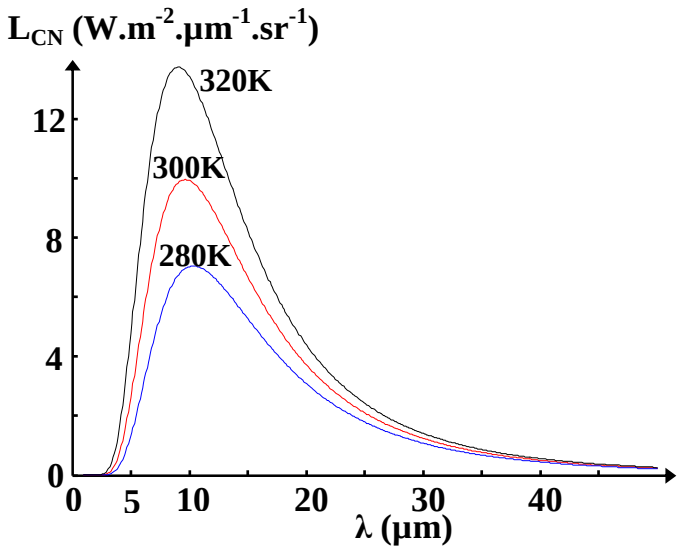


Fig.2.2.16 – *Luminance du corps noir suivant la loi de Planck*

L'intégration de la luminance du corps noir sur l'ensemble du spectre électromagnétique définit la luminance énergétique totale L_{CN} (éq.2.2.16). La loi de Lambert permet d'en déduire la loi de Stefan 2.2.17, où $\sigma \approx 5.67.10^8 W.m^{-2}K^{-4}$ est la constante de Stefan-Boltzmann.

$$L_{CN}=\frac{2}{15}\frac{\pi^4 k_B{}^4}{c^2h^3}T^4=\frac{\sigma}{\pi}T^4 \qquad (2.2.16)$$

$$M_{CN}=\sigma.T^4 \qquad (2.2.17)$$

Dans le cas d'un corps réel, la luminance est définie par rapport à la luminance du corps noir par l'intermédiaire de l'émissivité $\varepsilon(\lambda,T,\theta,\varphi)$.

$$\varepsilon(\lambda,T,\theta,\varphi)=\frac{L(\nu,T,\theta,\varphi)}{L_{CN}(\nu,T)} \qquad (2.2.18)$$

C'est une fonction de la longueur d'onde, de la température et de la direction (θ, φ) du flux émis. On supposera par la suite les échantillons assimilables à des corps gris, c'est-à-dire dont l'émissivité est constante et indépendante de la longueur d'onde.

---

[8] $k_B \approx 1.3806.10^{-23} J.K^{-1}$, constante de Boltzmann

2.2.3.1.2 Propagation – transmission – capteur.

Ce rayonnement émis se propage jusqu'à la caméra en suivant le chemin décrit par la figure 2.2.13. Il commence par se propager dans l'atmosphère, dont il subit le facteur de transmission $\tau_{atm}(\lambda)$, représenté sur la figure 2.2.17 pour une distance caméra-scène filmée de 30 m. On remarque de profonds pics d'absorption liés à la présence des molécules de dioxyde de carbone et d'eau dans l'atmosphère. Deux de ces pics se trouvent dans le domaine noté SW (Short Waves) sur la figure 2.2.17, et qui correspond à la plage de fonctionnement de la caméra (qui est, rappelons le, 3-5µm). Ainsi le facteur de transmission de l'atmosphère diminue le flux reçu par la caméra, et cela même pour une distance caméra-scène filmée de quelques dizaines de centimètres. Ce facteur de transmission sera pris en compte lors de l'étalonnage de la chaîne de mesure, effectué dans les mêmes conditions (entre autres : distance objet-caméra) que les essais réels.

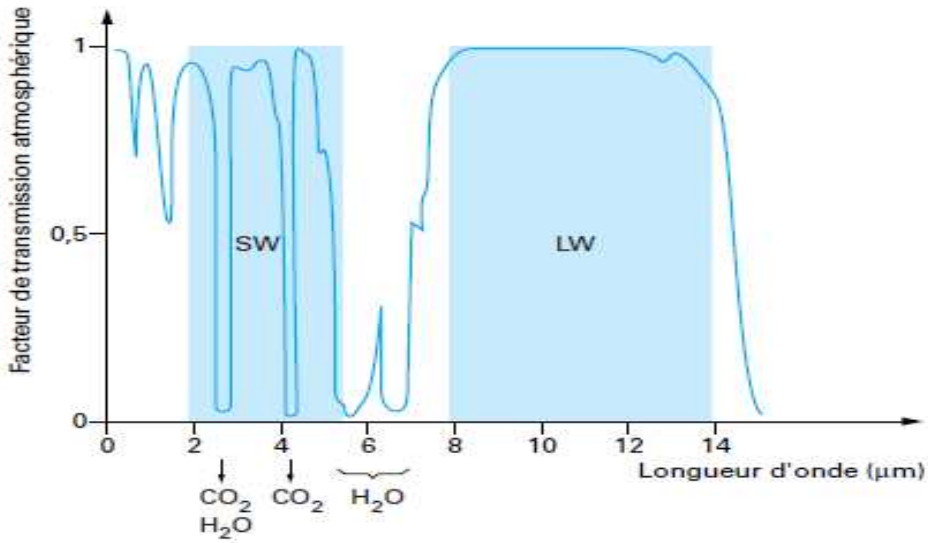


Fig.2.2.17 – *Facteur de transmission de l'atmosphère (30 m) [Pajani 01]*

Le rayonnement parvient ensuite à l'optique de la caméra (fig.2.2.13), dont le facteur de transmission τ_{opt} est fonction du matériau qui constitue l'optique [Gaussorgues 89]. Le rayonnement arrive ensuite sur le capteur (fig.2.2.13) où l'énergie des photons est absorbée selon la réponse spectrale τ_{InSb} du capteur avant d'être numérisée sous forme de niveau informatique.

2.2.3.1.3 Capteurs et numérisation.

Pour résumer, le schéma de la figure 2.2.18 reprend le cheminement de l'information dans sa globalité sous la forme de flèches pleines, depuis son émission sous forme de

rayonnement par la source, suivie de l'ensemble de ses altérations, et jusqu'à sa numérisation sous forme de niveau informatique (*NI*).

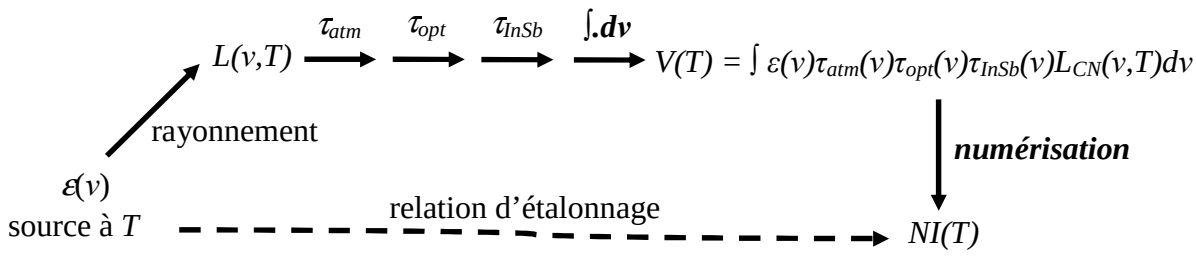


***Fig.2.2.18** – Schéma récapitulatif*

Une première approche de conversion *NI-T* serait de caractériser chacun des éléments de cette chaîne ε, τ_{atm}, τ_{opt}, τ_{InSb}, pour, à terme, connaître la relation *NI*(*T*). L'inconvénient de cette méthode est la dépendance des facteurs d'atténuation à l'environnement, en particulier la dépendance de ε et de τ_{atm} à la température de l'atmosphère T_{atm} et de τ_{opt} et de τ_{InSb} à la température interne à la caméra T_{cam}, définies sur la figure 2.2.13. Pour cette raison, une seconde approche a été proposée. Celle-ci consiste à réaliser un étalonnage global de la toute la chaîne de mesure in-situ à partir d'un corps de référence. Bien entendu l'application de la conversion sera limitée à la même situation expérimentale qui a permis l'étalonnage. C'est cette méthode que nous allons maintenant développer.

2.2.3.2 Etalonnage

La méthode d'étalonnage proposée [Honorat 05] consiste à observer un corps de référence dont la répartition de température est uniforme et connue. La correspondance entre les niveaux informatiques, mesurés pour chaque pixel de l'image, et la température du corps de référence, connue, est directe. Pour des conditions d'essai (temps d'intégration, positionnement…) et une émissivité du corps similaire à celles de l'étalonnage, la conversion *NI-T* peut être utilisée sur le corps de l'essai.

Le corps de référence choisi est un corps noir étendu d'émissivité ε_{CNE} = 0.98, produit par la société CI Systems (réf. SR-80-4A). Sa température de consigne T_{CNE} est imposée pour toute sa surface avec une précision de 0.008°C et une uniformité de ±0.02°C [CI systems]. La procédure d'étalonnage consiste à filmer le corps noir pour une température imposée T_{CNE}. Une série d'images du corps noir à une température donnée est acquise afin de limiter l'amplitude du bruit temporel par filtrage temporel. Elle fournit la réponse $NI(\vec{X})$, de chaque pixel $\vec{X}$ de l'image, correspondant à la température T_{CNE}. En réitérant cette opération à

intervalles réguliers sur la plage de température d'intérêt [T_{min}, T_{max}] on obtient, pour chaque pixel, la courbe $NI(T_{CNE} \in [T_{\min}, T_{\max}])$. La figure 2.2.19 reproduit l'une de ces courbes. On se propose d'approximer au sens des moindres carrés la réponse de chaque pixel par un polynôme de degré 5 [Honorat 06]. On crée alors un fichier étalonnage contenant les 6 coefficients du polynôme modèle associé à chaque pixel. La courbe modèle correspondante est superposée sur la figure 2.2.19.

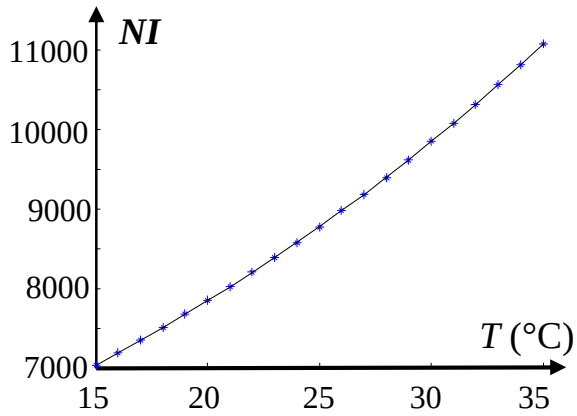


Fig.2.2.19 – *Courbe de la réponse discrète d'un pixel NI(T_{CNE}) et courbe modèle*

Certains pixels ont une réponse anormale : saturation, réponse constante ou trop instable. Ces pixels défectueux (« bad pixels ») sont éliminés en deux étapes. On écarte les pixels trop éloignés de la température du corps noirs T_{CNE}, avec un seuil de tolérance δ_{Tseuil}. Cette première étape permet de s'affranchir des pixels « morts » ou saturés. Puis cette présélection est affinée en éliminant les pixels dont la réponse s'éloigne de la moyenne $\overline{T}_{etal}$, calculée sur l'ensemble des pixels conservés lors de la première étape, avec un seuil de tolérance de δ_T [Honorat 05]. Un des avantages de cette méthode est qu'elle permet d'associer la précision de la mesure à la grandeur δ_T.

2.2.3.3 Précautions

On l'a vu, les modalités d'utilisation de l'étalonnage sont des conditions d'essai identiques et une émissivité du corps au plus proche de celle du corps noir étendu. Or il a été observé [Honorat 06] qu'en dépit du refroidissement interne (cycle de Stirling) de la caméra, sensé maintenir la température des capteurs aux alentours de 79K, la réponse des capteurs ne se stabilise qu'après 2h de fonctionnement. Par précaution, la caméra n'est utilisée qu'après 4h de préchauffage afin d'assurer la reproductibilité de l'étalonnage. En ce qui concerne l'émissivité, elle varie d'un matériau à l'autre [Gaussorgues 89], et rien n'assure sa proximité avec l'émissivité du corps noir étendu ε_{CNE}, ni son homogénéité à la surface de l'éprouvette.

Un revêtement de peinture noire mate permet d'homogénéiser l'émissivité aux alentours de 0.96, très proche de ε_{CNE}. Des tests de validation de ce protocole sont présentés dans [Berthel 07].

L'applicabilité de l'étalonnage étant établie, on cherche à améliorer le rapport signal sur bruit. Le bruit, que nous caractériserons à la section 2.2.6, a plusieurs origines : les défauts du capteur, le processus de numérisation, la présence d'un halo sur les images [Honorat 06], ainsi que des sources de rayonnement extérieur qui parasitent le signal. Seul ce dernier point n'est pas matériel et peut être amélioré par le protocole d'essai. Les principales sources de rayonnement parasite peuvent se réfléchir sur les mors et la traverse de la machine de traction, lisses et brillants. Afin d'en limiter le facteur de réflexion ils sont recouverts de papier de laboratoire. De plus, l'impact des autres sources de rayonnement de même que l'effet de la transmission atmosphérique sont limités en plaçant la caméra au plus près de l'échantillon.

2.2.4 Equation de la chaleur

La mesure de la température rend possible l'estimation des sources de chaleur développées au cours de l'essai, par l'intermédiaire de l'équation de la chaleur. Cependant, l'équation présentée au paragraphe 2.1.4 doit être adaptée à la situation physique de l'essai. De plus, le champ de température auquel nous avons accès est uniquement surfacique. Or nous verrons que l'équation de la chaleur nécessite une dérivation volumique de cette température. Par conséquent, nous développerons des hypothèses rendant possibles l'exploitation de nos données.

Une seconde problématique qui surgira de notre développement est la nécessité de coupler les informations cinématiques locales à la température pour estimer précisément les sources de chaleur. Pour répondre à cette seconde question, une méthodologie spécifique a été développée au sein de notre laboratoire. Elle sera exposée à la prochaine section. Enfin, la section 2.2.6 traitera de l'aspect numérique du calcul. Nous verrons qu'il nécessite un filtrage en préalable à une dérivation des données.

2.2.4.1 Ecriture de l'équation

L'équation de la chaleur locale (éq.2.1.14) s'écrit de la manière suivante :

$$\rho C \frac{dT}{dt} + div\vec{q} - r = p_{ch} \tag{2.2.19}$$

où ρ est la masse volumique (kg.m^{-3}), C la chaleur spécifique (J.kg^{-1}.K^{-1}), $\vec{q}$ le flux de chaleur (W.m^{-2}), r la source volumique associée au rayonnement extérieur (W.m^{-3}) et p_{ch} les sources de chaleur (W.m^{-3}). Le terme de gauche de l'équation décrit l'évolution temps et en espace de la température du matériau, le terme de droite regroupe les sources de chaleur présentes dans le matériau.

2.2.4.2 Evolution de la température

Dans cette première sous-section nous présentons la démarche permettant d'évaluer le terme de gauche de l'équation de la chaleur. Nous commencerons par présenter la modélisation des transferts thermiques [Taine 03], puis les hypothèses nécessaires à l'estimation du terme source à partir des champs de température surfaciques.

2.2.4.2.1 Modélisation des transferts thermiques

La figure 2.2.20 représente l'éprouvette de longueur *l*, de largeur *L* et d'épaisseur *e*. La prolongation de l'éprouvette à ses extrémités, située dans les mors de la machine de traction, n'est pas représentée. Les transferts thermiques dans l'éprouvette sont décrits par le terme de gauche de l'équation 2.2.20 tandis qu'à la frontière les transferts thermiques seront différents. Dans cette sous-section nous allons modéliser ces transferts, tour à tour à l'intérieur et à la frontière de l'éprouvette.

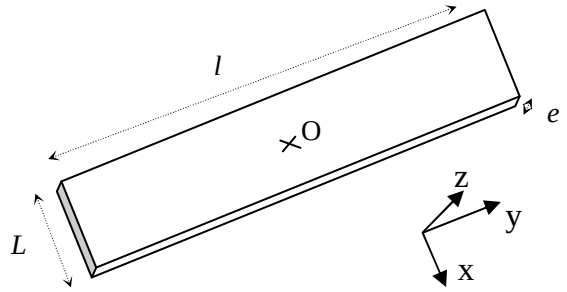


Fig.2.2.20 *– Schéma de l'éprouvette*

De manière générale, les paramètres matériaux (ρ, C…) sont supposés invariants aux cours de l'essai même si la transformation de phase induit une modification microstructurale.

Le premier terme de l'équation de la chaleur 2.2.19 décrit l'absorption/désorption de la chaleur par le matériau. Elle comprend une dérivée particulaire, explicitée par l'équation 2.2.20, qui fait apparaître un terme convectif $\vec{v}.\overrightarrow{grad}T$, $\vec{v}$ étant la vitesse du point matériel. Ce terme sera calculé par l'intermédiaire de la correspondance des images visibles-infrarouges établie à la section 2.2.5.

$$\dot{T} = \vec{v}.\overrightarrow{grad}T + \frac{\partial T}{\partial t} \tag{2.2.20}$$

Le second élément de l'équation 2.2.19 traduit la diffusion de la chaleur dans le matériau. Classiquement elle est décrite par l'équation de Fourier 2.2.21. Rappelons que cette relation n'est pas universelle : dans certains fluides, et dans le cas de sollicitations hautes fréquences, la thermodynamique irréversible étendue est nécessaire [Lagrée 09], [Jou 99]. La loi de Fourier reste néanmoins justifiée dans de nombreuses situations expérimentales, comme celles dans lesquelles nous nous placerons (chargement thermomécanique quasi-statique). Nous supposerons également le tenseur de conduction $\overline{\overline{k}}$ (W.m^{-2}.K^{-1}) constant et isotrope, ce qui nous permet de réécrire le vecteur courant de chaleur :

$$\vec{q} = -\overline{\overline{k}}.\overrightarrow{grad}T \tag{2.2.21}$$

D'où l'expression du terme de diffusion :

$$div\vec{q} = -k.div\left(\overrightarrow{grad}T\right) = -k\Delta T \tag{2.2.22}$$

Le dernier élément, *r*, décrit les sources volumiques extérieures supposées constantes. Ce terme peut alors être estimé avant la sollicitation à partir du champ de température initial T_0. En effet, l'équation de la chaleur est alors réduite à :

$$-k\Delta T_0 = r \tag{2.2.23}$$

En prenant en compte l'ensemble de ces hypothèses, l'équation de la chaleur 2.2.19 se réécrit, en posant la variation de température $\theta = T - T_0$:

$$\boxed{\rho C\dot{\theta} - k\Delta\theta = p_{ch}} \tag{2.2.24}$$

Nous allons maintenant décrire les transferts thermiques prenant place à la frontière de l'échantillon. Soit T_{amb} la température ambiante, supposée uniforme, dans laquelle baigne l'éprouvette. L'évolution de cette température est estimée par la température de surface d'une éprouvette témoin identique à celle sollicitée et qui est située à proximité de cette dernière. Les transferts avec le bain thermique sont modélisés par des lois linéaires[9], raisonnables pour le proche équilibre, de coefficients h_i (W.m^{-2}K^{-1}). L'ensemble de ces transferts est résumé par les conditions aux limites 2.2.25 à 27. Les coefficients h_i seront plus faibles pour les faces latérales (h_1), où la convection avec l'air prédomine, que pour les extrémités (h_2), qui privilégient la conduction à la convection, du fait du contact avec la partie de l'éprouvette enserrée dans les mors.

$$k\frac{dT}{dy}\left(\pm L/2, y, z, t\right) = \mp h_1\left(T\left(\pm L/2, y,, z, t\right) - T_{amb}\right) \tag{2.2.25}$$

$$k\frac{dT}{dy}\left(x, \pm l/2, z, t\right) = \mp h_2\left(T\left(x, \pm l/2, z, t\right) - T_{amb}\right) \tag{2.2.26}$$

$$k\frac{dT}{dz}\left(x, y, \pm e/2, t\right) = \mp h_1\left(T\left(x, y, \pm e/2, t\right) - T_{amb}\right) \tag{2.2.27}$$

2.2.4.2.2 Hypothèses liées au caractère surfacique de la mesure

Les champs de température T_{mes} estimés à la section 2.2.3, sont restreints à la surface de l'éprouvette. Nous allons remanier l'équation de la chaleur 2.2.24 pour faire apparaître cette grandeur. L'équation 2.2.24 moyennée dans l'épaisseur donne :

[9] Concentrant l'ensemble des phénomènes de transfert thermique : conduction, convection et rayonnement

$$\rho C\dot{\overline{\theta}} - k\left(\frac{\partial^2\overline{\theta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\overline{\theta}}{\partial y^2}\right) - \frac{k}{e}\int_{-e/2}^{e/2}\frac{\partial^2\overline{\theta}}{\partial z^2}\mathrm{dz} = \overline{p}_{ch} \tag{2.2.28}$$

où $\overline{\theta}(x,y,t) = \frac{1}{e}\int_{-e/2}^{e/2}\theta(x,y,z,t)\mathrm{dz}$ et $\overline{p}_{ch}(x,y,t) = \frac{1}{e}\int_{-e/2}^{e/2}p_{ch}(x,y,z,t)\mathrm{dz}$ sont respectivement la variation de température et la source de chaleur, moyennées dans l'épaisseur. Le dernier terme du membre de gauche de l'équation (2.2.28) peut s'écrire :

$$\frac{k}{e}\int_{-e/2}^{e/2}\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2}dz = \frac{k}{e}\left[\frac{\partial\theta}{\partial z}\right]_{-e/2}^{e/2} \overset{CL}{=} -\frac{2.h_1}{e}\theta(x,y,e/2,t) \tag{2.2.29}$$

Ce terme correspond à la puissance volumique échangée par la combinaison des phénomènes de convection et de rayonnement à travers faces avant et arrière de l'échantillon.

Dans la mesure où la diffusion de la chaleur dans les métaux est importante, et que l'épaisseur de l'éprouvette est faible, la température mesurée à la surface de l'éprouvette est une bonne estimation de la température moyennée dans l'épaisseur :

$$\theta_{mes}(x,y,t) = \theta(x,y,e/2,t) \approx \overline{\theta}(x,y,t) \tag{2.2.30}$$

Des tests numériques étayant cette hypothèse ont été réalisés sur des aciers par [Louche 99] et [Berthel 07]. La proximité des paramètres matériaux utilisés[10] avec ceux du matériau étudié par la suite (tab.2.3.2) justifie l'approximation.

Pour conclure, l'équation de la chaleur 2.2.28 se réécrit :

$$\boxed{\rho C\left(\dot{\overline{\theta}} - d_{th}\left(\frac{\partial^2\overline{\theta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\overline{\theta}}{\partial y^2}\right) + \frac{\overline{\theta}}{\tau_{th}^{2D}}\right) = \overline{p}_{ch}} \tag{2.2.31}$$

Avec $d_{th} = k/\rho C$ la diffusivité thermique et $\tau_{th}^{2D} = \rho Ce/2h_1$ la constante de temps caractéristique des fuites thermiques par les faces avant et arrière.

De manière similaire, on peut écrire une équation de la chaleur unidimensionnelle en fonction des grandeurs moyennées sur chaque section droite, notées $\widehat{\overline{\bullet}}$, en utilisant les conditions aux limites 2.2.25 :

$$\rho C\left(\dot{\widehat{\overline{\theta}}} - \frac{k}{\rho C}\frac{\partial^2\widehat{\overline{\theta}}}{\partial y^2} + \frac{(e+L)}{eL}\frac{2h_1}{\rho C}\widehat{\overline{\theta}}\right) = \widehat{\overline{p}}_{ch} \tag{2.2.32}$$

[10] $\rho = 7800.kg.m^{-3}; C = 460.J.kg^{-1}.K^{-1}; k = 60.W.m^{-1}.K^{-1}; h_1 = 10.W.m^{-2}.K^{-1}; h_2 = 2100.W.m^{-2}.K^{-1}$

De la même manière que pour l'équation 2.2.31, on peut définir une constante de temps caractéristique $\tau_{th}^{1D} = \tau_{th}^{2D} \; L/(e + L)$. Enfin, en utilisant les dernières conditions aux limites 2.2.26 on peut construire un temps caractéristique $\tau_{th}^{0D} = \frac{\rho C}{2} \frac{e.l.L}{(h_1(e+L).l + h_2.e.L)}$.

2.2.4.3 Sources de chaleur

Le terme de gauche de l'équation 2.2.31 (*resp.*2.2.32) permet de calculer, en tout point matériel de l'éprouvette, l'évolution de la température, moyennée sur l'épaisseur (*resp.* sur l'épaisseur et la largeur) à partir des cartes de température, pour peu que l'on connaisse la géométrie de l'éprouvette (e, l), les constantes matériaux (ρ, C, k, h_1) que l'on puisse dériver le champ de température (*cf.* section 2.2.6). Ce terme est égal aux sources de chaleur $\overline{p}_{ch}$ qui sont directement reliées au comportement du matériau. Le dispositif expérimental permet donc d'avoir des informations sur ces sources de chaleur, donc sur le comportement et finalement sur les hypothèses de construction d'un modèle de comportement

2.2.5 Ecriture d'un bilan d'énergie local

Lors de la description de l'équation de la chaleur, l'équation 2.2.20 a fait apparaître un terme convectif que le seul champ de température ne permet pas de calculer. Ce terme convectif apparaît du fait du mouvement des points matériels. En effet, la caméra IR filme l'éprouvette en train de se déformer (configuration d'Euler). En réexprimant le champ de température dans la configuration initiale, on suit les points matériels, et le terme convectif disparaît. Ce changement de configuration rend nécessaire la connaissance du déplacement du point matériel au cours de la sollicitation. La méthode d'intercorrélation d'image permet de connaître ce déplacement mais le repère dans lequel il est exprimé, et le temps où il est calculé, ne correspondent pas à ceux de l'image IR. Il reste donc à construire une base de temps et un repère communs aux images visibles et infrarouges. Outre le problème de la précision du calcul des sources de chaleur, cette méthode va permettre de comparer localement les grandeurs issues des deux dispositifs d'imagerie.

2.2.5.1 Synchronisation des signaux

La correspondance entre les bases de temps est rendue possible par le dispositif électronique SynchroCAM, développé au LMGC par Y. El Kaïm [Chrysochoos 09]. La figure 2.2.21, extraite du schéma du dispositif expérimental (fig.2.2.2), va permettre d'expliquer son fonctionnement.

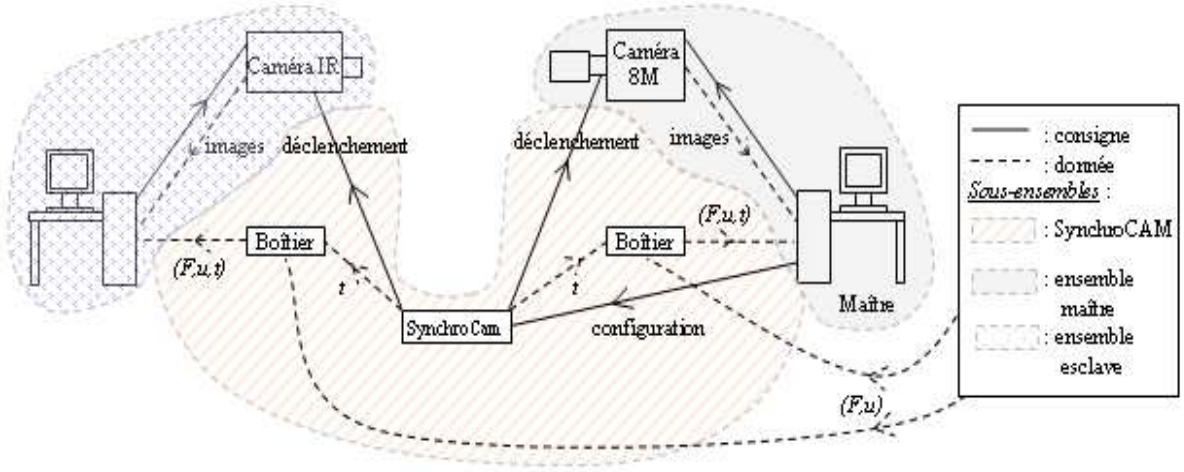


***Fig.2.2.21** – Dispositif SynchroCAM*

Définissons d'abord l'ensemble maître, à droite sur la figure, auquel appartient la caméra 8M et son ordinateur de contrôle, qui s'oppose à l'ensemble esclave, à gauche, contenant entre autre la caméra IR. Le rôle de l'ordinateur maître est de configurer le boitier

SynchroCAM pour que celui-ci déclenche l'acquisition de la caméra maîtresse à une fréquence donnée. De manière simultanée l'acquisition de la caméra esclave suit un multiple de cette fréquence. Le temps d'acquisition t (précision de 50 µs) est transmis par le boitier SynchroCAM aux ordinateurs des deux caméras. Ils l'enregistrent dans un fichier regroupant, outre ce temps, les voies annexes (F, u) et l'image acquise.

2.2.5.2 Recalage spatial

Pour connaître la correspondre entre le repère des images visibles et le repère des images infrarouges, on filme une mire. L'image de cette mire par les deux caméras est représentée sur la figure 2.2.22. Elle possède des points de repère de coordonnées (x_{IR}, y_{IR}) sur l'image IR et de coordonnées (x_{CCD}, y_{CCD}) sur l'image visible. La transformation linéaire reliant les deux systèmes de coordonnées se décompose en une translation $\vec{t}$, une rotation et une dilatation associée à la différence de grandissement entre les deux caméras. On a ainsi :

$$\vec{X}_{IR} = A.\vec{X}_{CCD} + \vec{t} \qquad (2.2.33)$$

avec A la matrice regroupant les termes de rotation et de dilatation associées à la différence de grandissement entre les deux caméras.

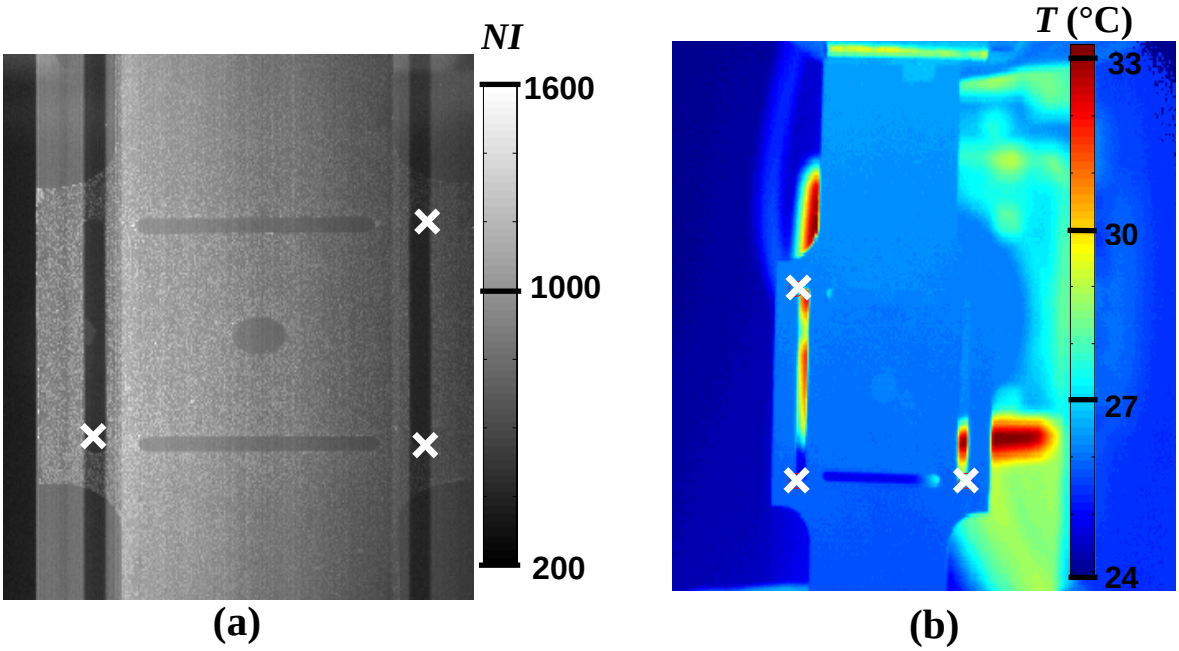


***Fig.2.2.22** – Mire pour la caméra (a) visible et (b) infrarouge*

Les paramètres A et $\vec{t}$ sont estimés par une méthode des moindres carrés comparant les positions de trois points de repères entre l'image infrarouge et visible.

2.2.6 Estimation des grandeurs thermomécaniques

Le schéma 2.2.23 reprend et résume le traitement des images réalisé jusqu'à présent. C'est la partie du schéma qui est encadrée par des pointillés. Les notations '***S.***' font références aux sections où l'étape a été développée. Par exemple '***S.2.2.2***' fait référence à la section 2.2.2. Il reste à calculer la partie droite du schéma 2.2.23. Le premier bloc consiste en une opération de différentiation de signaux d'entrée S_E, qui sont les champs de déplacement $\vec{u}$ et les champs de température T. Or ces signaux sont bruités, et nous interdisent de réaliser une simple différentiation par différences finies. Il est ainsi nécessaire de filtrer les données avant leur dérivation. Enfin, la partie droite du schéma 2.2.23 indique l'estimation du tenseur des contraintes $\overline{\overline{\sigma}}$, et par suite de la puissance des efforts intérieurs w_{int}. Nous verrons la méthode adoptée à cet effet.

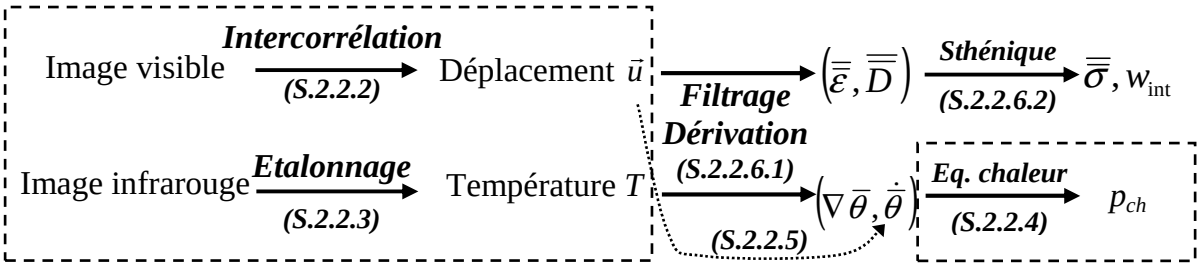


Fig.2.2.23 *– Traitement des données cinématiques et thermiques et obtention des champs sthéniques et énergétiques*

2.2.6.1 Méthode de filtrage et applications

2.2.6.1.1 Méthodes de filtrage/lissage

Le filtrage consiste à appliquer un opérateur, le filtre, au signal d'entrée S_E afin d'en extraire les éléments intéressants pour l'utilisateur. Par exemple, pour atténuer le bruit, on peut utiliser un filtre passe-bas [Louche 99], la variation du processus étant basse fréquence. Dans ce cas, un prolongement périodique est souvent nécessaire [Chrysochoos 98] pour éviter les effets de bords (phénomène de Gibbs). Cette approche a été ici abandonnée au profit d'une méthode de régression pour des raisons de coût et de temps de calcul.

La régression statistique consiste à approcher le signal par une fonction de régression paramétrique $f\left(\alpha, \theta^j\right)$, où θ^j sont les paramètres de la fonction.

L'estimation $\hat{\theta}^j$ des paramètres inconnus[11] est réalisée par minimisation de la distance $C(\theta)$ entre le modèle et les observations S_E. Un exemple de mesure de cette distance est la somme des carrés des différences (éq.2.2.34), la méthode est alors dite des moindres carrés.

$$\hat{\theta}^j = \min_{\{\theta^j\}_j} C(\theta) \qquad C(\theta) = \sum_i \left(S_{Ei} - f\left(\alpha_i, \theta^j\right)\right)^2 \tag{2.2.34}$$

La méthode adoptée dans la suite de ce travail [Wattrisse 01b], utilise une fonction de régression polynomiale. Les paramètres θ sont alors les coefficients du polynôme. Nous avons choisi de découpler les opérations de lissage spatial et temporel, et nous avons opté pour des polynômes de degré un en temps, et de degré deux en espace (nécessaire pour calculer le laplacien éq.2.2.3). Le pas de l'approximation correspond au nombre de valeurs utilisées pour l'approximation. Il est choisi constant. Le choix du pas doit être optimal pour permettre à la fonction de régression d'approcher au mieux le signal réel. Nous avons utilisé des pas d'approximation compris entre 1 et 7 mm en espace et entre 1.5 et 5 s en temps pour les données IR et cinématiques. Cette variabilité permet de saisir la plus ou moins grande variation du signal. Plus la variation est rapide, plus le pas doit être petit. Le tableau 2.2.1 distingue les choix des paramètres de filtrages dans les cas cinématique et thermique.

	degré	pas (s)	degré	pas (mm)
Filtrage énergétique	1	1.5 à 3	2	1 à 2
Filtrage cinématique	1	4 à 5	2	4.5 à 7

Tab.2.2.1 – *Paramètre des filtrages cinématique et énergétique*

2.2.6.1.2 Application énergétique

Les sources de chaleur sont estimées à partir de l'équation 2.2.31. Les opérateurs différentiels (dérivée particulaire et laplacien) doivent être appliqués sur les champs de température de surface qui sont discrets et bruités.

Les propriétés du bruit de mesure sont étudiées à l'aide du corps noir. Le bruit est associé à la différence entre la carte de température à un instant donné $T(t, X, Y)$ et la température moyenne calculée sur un grand nombre d'images $\overline{T}(X, Y)$. L'écart-type spatial du bruit est alors réduit à 0.053°C [Berthel 07]. L'étude de la densité spectrale de puissance fait apparaître certaines basses fréquences, qui caractérisent un bruit rose.

[11] Cet estimateur peut-être biaisé, non robuste…

La figure 2.2.24.a correspond à la différence $T(t,X,Y)-\overline{T}(X,Y)$. Sa distribution, reportée sur la figure 2.2.24.b, correspond à la distribution spatiale du bruit. C'est une distribution gaussienne[12], centrée, de moyenne 0.02°C et d'écart-type 0.024°C. La précision de mesure de dispositif est donc de 0.024°C, ce qui est du même ordre de grandeur que le Noise Equivalent Temperature Difference (NETD) inférieur à 25mK fournit par le constructeur. La densité spectrale de puissance de cette différence correspond à celle d'un bruit gaussien quasi centré (il est constant). Le bruit spatial est donc un bruit blanc quasi-gaussien, comme cela a déjà été observé par [Louche 99], [Berthel 07].

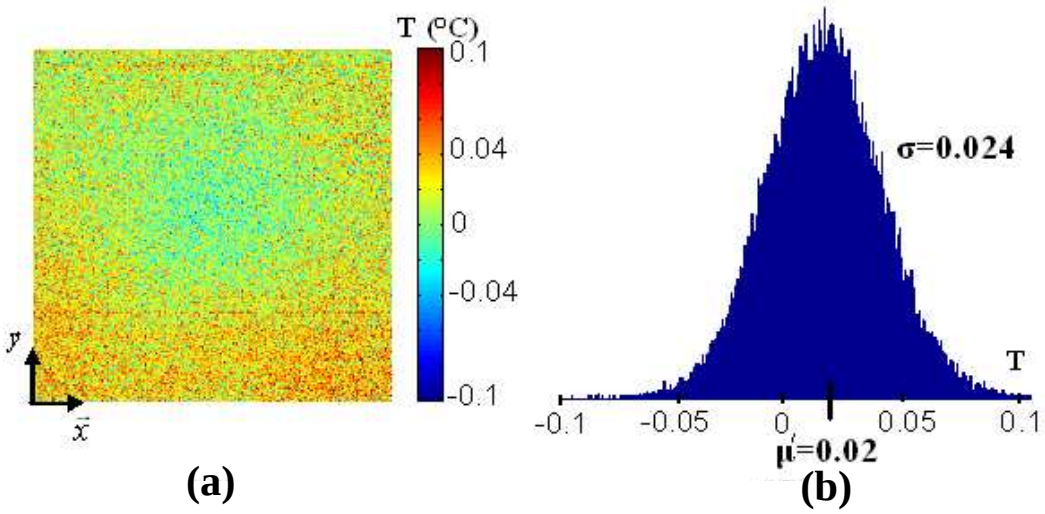


Fig.2.2.24 – *Bruit spatial des images IR en °C*

Pour vérifier la précision des sources de chaleur, on observe leur défaut de nullité lorsque la sollicitation est terminée. On caractérise ainsi le bruit présent sur les sources de chaleur. C'est un bruit gaussien, d'écart type compris entre 0.077 et 0.14 MW.m^{-3} dépendant à la fois du filtrage et de l'essai réalisé.

2.2.6.1.3 Application cinématique

Comme on l'a déjà signalé à la section 2.2.2., on distingue deux principaux régimes d'erreurs intrinsèques à la méthode de calcul des déplacements : le régime d'erreur de modèle et le régime d'erreur ultime [Bornert 08]. Le premier régime est gouverné par l'erreur d'adéquation entre transformation réelle ϕ_{M_0} et le modèle de transformation locale retenu φ_{M_0}. Bien entendu, cette erreur de modèle est d'autant plus faible que le modèle de

[12] pour affirmer que le bruit est gaussien, il faut réaliser un test d'hypothèse (statistique inférentielle) ou réaliser une étude plus discriminante [Rakotomalala 08], [Berthel 07] a opté pour le test de la droite de Henri.

transformation est riche et permet d'approcher au mieux la transformation réelle. Pour cette étude, nous avons utilisé des modèles de transformation bilinéaires. Le régime d'erreur « ultime » est quant à lui rencontré de manière asymptotique dès que le modèle de transformation représente « suffisamment bien » la transformation réelle. Il est associé aux différentes approximations numériques consenties dans le calcul des déplacements (intégration discrète, interpolation des niveaux de gris, …), ainsi qu'aux répercussions du bruit présent sur les images visibles. Le bruit a déjà été étudié à la section 2.2.2. On rappelle qu'il suit une distribution temporelle gaussienne (fig.2.2.7), d'écart-type 38.6 niveaux de gris.

S'ajoutent, à ces erreurs intrinsèques à la méthode, des sources d'erreurs extrinsèques qui proviennent principalement des défauts de positionnement de l'échantillon par rapport à la caméra, et des défauts de l'optique (*cf.* sous-section 2.2.2). Un positionnement précis de la caméra et la correction des distorsions limitent considérablement l'amplitude de cette erreur. Compte tenu de l'ensemble des outils visant à minimiser ces erreurs, la précision sur la mesure de déplacement a été estimée, dans nos conditions d'essai, à 0.02 pixel.

Ces erreurs de mesure sur les déplacements se répercutent naturellement sur l'estimation des déformations. De plus, les déformations sont calculées par dérivation du champ de déplacement filtré par une technique d'approximation polynomiale décrite précédemment. Cette opération permet de réduire l'erreur de mesure haute fréquence. Cependant des erreurs persistent et sont amplifiées. La précision atteinte sur la mesure de la déformation a été estimée autour de 5.10^{-4}, comme indiqué dans [Wattrisse 01a].

2.2.6.2 Equation de l'équilibre – grandeurs sthéniques

2.2.6.2.1 Estimation des contraintes

Dans le double but d'avoir la réponse mécanique du système, et de calculer la puissance des efforts intérieurs, il est nécessaire d'avoir accès aux contraintes développées au cours de l'essai. Cependant, cette contrainte n'est pas directement mesurable, et son estimation à partir, entre autres, des données cinématiques nécessite des hypothèses sur la forme de l'état de contrainte. Dans notre cas, nous supposerons l'état de contrainte plan (éprouvette fine). En supposant, de plus, la transformation isochore et quasi-statique, la composante de la contrainte de Cauchy selon l'axe de sollicitation s'écrit :

$$\sigma_{yy} = \frac{F}{S_0 e^{-\varepsilon_{yy}}} \tag{2.2.35}$$

Les autres composantes du tenseur des contraintes peuvent être construites selon la méthode décrite dans [Wattrisse 01b]. Cependant, les éprouvettes utilisées dans ce travail étant très élancées, seule la composante dans l'axe de sollicitation a donc été exploitée.

2.2.6.2.2 Puissance des efforts intérieurs et aire d'hystérésis mécanique

Cette estimation de la contrainte rend possible le calcul de la puissance des efforts intérieurs w_{int} mise en jeu lors de la sollicitation. Dans le cas d'un chargement uniaxial et pour un cycle mécanique, l'intégration de cette puissance correspond à l'aire d'hystérésis mécanique A_h.

$$A_h = \int_C w_{\text{int}} dt \tag{2.2.36}$$

2.3 Application à l'étude du CuAlBe

L'ensemble de la procédure expérimentale qui précède va être exploitée dans l'étude d'un monocristal d'alliage à mémoire de forme de type CuAlBe. Pour commencer, les géométries, ainsi que certaines caractéristiques thermophysiques et microstructurales des échantillons étudiés vont être présentées. On passera ensuite à la description des essais réalisés. Enfin leurs aspects cinématiques, thermiques et calorimétriques seront analysés à partir de la méthode expérimentale développée à la section précédente. L'analyse sera effectuée à deux échelles : celle de l'éprouvette (d'un volume utile d'une centaine de mm^3) qui est l'échelle accessible par des moyens de mesure conventionnels (extensomètres, thermocouples, …) et celle d'un petit voisinage autour de chaque point matériel, de l'ordre de quelques centaines de μm^3.

2.3.1 Matériau et géométrie

2.3.1.1 Caractéristiques macroscopiques

Le matériau étudié est un monocristal de CuAlBe, produit par la société Nimésis basée à Metz. La caractérisation a été réalisée sur 3 échantillons élancés, de longueur *l*, de largeur *L* et d'épaisseur e, reportées dans le tableau 2.3.1. La connaissance de ces géométries est nécessaire au calcul de la contrainte (éq.2.2.35), et servira à configurer les simulations par éléments finis du chapitre 3.

n°	*l*	*L*	*e*
1	54	5.3	0.91
4	60	5.21	0.96
5	58	5.5	1

Tab.2.3.1 – *Caractéristiques géométriques des éprouvettes en mm*

Pour évaluer les sources de chaleur de l'équation 2.2.31, il est également nécessaire de connaître les caractéristiques thermophysiques du matériau. Les tableaux 2.3.2 et 2.3.3 résument les caractéristiques fournies par le fabricant. Ont aussi été reportées certaines grandeurs qui ont été déterminées à partir d'essais effectués au Laboratoire. C'est le cas notamment du module d'Young, mesuré à partir de la réponse mécanique dans la phase austénitique, de la chaleur latente de transformation de phase et des températures caractéristiques A_s, A et A_f, obtenues par analyse DSC (differential scanning calorimetry).

	E (GPa)	ν	α (K^{-1})	ρ ($kg.m^{-3}$)	C ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	k ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	τ_{th} (s)
donnée fabriquant	18.7-20			7300	390-400		
littérature		0.3 [b]	$1.8.10^{-5}$ [c]		400[b]	75[a]	
valeur identifiée au laboratoire	17						40

a- [Choi 02] b- [Entemeyer 00] c- [Faciu 06]

Tab.2.3.2 – *Constantes thermophysiques (mécaniques et thermiques)*

	L_0 ($J.kg^{-1}$)	A_s (°C)	A (°C)	A_f (°C)	A_f - A_s (°C)	A_s - M_f (°C)
donnée fabriquant	7200				30	30-80
valeur identifiée au laboratoire	1710	-2.88	5.67	12.01	14.89	

Tab.2.3.3 – *Constantes thermophysiques (liées à la transformation)*

La figure 2.3.1 illustre les résultats de cette analyse DSC. Elle a été réalisée dans le sens de la transformation inverse, à une vitesse de balayage de 10 $K.min^{-1}$ sur un prélèvement de 74mg d'un échantillon de CuAlBe. Le pic est noté *A*, et les températures de transformations A_s et A_f sont construites par l'intersection du fond continu avec la tangente aux points d'inflexion précédent ou succédant le pic. La chaleur latente correspond à l'intégrale comprise entre la courbe et le fond continu [Collins 06]. Pour cet essai, elle est égale à 1.71 $J.g^{-1}$.

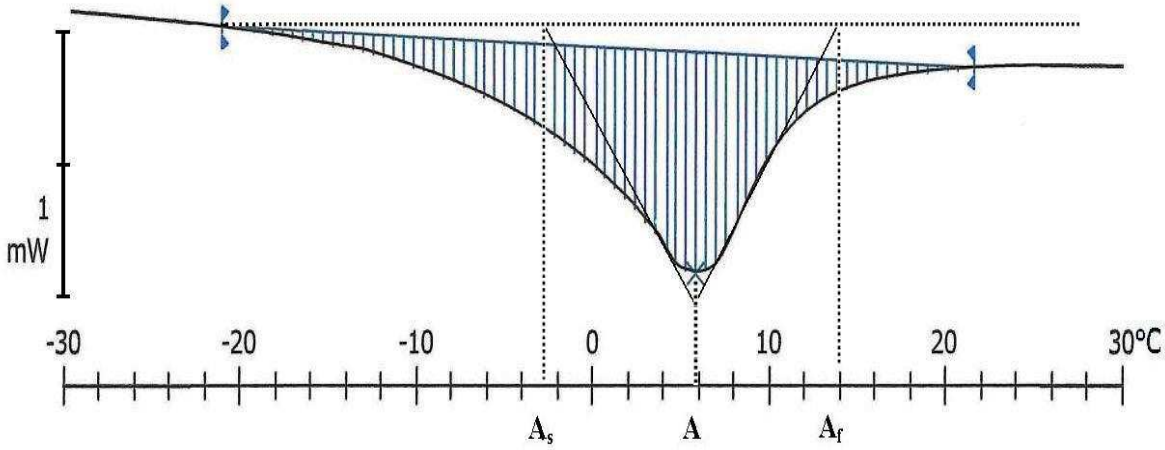


Fig.2.3.1 – *Courbe DSC*

On remarque une différence notable entre la chaleur latente donnée par le fabriquant et celle mesurée par DSC. Cette différence peut s'expliquer par le fait que le matériau ne soit

que partiellement dans l'état martensitique au départ de l'essai de DSC. En effet, pour réaliser cet essai nous ne sommes descendus qu'à -30°C. Or, si on se base sur la différence A_s - M_f proposé par le fabricant, la température de fin de transformation M_f serait plutôt comprise entre -33°C et -88°C. Par conséquent, la transformation n'a pas été achevée avant l'essai.

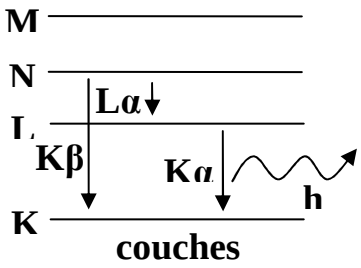
Le tableau 2.3.2 contient également la constante de temps de retour à l'équilibre thermique τ_{th}^{2D} introduite avec l'équation 1.1.37. Cette constante est associée à la géométrie d'échantillon retenue et a été estimée sur un essai de retour à l'équilibre thermique. L'éprouvette est placée entre les mors de la machine d'essai, dans les mêmes conditions d'environnement que lors des essais ultérieurs. L'éprouvette est chauffée par rayonnement de manière à imposer un déséquilibre thermique initial entre l'éprouvette et son environnement, de température T_{amb}. A partir de l'instant où le chauffage de l'éprouvette est arrêté, les sources de chaleur internes et le rayonnement extérieur sont nuls, et les variations de température sont gouvernées par l'équation de la chaleur (éq.1.1.37) dont le terme source est nul. Connaissant la masse volumique, la chaleur spécifique, la conductivité thermique, la température, sa dérivée temporelle et son laplacien, on détermine la constante de fuites τ_{th}^{2D} à l'aide de la méthode des moindres carrés. Dans nos conditions d'essais on trouve un temps de retour à l'équilibre thermique de 40 secondes.

2.3.1.2 Analyse microstructurale

a) Composition

La composition chimique de l'échantillon a été déterminée par microsonde Castaing (CAMECA SX100)[13]. Dans ce but un morceau des éprouvettes a été prélevé et poli[14]. Le canon à électrons de la microsonde bombarde l'échantillon, et excite les atomes qui le constituent. Lors de la désexcitation, les électrons retournent sur les couches électroniques de faible niveau et un photon porteur de la différence d'énergie hν est émis, comme l'illustre la figure 2.3.2.a. La notation de Siegbahn classifie les photons émis en fonction de la couche électronique finale (K, L, M, …) et de la différence avec le niveau de départ (α, β, …) : photons Kα, Kβ, Lα, …. L'ensemble de ces différences d'énergie est caractéristique de l'atome considéré. La figure 2.3.2.b reporte les valeurs correspondant aux énergies Kα et Kβ pour les atomes composant l'échantillon étudié.

[13] Microsonde Sud, service commun de l'Université Montpellier 2
[14] Service de lithopréparation du laboratoire de Géoscience de Montpellier



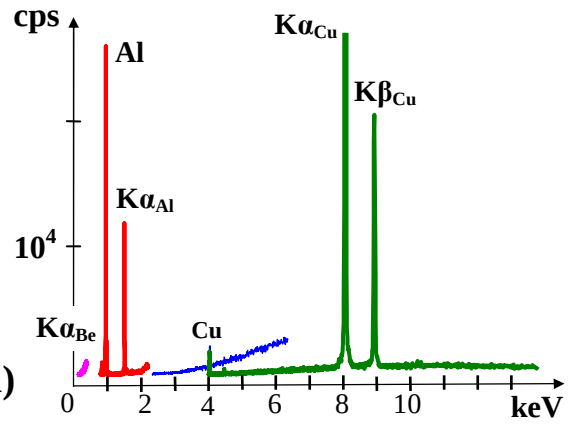
(a)

(keV)	Kα	Kβ
Cu	8,041	8,977
Al	1,486	1,55
Be	0,108	

(b)

Fig.2.3.2 – *(a) Désexcitation de l'atome et (b) énergie des photons émis (keV) [Handbook 03]*

Le rayonnement global de l'échantillon est ensuite diffracté sur quatre cristaux analyseurs de sensibilité différente permettant d'obtenir les quatre diagrammes de diffraction, exprimés en coups par seconde (cps), reportés sur la figure 2.3.3.a. Les raies d'émissions du cuivre et de l'aluminium y apparaissent clairement. Du fait de sa faible concentration (<1% massique) et de sa faible masse atomique, la raie du béryllium est noyée dans le fond continu, ne permettant pas sa mesure. Après étalonnage, on peut estimer le pourcentage massique (%wt.) des éléments constituant l'alliage. Plusieurs mesures ont été effectuées sur chaque échantillon. Les moyennes et les écarts types obtenus sont reportés dans la figure 2.3.3.b. Le pourcentage massique moyen de cuivre est de 88.4% et il vaut 12.5% pour l'aluminium. La présence d'incertitudes de mesure (justesse et dispersion) explique le fait que la somme de ces pourcentages soit légèrement supérieure à 100%. Il apparaît donc ici clairement que le pourcentage de béryllium ne pourra pas être déterminé de façon fiable par cette méthode. Au regard de ces incertitudes de mesure, la concentration massique de béryllium est estimée à moins de 1%.



(a)

% wt.	Cu		Al	
précision	0.43		0.15	
n°	μ	σ	μ	σ
2	88.4	0.1	12.5	0.06
5	88.4	0.2	12.4	0.1
3	88.5	0.2	12.4	0.1
4	88.1	0.1	12.6	0.05

(b)

Fig.2.3.3 – (a) *Diagramme de diffraction rayon X et (b) résultat de la spectrométrie*

b) Texture

Les échantillons testés sont monocristallins. Il est donc important de connaître l'orientation du monocristal par rapport aux axes de l'échantillon. Cette orientation a été déterminée par EBSD, qui permet dans le même temps de vérifier leur caractère monocristallin. La méthode de l'électron rétrodiffusé (EBSD) consiste à enregistrer la superposition des cônes de diffraction produits par un faisceau d'électrons incident de longueur d'onde λ au contact du réseau. Cette superposition forme les pseudo-lignes de Kikuchi illustrées sur la figure 2.3.4. L'angle de diffraction θ est relié à la distance interréticulaire d_{hkl} (séparant les plans cristallins) selon la loi de Bragg (équation 2.3.1). Par indexation des pseudo-lignes de Kikuchi, on accède à l'orientation des plans cristallins Pour faciliter cette indexation il est préférable de connaître *a priori* certains paramètres du réseau comme le type de maille et le paramètre de maille. Pour le CuAlBe, ces paramètres sont ceux donnés par [Moreau 95].

$$2d_{hkl}\sin\theta = n.\lambda \qquad \text{où } n \in N \qquad (2.3.1)$$

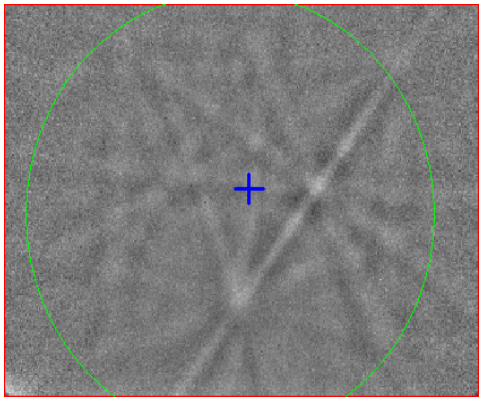


Fig.2.3.4 – *Pseudo-ligne de Kikuchi pour l'un des échantillons de CuAlBe*

Le tableau 2.3.4 donne les angles d'Euler (ψ,θ,φ) caractérisant l'orientation du cristal par rapport aux axes de l'échantillon. Plusieurs mesures (respectivement N=15 et N=10) ont été réalisées, sur les échantillons prélevés par les éprouvettes numérotées 2 et 4. Comme le montre la figure 2.3.5, les deux échantillons possèdent deux orientations assez différentes : l'échantillon 4 est orienté de manière relativement parallèle aux axes de l'éprouvette alors que l'échantillon 1 est plus incliné par rapport aux directions principales de l'échantillon. Les valeurs moyennes μ, et les écart-types σ sur les mesures d'angle sont reportées dans le tableau 2.3.4. Les faibles dispersions observées sur ces angles confirment le caractère monocristallin de ces échantillons.

n°	N	err.	angle	μ	σ
2	15	0.46	ψ	141	2.37
			θ	20.33	2.49
			φ	43.06	2.76
4	10	0.9	ψ	20.3	4.39
			θ	35.21	2.43
			φ	67.47	3.85

Tab.2.3.4 – *Résultats d'EBSD sur nos échantillons*

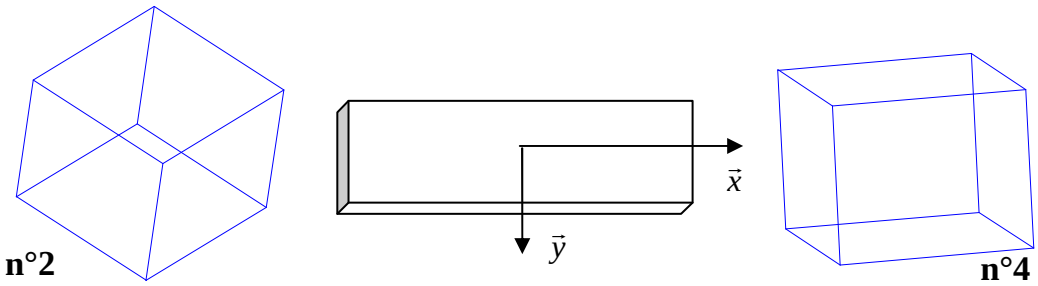


Fig.2.3.5 – Représentation de l'orientation des éprouvettes numéros 2 et 4

Ces résultats montrent une dispersion dans les orientations initiales des monocristaux qui risque de se traduire par des réponses thermomécaniques différentes d'un échantillon à l'autre.

2.3.2 Description des essais thermomécaniques réalisés

Dans le but d'explorer le comportement du matériau, des essais de traction variés ont été réalisés sur l'éprouvette numéro 4 dont la maille est sensiblement orientée dans l'axe de l'éprouvette, et sur les éprouvettes 1 et 5 dont l'orientation n'a pas été déterminée. Ces essais peuvent être classés en trois grandes catégories : cycles, maintiens et cycles internes. Les cycles réalisés à différentes amplitudes et à différentes vitesses, permettront d'étudier l'évolution de la réponse du matériau d'un cycle à l'autre, mais aussi l'influence de la vitesse de sollicitation. Les effets du temps sur le comportement seront aussi abordés au travers d'essais de fluage ou de relaxation. Enfin les cycles internes mettront en évidence une hystérésis mécanique.

Pour répertorier les essais, on adopte la notation suivante : (**I-J**), avec I le numéro de l'éprouvette et J le numéro de l'essai. Les cycles sont triangulaires. Ils se définissent par une vitesse de déplacement imposée v_{imp}, en mm.s^{-1}, et une liste des déplacements u_{max_i} en mm pour lesquels s'amorce la i^{ème} décharge. Chaque décharge s'arrête à 20 N afin de prévenir un passage en compression. La figure 2.3.6.a illustre cette définition sur un essai pour lequel v_{imp} = 0.02 mm.s^{-1} et (u_{max_1}, u_{max_2}) = (2 ,4). La seconde catégorie d'essais comporte un unique cycle défini par (v_{imp}, u_{max}). Au cours de ce cycle, un maintien de l'un des canaux de la machine de traction (force F ou déplacement u) intervient avant la décharge pendant t_{maint} secondes. L'essai (**5-6**), défini dans le tableau 2.3.5, illustre cette catégorie d'essai avec la figure 2.3.6.b. La dernière catégorie d'essai, réalisée à v_{imp} = 0.02 mm.s^{-1}, consiste en une charge s'arrêtant à u_{max_1} = 2 mm, suivie de 6 cycles d'amplitude 0.5 mm, puis d'une seconde charge allant jusqu'à u_{max_2} = 4 mm, suivie à nouveau de 6 cycles d'amplitude 0.5 mm précédant la décharge. Un seul essai appartient à cette catégorie, c'est l'essai (**4-4**) représenté sur la figure 2.3.6.c.

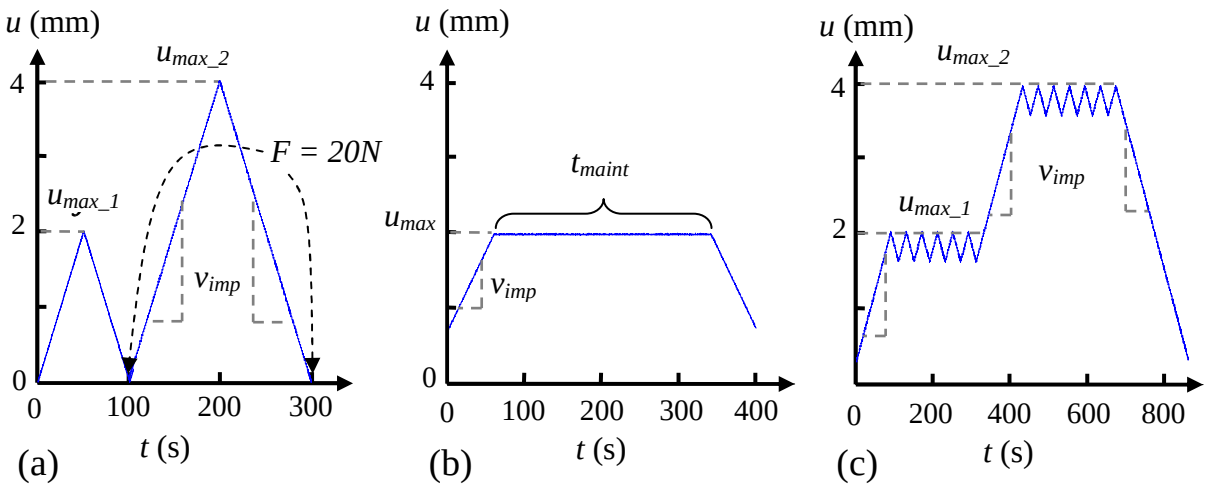


Fig.2.3.6 – *Différentes sollicitations imposées*

Le tableau suivant synthétise l'ensemble des essais réalisés :

nom de l'essai	v_{imp}	u_{max}	$t_{maintien}$	type d'essai
(**1-1**) / (**1-2**)	0,02	(4 - 4)		***(a)***
(**1-3**) / (**1-4**)	0,04	(4 - 4)		***(a)***
(**1-5**)	0,02	(0,18 - 0,35 - 0,5 - 0,65 - 1,26)		***(a)***
(**1-6**)	0,02	7		***(a)***
(**1-8**)	0,02	8		***(a)***
(**1-9**)	0,02	15,11		***(a)***
(**4-1**) / (**4-2**)	0,02	(0,18 - 0,35 - 0,5 - 0,65 - 1,26)		***(a)***
(**4-3**)	0,02	(1,3 - 3,3 - 5,3)		***(a)***
(**4-4**)	0,02	(2 - 4) cycle interne		***(c)***
(**4-5**)	0,2	5		***(a)***
(**4-6**)	0,002	5		***(a)***
(**4-7**)	0,02	1,6	F 100	***(b)***
(**4-8**)	0,02	3	F 100	***(b) spé.***
(**4-10**)	0,2	18		***(a)***
(**4-11**)	0,02	(0,18 - 0,35 - 0,5 - 0,65 - 1,26)		***(a)***
(**4-12**)	0,08	(4 - 4 - 4 - 4 - 4)		***(a)***
(**4-13**)	0,08	15		***(a)***
(**4-14**) / (**4-15**)	0,2	(4 - 4 - 4 - 4)		***(a) spé.***
(**5-1**)	0,02	1,3		***(a)***
(**5-2**) / (**5-3**) / (**5-4**)	0,02	(1,3 - 1,3)		***(a)***
(**5-5**)	0,02	1,3	F ~ 40	***(b)***
(**5-6**)	0,02	1,3	u 250	***(b)***

Tab.2.3.5 – *Essais réalisé*

L'indication ***spé.*** dans le tableau indique des conditions thermiques particulières au cours de l'essai. Ainsi, l'essai (**4-8**) présente un chargement thermique d'une minute, réalisé par une lampe halogène et déclenché au cours du maintien en force. En ce qui concerne les essais (**4-14**) et (**4-15**), un temps de latence de 80 s sépare chaque cycle permettant d'assurer le retour à l'équilibre thermique.

2.3.3 Analyse globale

On propose d'appeler analyse « globale » la vision traditionnelle qui identifie la réponse du matériau à celle de l'éprouvette. On lui opposera l'analyse « locale » qui permet de contrôler l'hétérogénéité du comportement. En pratique, l'analyse locale se base sur les mesures obtenues sur chaque pixel, alors que l'analyse globale s'organise autour d'opérations de moyenne des mesures sur une partie de l'éprouvette. Les dimensions de la « zone utile » retenue sont de l'ordre de 27 mm de hauteur, 4 mm de largeur, pour une épaisseur de 0.9 mm soit un volume utile de 97 mm^3. L'analyse expérimentale fournit la différence de température $\bar{\theta}$, la déformation de Hencky $\bar{\varepsilon}_{yy}$ et la contrainte de Cauchy $\bar{\sigma}_{yy}$, y représentant l'axe de traction. La notation $\bar{f}$ désigne ici la valeur globale (ici une simple moyenne surfacique) de la quantité f. Ces trois mesures permettent de construire la réponse « macroscopique » de l'échantillon, classiquement utilisée pour caractériser le comportement des matériaux à partir de mesures globales réalisées à sa frontière (effort et déplacement de traverse).

Dans ce premier paragraphe et par la suite, l'essai (**1-3**) servira d'essai de référence. Sa réponse « macroscopique », intégrée sur un volume de 26.9×3.8×0.91 mm^3 est tracée dans l'espace thermomécanique $\bar{\theta}-\bar{\varepsilon}_{yy}-\bar{\sigma}_{yy}$ sur la figure 2.3.8. Ses projections dans les différents plans $\bar{\theta}-\bar{\varepsilon}_{yy}$, $\bar{\theta}-\bar{\sigma}_{yy}$ et $\bar{\varepsilon}_{yy}-\bar{\sigma}_{yy}$ sont également représentées. Elles seront étudiées par la suite.

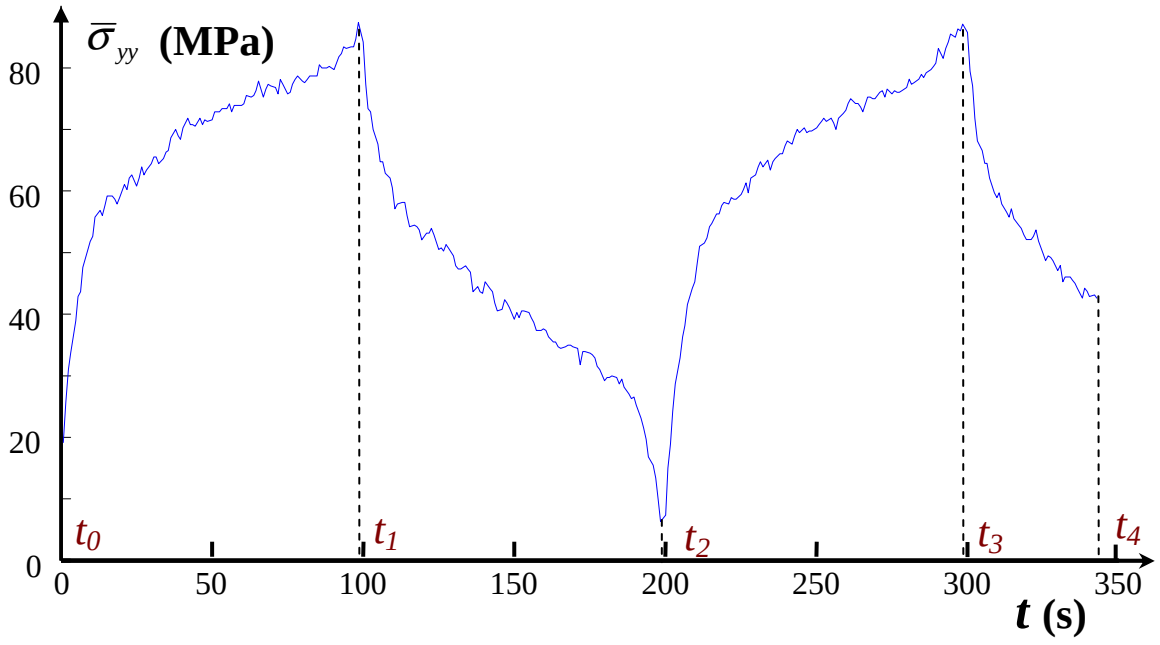


***Fig.2.3.7** – Contrainte $\bar{\sigma}_{yy}$ en fonction du temps*

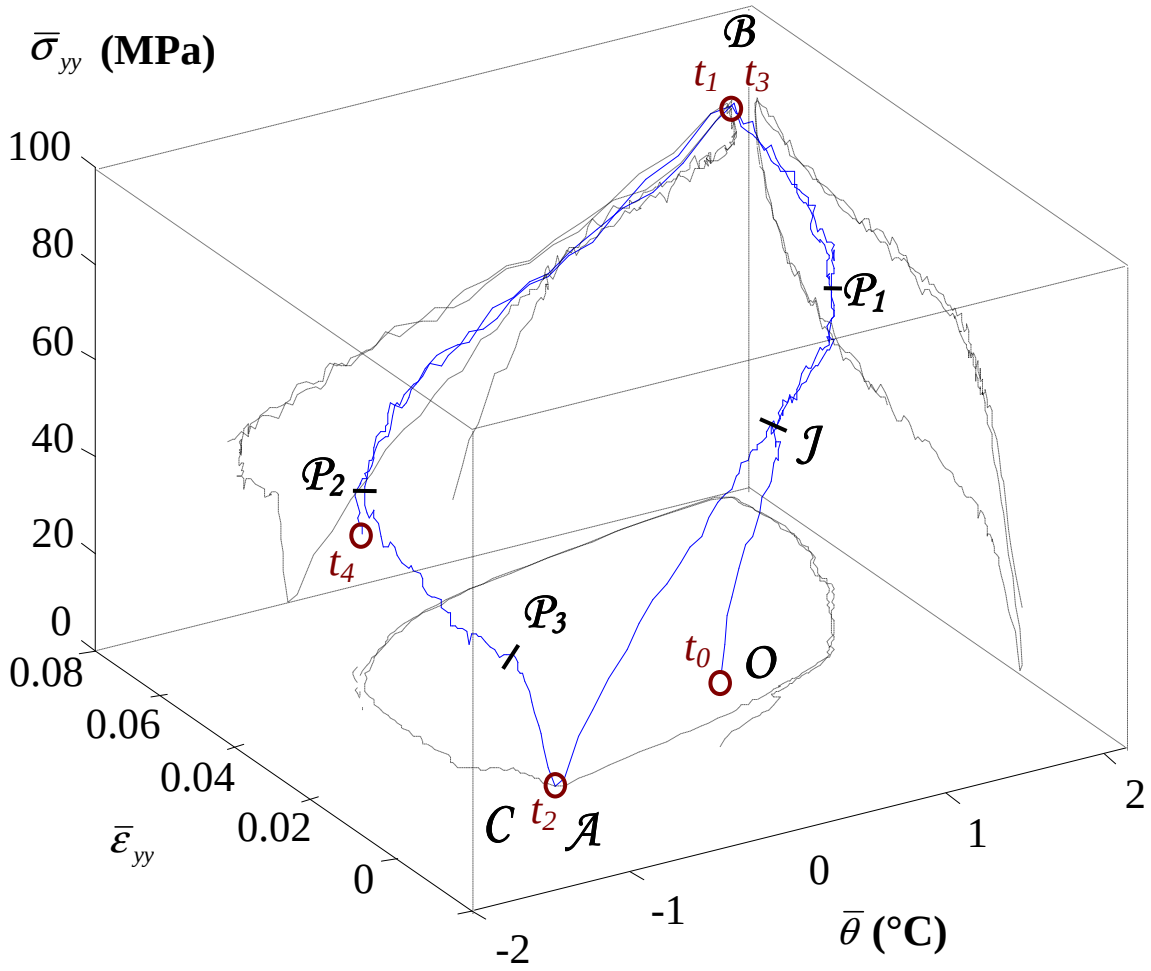


***Fig.2.3.8** – Réponse thermomécanique de l'essai (**1-3**)*

La figure 2.3.7 représente l'évolution temporelle de la contrainte globale, et permet de situer les différents temps de l'essai. L'essai débute à l'instant t_0. La première charge, t_0-t_1, se caractérise par une élévation de la température, la décharge, t_1-t_2 par un refroidissement. Le second cycle, t_2-t_3-t_4, part d'un état thermique différent du premier cycle visible sur la figure 2.3.8. Les chemins thermomécaniques deviennent identiques à partir du point de jonction $\mathcal{J}$, et décrivent ensuite un chemin thermodynamique stabilisé ($\mathcal{A}$-$\mathcal{B}$-$\mathcal{C}$). Les points $\mathcal{A}$ et $\mathcal{C}$ correspondent à l'état thermomécanique du système à l'instant t_2 et le point $\mathcal{B}$ correspond à l'état à l'instant t_1, identique à t_3. Ce dernier chemin présente l'avantage d'être un cycle thermodynamique, si on suppose que l'état de transformation en $\mathcal{A}$ est le même qu'en $\mathcal{C}$, et servira par la suite à la réalisation de bilans d'énergie. Dans cet essai, on observe systématiquement que la charge se traduit par une augmentation de la déformation, de la contrainte et de la température au dessus de la température ambiante, alors que la décharge s'accompagne d'une diminution de ces quantités, et notamment de la température qui passe en dessous de la température ambiante. Ces observations montrent l'existence d'un couplage

thermomécanique fort attribué lors de la charge à la transformation de phase, exothermique, et lors de la décharge à la transformation inverse, endothermique.

De plus, l'absence de refroidissement à la charge et de réchauffement à la décharge semble montrer que la thermoélasticité classique est toujours minoritaire par rapport à ce phénomène de couplage.

2.3.3.1 Réponse mécanique : $\bar{\varepsilon}_{yy} - \bar{\sigma}_{yy}$

La figure 2.3.9 correspond à la projection de la réponse thermomécanique dans l'espace mécanique. Il s'agit d'une réponse mécanique classique pour un alliage à mémoire de forme superélastique, avec une étape initiale linéaire suivi d'une sorte de plateau et la formation d'une hystérésis lors de la décharge. La partie linéaire possède une pente de 4470 MPa, beaucoup plus faible que le module d'Young proposé par le fabricant qui est de 18 GPa (tab.2.3.2). On voit par ailleurs sur le diagramme thermomécanique complet, figure 2.3.8, que la phase O-$\mathcal{P}_1$ correspond à un réchauffement global de l'éprouvette et ne peut donc être associé à un comportement purement thermoélastique (qui conduirait à un refroidissement). Certains auteurs ont déjà observé une variation de cette pente avec la température [Qian 06], et l'interprètent parfois comme une dépendance thermique du module d'Young de l'austénite. Dans notre cas, il semble plutôt que cet écart s'explique par la mise en place de la transformation de phase dès le début de l'essai.

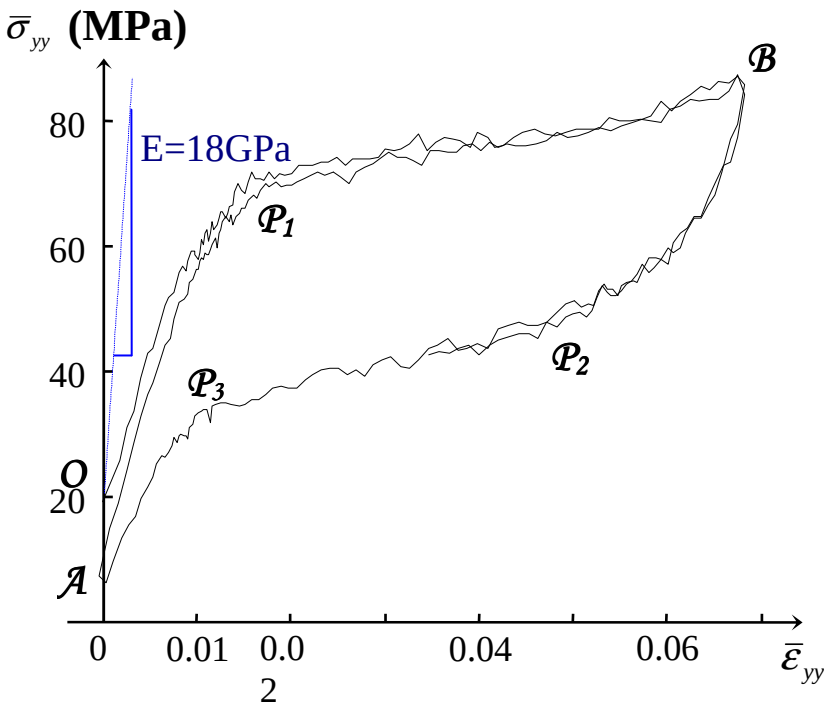


Fig.2.3.9 – *Réponse mécanique de l'essai* ***(1-3)***

2.3.3.2 Diagramme de transformation : $\bar{\theta} - \bar{\sigma}_{yy}$

La figure 2.3.10 représente la réponse macroscopique de l'essai (1-3) dans le plan $\bar{\theta} - \bar{\sigma}_{yy}$. En identifiant la transformation aux plateaux correspondants aux phases $\mathcal{P}_1$-$\mathcal{B}$ et $\mathcal{P}_2$-$\mathcal{P}_3$, on peut définir dans ce plan un domaine de transformation. Il est signalé par des pointillés sur la figure 2.3.10. La pente de ce domaine est de 12.5 MPa.K^{-1}, sa largeur est de 0.8°C, et il coupe les abscisses en $A = \bar{T}_0$ - 3°C, soit environ 23.5°C.

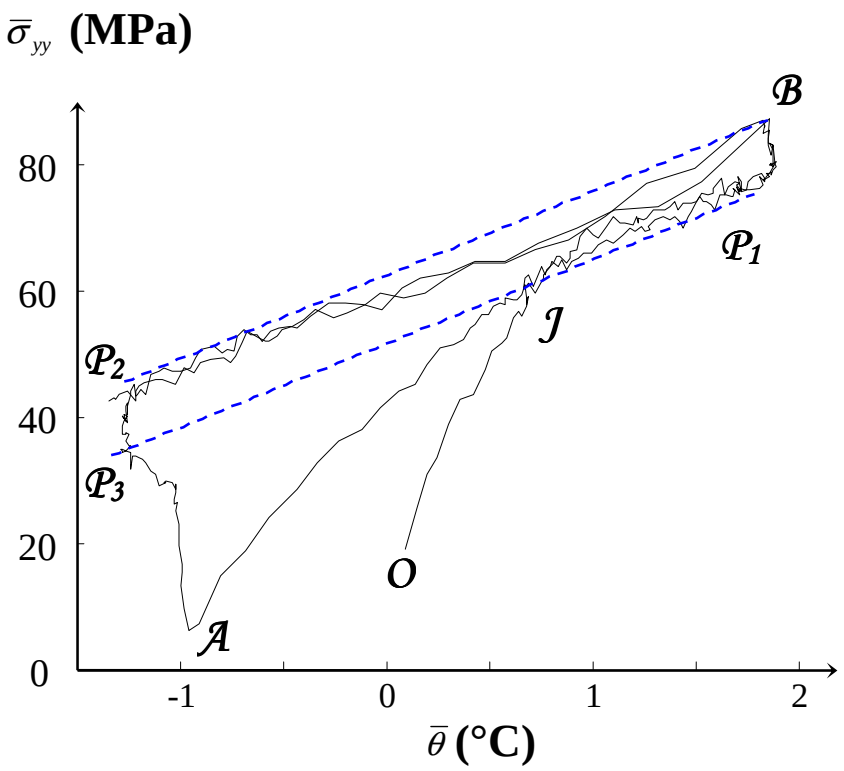


Fig.2.3.10 – *Réponse thermique de l'essai (**1-3**), réalisé à $\bar{T}_0$ =300K : réponse contrainte macroscopique-température moyenne* $\left(\bar{\theta} = \bar{T} - \bar{T}_0\right)$

Dans la littérature, les frontières du domaine sont déterminées expérimentalement soit au cours d'une traction lente supposée « isotherme »[15] soit au cours d'un chargement thermique imposé par l'extérieur sous contrainte constante [Siredey 99]. Les pentes du domaine de transition varient entre 2 et 10 MPa.K^{-1}, selon le matériau étudié (*cf.* par exemple [Orgéas 98], [Shaw 95], [Nishimura 96]). Ainsi, [Siredey 99] identifie, pour un monocristal de CuZnAl, une pente de 5 MPa.K^{-1} et une largeur du domaine de 8.5°C. Bien que notre essai soit non isotherme, la pente du domaine identifiée correspond à l'ordre de grandeur énoncé, avec une taille de domaine beaucoup plus petite. En ce qui concerne la température de transformation *A* identifiée, elle ne correspond pas avec celle obtenue par DSC. La différence

[15] L'isothermie est rarement contrôlée !!

de mode de transformation, à savoir induite thermiquement pour l'essai de DSC et mécaniquement ici, pourrait expliquer une telle divergence.

2.3.3.3 Effets temporels sur le comportement

Le diagramme de transformation est l'expression d'un couplage thermomécanique fort. Nous avons déjà pu observer l'expression de ce couplage au cours de l'essai (**1-3**). En effet, cet essai mécanique s'accompagnait d'une variation thermique non négligeable. La présente sous-section propose le couplage dans le sens inverse, c'est-à-dire en considérant les effets mécaniques engendrés par un chargement thermique. Nous verrons notamment que ce couplage fort permet d'expliquer des phénomènes temporels qui pourraient s'apparenter à du fluage ou de la relaxation, et qui font plus volontiers référence à de la viscosité.

a) Maintien en force (« fluage ») – maintien en déplacement (« relaxation »)

Les effets du temps sont illustrés sur l'essai (**5-5**). La figure 2.3.11 représente la réponse mécanique au cours d'un essai de type fluage (figure a) et au cours d'un essai de relaxation (figure b). Au cours du maintien en force M, on constate l'augmentation de la déformation de l'éprouvette. D'autre part, le maintien en déplacement M' laisse apparaître une relaxation de la contrainte. En général ces types de phénomènes temporels sont associés à un comportement visqueux. Cependant, lors du maintien, les échanges thermiques avec l'extérieur introduisent un temps caractéristique de retour à l'équilibre. La variation thermique accompagnant ce retour à l'équilibre peut tout à fait expliquer les phénomènes mécaniques observés, du fait de l'intervention d'un couplage thermomécanique fort.

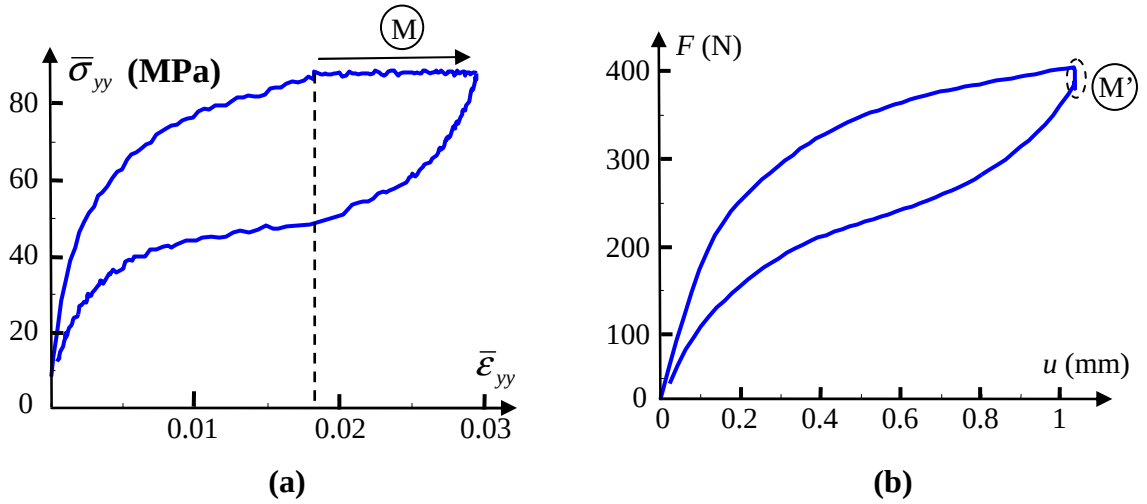


***Fig.2.3.11** – (a) Essai de fluage (**5-5**) – (b) Essai de relaxation (**5-6**)*

Un résultat de la littérature consolide cette idée. En effet, elle rapporte une influence du coefficient conducto-convecteur h_1 sur le comportement mécanique des AMF. Ainsi, [Shaw 95] montre qu'une éprouvette immergée dans de l'eau possède un plateau mécanique de pente plus faible que lors du même essai placé dans de l'air. Ce résultat s'explique par le fait que la convection, et par conséquent les fuites thermiques (éq.1.1.37 : $\tau_{th}^{2D} \propto 1/h_1$), sont plus favorisées dans l'eau (h_1 = 100 à 1000 W.m^{-2}.K^{-1}) que dans l'air (h_1 = 10 W.m^{-2}.K^{-1}). Un résultat similaire a été rapporté par [Balandraud 01], lors de la comparaison d'un essai sous convection forcé vis-à-vis d'un essai sous convection naturelle, donc de coefficient h_1 plus faible. Ces résultats illustrent le rôle important joué par les fuites thermiques sur le comportement mécanique. La dépendance au temps lors d'un maintien en contrainte ou en déformation n'est donc pas principalement due à une viscosité mais bien à l'évolution temporelle de la température associée aux échanges thermiques de conduction et de convection.

b) Influence de la vitesse de sollicitation

L'influence de la vitesse de sollicitation sur la réponse mécanique des AMF a déjà été signalée par la littérature ([Shaw 95], [Entemeyer 00], [Brinson 02], [Nemat-Nasser 06]). Nous avons réalisé deux essais, avec un rapport 100 sur les vitesses de chargement. Ce sont les essais (**4-5**), avec v_{imp} = 0.2 mm.s^{-1}, et (**4-6**), avec v_{imp} = 0.002 mm.s^{-1}. La figure 2.3.12 correspond à la superposition de leurs réponses mécaniques. On constate que l'essai (**4-5**) présente une pente pour le plateau mécanique beaucoup plus importante que l'essai (**4-6**).

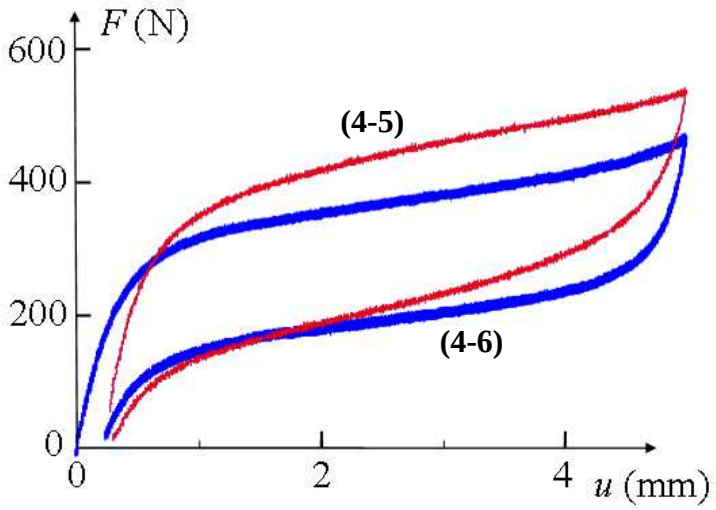


Fig.2.3.12 – *Réponse mécanique des essais (**4-5**) et (**4-6**)*

De plus, l'essai (**4-5**) présente une variation de température allant jusqu'à +7.5°C lors de la charge et -5.2°C lors de la décharge. En comparaison, l'essai (**1-3**), réalisé à une vitesse

5 fois plus faible présentait une variation thermique d'environ 2°C (*cf.* fig.2.3.10). Les variations de température n'ont pas été estimées lors de l'essai (**4-6**) compte-tenu de sa durée, mais elles doivent être très faibles (essai ***quasi*** isotherme). En effet, plus l'essai va lentement, plus les fuites thermiques ont le temps de ramener le système à l'équilibre thermique, et plus la variation de température sera faible. Rappelons cependant que la variation thermique n'est qu'une conséquence des sources de chaleurs. Et dire que la variation thermique est faible n'indique en rien l'importance ou la faiblesse énergétique de ces sources de chaleurs.

c) Chargement thermique

Pour rendre compte encore plus clairement de l'effet thermique sur la réponse mécanique, l'essai (**4-8**) comprend une charge thermique à contrainte constante. La figure 2.3.13 correspond à l'évolution du déplacement et de la température au cours de cet essai. La température est indiquée en pointillés. L'essai commence par un chargement en déplacement (*cf.* tab.2.3.5). Ensuite prend place le maintien en force (avec un saut correspondant au changement de canal de pilotage). Durant ce maintien, le chargement thermique intervient. L'essai se termine par une décharge.

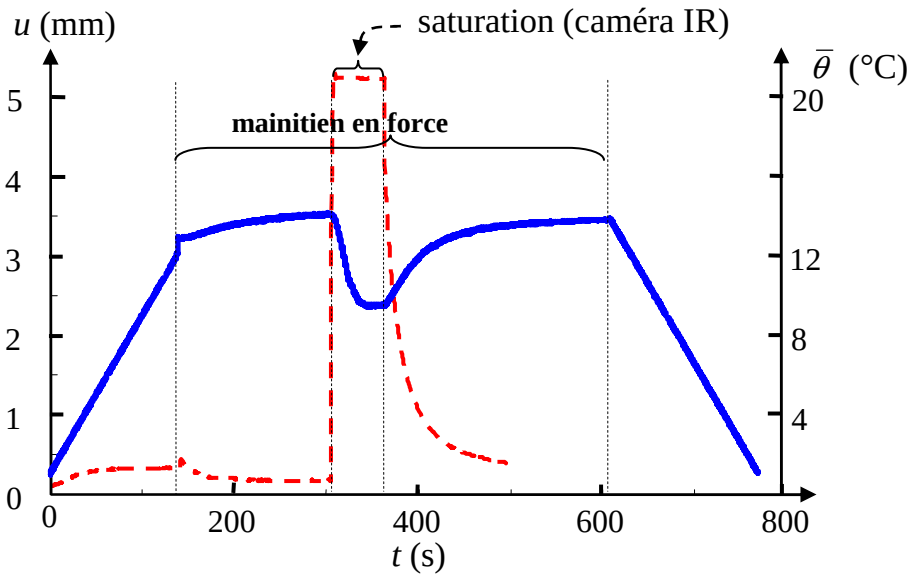


***Fig.2.3.13** – Essai (**4-8**), déplacement et température*

Au début du maintien en force on retrouve le phénomène de fluage observé lors de l'essai (**5-5**). Ensuite, la lampe halogène utilisée pour réaliser le chargement thermique fait saturer la caméra infrarouge. La température de l'éprouvette s'élève au cours de ce chargement, et s'accompagne d'une diminution du déplacement de l'ordre du millimètre. A la fin du chargement thermique, la température de l'éprouvette retourne à l'équilibre, provocant à nouveau un phénomène de fluage. L'essai se termine par une décharge pilotée en

déplacement. Le fluage « inverse » au cours du chargement thermique s'explique par le même argumentaire : l'élévation de la température de l'environnement à contrainte constante provoque la transformation inverse, et donc une diminution de la déformation.

d) Conclusion

Sur ces premières observations « macroscopiques », on a donc vu qu'un chargement thermique, imposé, ou résultant des fuites thermiques, présentait des conséquences mécaniques non négligeables. On a également vu que les fuites thermiques, en compensant l'auto-échauffement de la transformation de phase, diminuent la contrainte, c'est-à-dire l'apport d'énergie mécanique nécessaire à la transformation. En résumé, les fuites de chaleur influencent la cinétique de transformation de manière importante.

2.3.3.4 Apports et limites de l'analyse globale

Les mesures simultanées des réponses mécaniques et thermiques « macroscopiques » sur l'éprouvette ont permis de mettre en évidence un couplage thermomécanique **fort**. De plus, ces mesures simultanées ont rendu possible la construction d'un diagramme de transformation au cours d'un unique essai mécanique.

Cependant, cette première analyse suppose que la moyenne spatiale de la température ait un sens (ce qui est d'autant plus juste que le champ de température est homogène). Les mesures thermiques faites par thermographie infrarouge montrent l'existence de forts gradients de température lors des essais, ce qui limite la validité de cette hypothèse. D'autre part, les mesures cinématiques montrent aussi des gradients de déformation importants. Ainsi, l'éprouvette se comporte comme une structure, excluant l'identification du comportement de matériau à celui de l'éprouvette. Le comportement de la matière est alors à rechercher à un niveau plus local, accessible par l'intermédiaire des techniques de mesures de champs.

2.3.4 Analyse locale

Dans ce paragraphe, nous allons présenter les principales observations faites à l'échelle « locale ». L'objectif est ici de mettre en évidence les phénomènes élémentaires qui devront être pris en compte dans la proposition d'un modèle de comportement pour un monocristal d'AMF. Ces phénomènes serviront à fonder et à mettre à l'épreuve la loi de comportement proposée au prochain chapitre.

2.3.4.1 Localisation et front de changement de phase

Avant de s'intéresser à la réponse thermomécanique locale, on va commencer par choisir les variables permettant de mettre en évidence une localisation du comportement. Au cours de l'essai, les champs de déformation et de température mesurés présentent de fortes hétérogénéités. Pour mettre en évidence le développement de ces hétérogénéités, on va représenter les champs de vitesses de déformation et les champs de sources de chaleur. En effet, les vitesses de déformation révèlent les lieux où la déformation se localise, tandis que les sources de chaleur indiquent la portée énergétique de cette localisation. Rappelons que l'une et l'autre de ces mesures sont exprimées dans la configuration de Lagrange avec une base de temps commune. Cet apport du dispositif de mesure de champs couplés permet la comparaison locale de ces deux grandeurs. Afin de présenter d'une manière synthétique l'une et l'autre de ces mesures, un profil longitudinal est extrait de la partie centrale de l'éprouvette. On confirmera par la suite la représentativité de ce profil vis-à-vis de la mesure totale par sa relative homogénéité dans la section de l'éprouvette. Enfin, l'évolution temporelle de ce profil peut être tracée pour former ce que nous appellerons une carte « espace-temps » de la mesure.

Ainsi construite, la carte de la composante $\dot{E}_{yy}$ du tenseur des vitesses des déformations de Green-Lagrange correspond à la figure 2.3.14.a. Cette grandeur a été calculée avec un pavé de lissage spatial de 3 mm et un pavé de lissage temporel de 4 s. La force est indiquée sur la figure de manière à repérer le chargement. La localisation apparait distinctement. Elle se concentre sur une bande étroite mobile, visible dans la zone observée à partir de 55 s. Cette bande apparaît de l'une des extrémités de la zone d'observation, tandis que le plateau mécanique débute en amont de cette apparition. Il semble donc que la localisation commence en dehors de la zone d'observation. Deux lieux de localisation successifs et disjoints apparaissent dans l'éprouvette. Le premier s'étend hors de la zone d'intérêt jusqu'à 14 mm, et le second est compris entre 17 et 24 mm. Lors de la décharge, l'historique s'inverse, en activant d'abord le second lieu de localisation. Il est remarquable que d'un cycle à l'autre (fig.2.3.14.a), et cela même dans le cas d'une vitesse de chargement différente (ce qui a été vérifié sur l'essai (**1-2**)), le chemin du front soit le même.

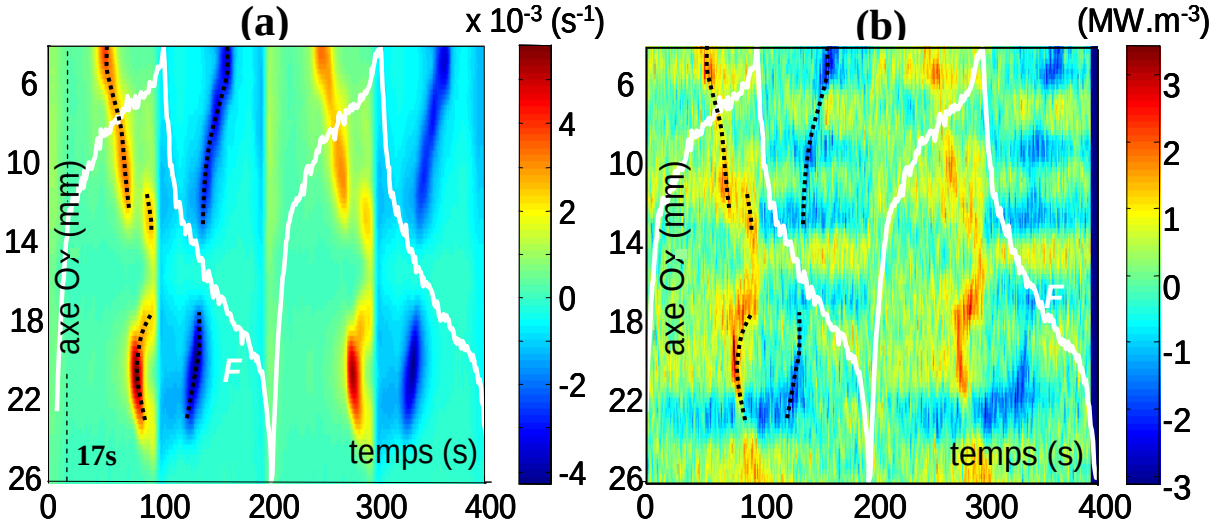


Fig.2.3.14 – *Distributions longitudinales au cours du temps pour l'essai* ***(1-3)***
(a) des vitesses de déformation $\dot{E}_{yy}$ *, (b) des sources volumiques de chaleur* p_{ch}

La figure 2.3.14.b représente la carte des sources de chaleur p_{ch}, calculée pour un pavé de lissage similaire à celui employé dans le calcul des vitesses de déformation. Ce calcul nécessite une dérivation seconde dans l'espace (éq.2.2.32), ce qui explique sa plus grande sensibilité au bruit. Néanmoins, la figure permet d'observer des bandes identiques à celles présentes sur les cartes de vitesses de déformation. Pour faciliter la comparaison entre ces deux cartes, nous avons surligné en pointillé les bandes de vitesse de déformation sur le premier cycle de la figure 2.3.14.a. Puis nous avons superposé ces pointillés sur la figure 2.3.14.b aux temps et lieux correspondants. On observe une bonne corrélation, sur laquelle nous reviendrons. Pour le moment, limitons nous aux remarques suivantes, les sources de chaleur sont positives lors de la charge (phénomène exothermique) et négatives lors de la décharge (phénomène endothermique). On peut dont identifier ces bandes étroites à des fronts de changement de phase.

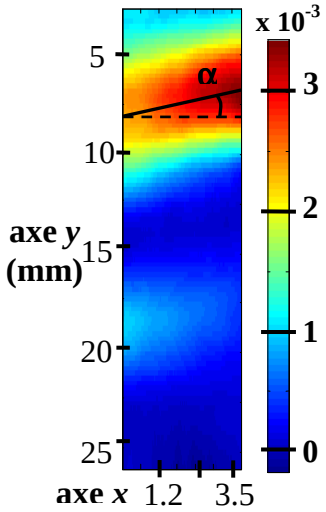


Fig.2.3.15 – *Carte spatiale à t =70 s de la vitesse de déformation* $\dot{E}_{yy}$

La figure 2.3.15 correspond au champ des vitesses de déformation $\dot{E}_{yy}$ à l'instant 70 s. On constate que l'homogénéité dans la section de l'éprouvette de la vitesse de déformation n'est pas parfaite. Le front est incliné selon un angle de $\alpha \approx 11.75°$. Une inclinaison plus importante a été signalée par [Zhang 00a], ou [Gao 00b], dans le cas d'un monocristal de CuAlNi. L'homogénéité relativement bonne nous permet néanmoins de soutenir le choix d'un profil pour représenter l'évolution de la vitesse de déformation et des sources de chaleur sous forme de cartes (fig.2.3.14).

2.3.4.2 Hétérogénéité mécanique

Passons maintenant à l'analyse de la réponse mécanique locale de cet essai comportant deux cycles de chargement. Dans cette optique, 5 points matériels ont été sélectionnés de manière régulière sur l'axe vertical de l'éprouvette, avec pour ordonnées *y* égales à 5, 10, 14, 19 et 24 mm. Chaque point matériel correspond à un volume d'environ 1 mm^3. La connaissance des lieux de la localisation repérés sur la figure 2.3.14.a, permet de dire que les deux premiers points voient passer le premier front, le quatrième point le second front, et les deux derniers sont hors des zones de localisation. La figure 2.3.16 représente la réponse mécanique de ces points matériels. On constate une forte hétérogénéité des réponses mécaniques. Les points où le front est passé présentent une forte boucle d'hystérésis, tandis que les autres points présentent une hystérésis plus modeste (y = 14 mm), voir quasi inexistante (y = 25 mm). On constate également que plus la transformation est tardive, plus la pente précédant le plateau est importante, et plus la contrainte sur ce plateau est élevée. Pour le point le moins transformé, (y = 25 mm), cette pente estimée sur les premier pas de temps de l'essai est de 17 GPa ce qui est relativement proche du module d'Young proposé par la littérature (18.7-20 GPa *cf.* tab.2.3.2). On identifie cette grandeur au module d'Young de la phase austénitique.

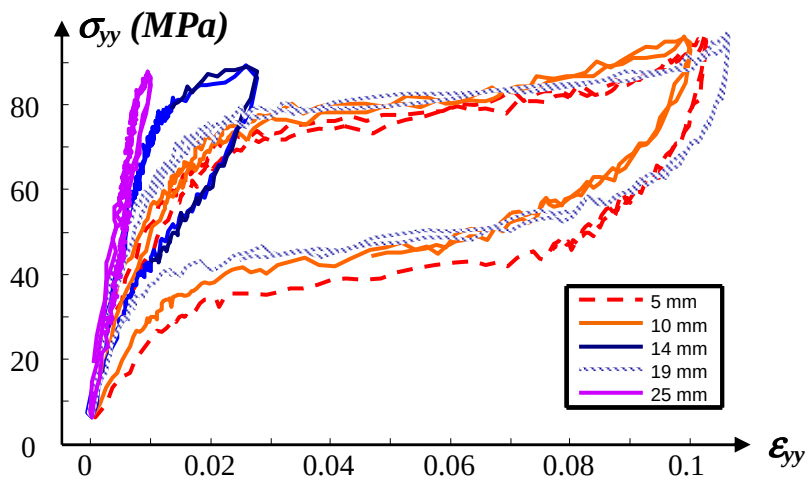


Fig.2.3.16** – Réponse mécanique des cinq points matériels – essai **(1-3)

2.3.4.3 Domaine de transformation local

Intéressons nous maintenant au domaine de transformation observé cette fois à l'échelle « locale ». La figure 2.3.17 correspond à la réponse des 5 points matériels dans le plan σ_{yy}-θ. On a signalé par des ronds les instants où la vitesse de déformation est maximale, ou minimale, pour le point matériel considéré. Ces instants correspondent au lieu de passage du front (*cf.* fig.2.3.14). Ceux appartenant au premier front, en y = 5 et y = 10 mm, se répartissent dans le plan σ_{yy}-θ sur une ligne représentée en trait plein sur la figure. Ceux correspondant au second front, en y = 19 et y = 14 mm, se trouvent sur une ligne parallèle, représentée en pointillés. De la même manière que lors de l'analyse « globale », on peut identifier un domaine de transformation, en grisé sur la figure, dans lequel se concentre la majeure partie de la déformation, que l'on associe au changement de phase. La pente de ce domaine est de 11.5 MPa.K^{-1}, et l'épaisseur d'environ 1.2°C, ce qui est encore une fois bien inférieur à la taille du domaine de transition annoncée par le fabricant.

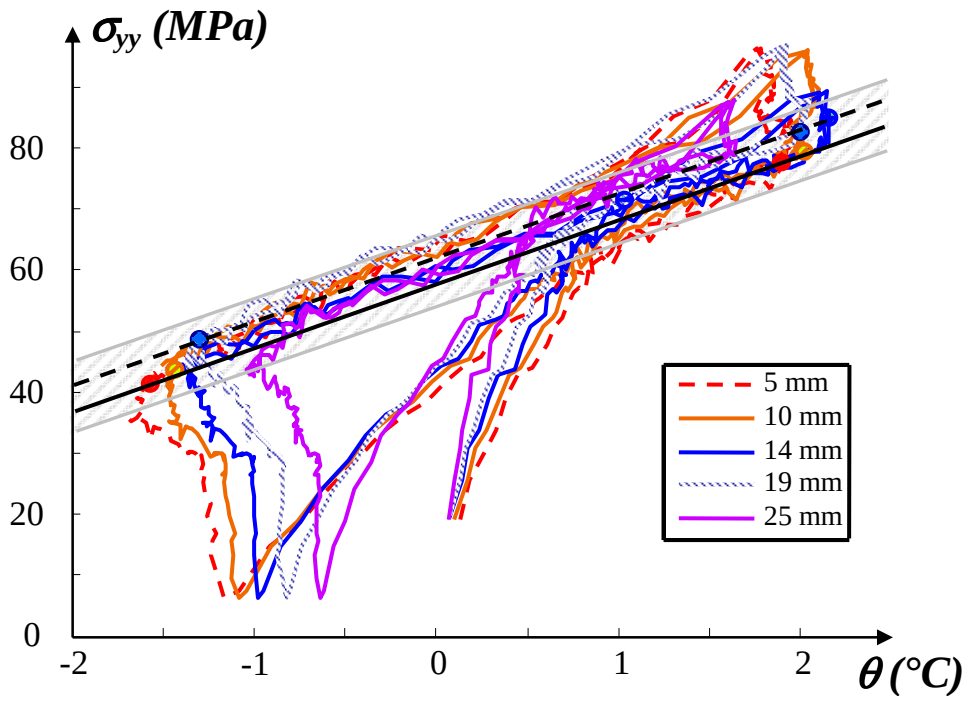


***Fig.2.3.17** – Réponse des cinq points matériels dans l'espace σ_{yy}-θ – essai (**1-3**)*

La figure 2.3.18 reprend l'ensemble des lieux du passage du front représentés sur la figure 2.3.17 par des ronds. Outre l'essai (**1-3**), la figure 2.3.18 reprend également ces lieux pour les essais (**1-1**), (**1-2**) et (**1-4**). Rappelons que les essais (**1-1**) et (**1-2**) sont réalisés à des vitesses deux fois plus petite. On constate que l'ensemble de ces lieux peut être regroupé à l'intérieur d'un domaine d'épaisseur légèrement plus large que précédemment (environ 2.5°C), mais dont l'amplitude est toujours bien inférieure aux spécifications du fabricant.

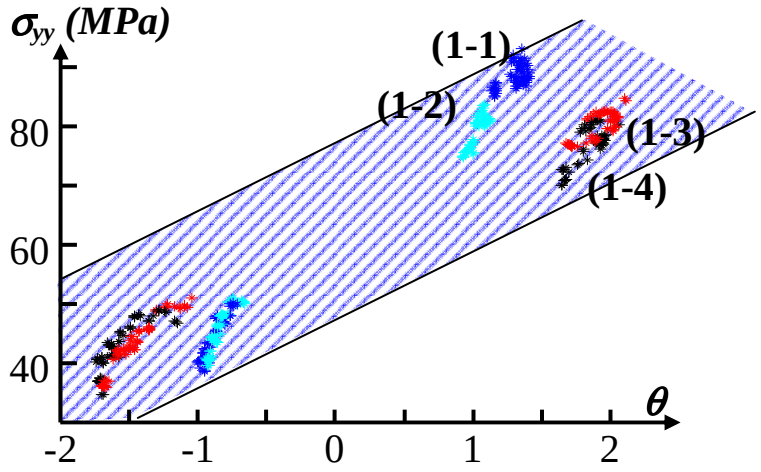


Fig.2.3.18 *– Trajet dans l'espace contrainte-température des fronts correspondants aux essais **(1-1)**, **(1-2)**, **(1-3)** et **(1-4)***

2.3.5 Etude énergétique locale

2.3.5.1 Relation entre cinématique et énergétique

Plus haut, lors de l'étude de la figure 2.3.14 nous avons remarqué une corrélation entre les vitesses de déformation $\dot{E}_{yy}$ et les sources de chaleur p_{ch}. Afin de vérifier et d'approfondir ce constat la superposition de ces deux grandeurs pour le point matériel situé à y = 19 mm est représentée sur la figure 2.3.19.a. Leurs extremums correspondent bien. Si on représente maintenant une grandeur en fonction de l'autre sur la figure 2.3.19.b, on constate qu'il existe une relation linéaire acceptable entre elles, avec une dispersion due à la présence du bruit. Une régression linéaire, en rouge sur la figure, permet d'estimer le coefficient de proportionnalité ξ^{mes} d'environ 390 MJ.m^{-3}.

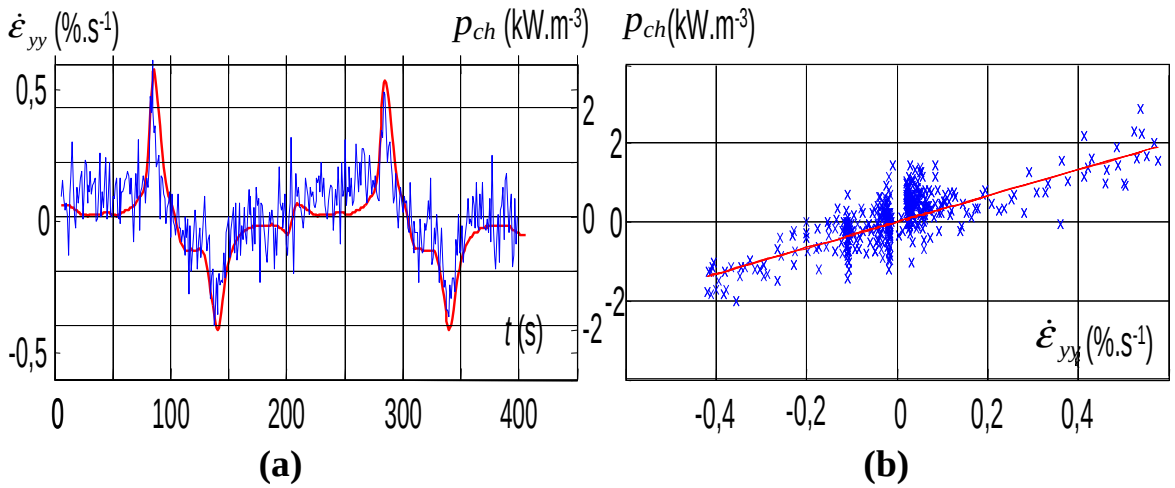


Fig.2.3.19 *– Essai **(1-3)** : confrontation des mesures calorifiques et cinématiques, y = 19 mm*

Cette proportionnalité entre sources de chaleur et vitesse de déformation a été observée sur des essais effectués à différentes vitesses et sur différents échantillons. Par exemple, la correspondance entre les cartes de vitesses de déformation et de sources de chaleur pour l'essai (**4-12**) est clairement établie sur la figure 2.3.20.

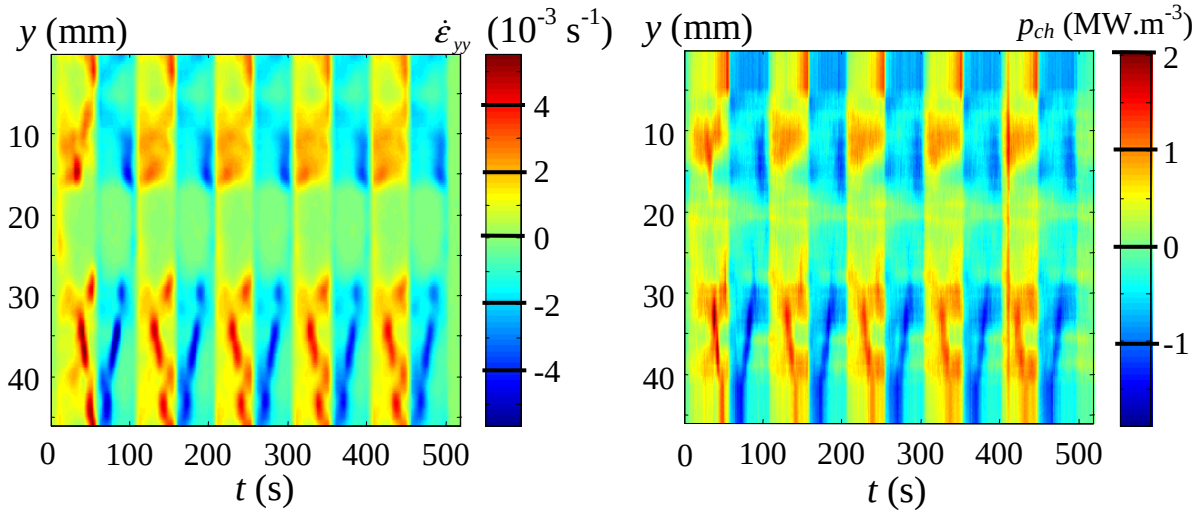


Fig.2.3.20 *Distributions longitudinales au cours du temps(a) des vitesses de déformation* $\dot{E}_{yy}$ *et (b) des sources volumiques de chaleur* p_{ch} *– essai (**4-12**)*

La superposition de ces deux grandeurs pour le point matériel situé à y = 35 mm (fig.2.3.21) permet à nouveau d'identifier le coefficient de proportionnalité ξ^{mes}. Le filtrage des sources est ici de meilleure qualité que pour l'essai (**1-3**). On estime alors ce coefficient sur les deux zones de passage du front, situées respectivement entre 7 et 17 mm et entre 27 et 50 mm. On trouve alors un coefficient de proportionnalité moyen ξ^{mes} sur ces deux zones de, respectivement, 312 MJ.m^{-3} et 356 MJ.m^{-3}. Ainsi le coefficient de proportionnalité est sensiblement indépendant des conditions d'essais.

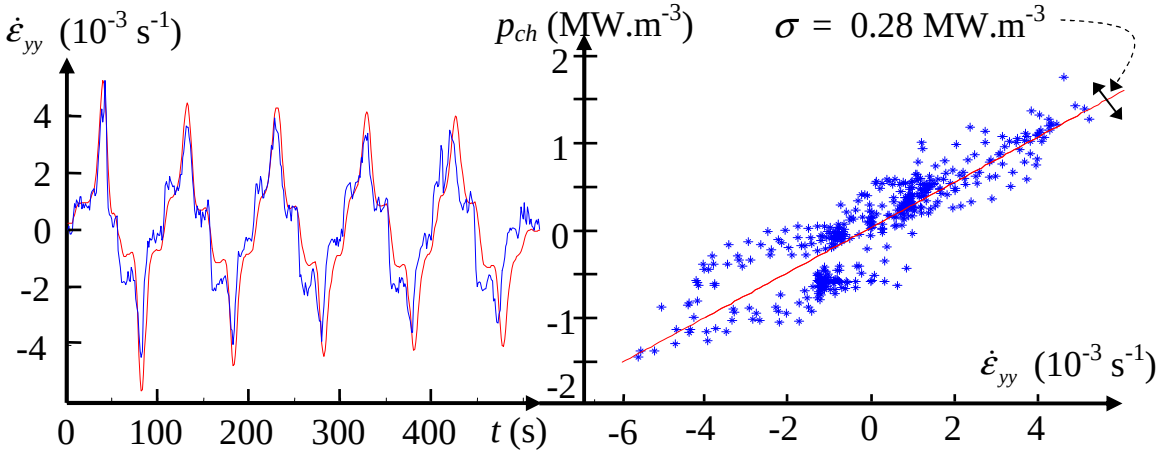


Fig.2.3.21 *– Confrontation des mesures calorifiques et cinématiques, essai* (**4-12**), *y = 35 mm*

2.3.5.2 Bilan énergétique

On va maintenant comparer les grandeurs énergétiques mises en jeu au cours du cycle thermodynamique $\mathcal{A}$-$\mathcal{B}$-$\mathcal{C}$. Chaque point matériel est un système thermodynamique qui échange à la fois du travail mécanique et de la chaleur. Concentrons nous d'abord sur l'aspect mécanique. La figure 2.3.22 reprend la courbe mécanique du point matériel placé en y = 10 mm lors de l'essai (**1-3**). L'énergie mécanique fournie lors de la charge $W_{\mathcal{AB}}$ correspond à l'aire sous la courbe $\mathcal{A}$-$\mathcal{B}$, celle qui est restituée par le matériau à la décharge, notée $W_{\mathcal{BC}}$, est représentée en grisé sur la figure. Enfin, l'aire d'hystérésis A_h, hachurée sur la figure, est égale à la différence de ces deux grandeurs, c'est l'énergie mécanique conservée par le matériau.

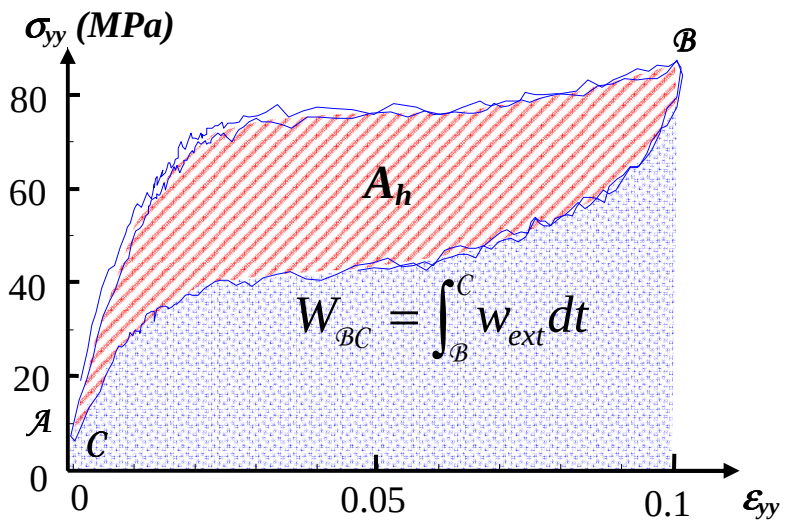


***Fig.2.3.22** – Essai (**1-3**) : énergie mécanique et aire d'hystérésis en y =10 mm*

Ces énergies peuvent être calculées en tout point matériel de l'éprouvette. Leurs valeurs, réparties sur un profil longitudinal, sont indiquées sur la figure 2.3.23. On a choisi de représenter -$W_{\mathcal{BC}}$ pour faciliter la comparaison avec les autres grandeurs positives. Parallèlement, nous avons représenté en pointillé l'énergie calorifique $Q_{\mathcal{AB}}$. mise en jeu au cours de la charge. L'écart entre énergie mécanique et énergie calorifique est grand, par conséquent nous avons choisi deux échelles. Celle de gauche correspond à l'énergie mécanique et celle de droite à l'énergie calorifique.

On retrouve l'hétérogénéité mécanique signalée plus haut. Les zones qui ont vu passer le front (pour y compris entre 1 et 12 mm, et y compris entre 17 et 22 mm) possèdent toutes deux de fortes hystérésis A_h. Dans ces zones, l'aire d'hystérésis A_h est environ 20 fois inférieure à la chaleur mise en jeu à la charge ($Q_{\mathcal{AB}}$), en pointillés sur la figure. Cela signifie que le dégagement de chaleur est très important (plus de 10 fois l'énergie mécanique fournie

au matériau lors de la charge $W_{\mathcal{AB}}$) c'est-à-dire que le matériau puise dans son énergie interne pour se transformer.

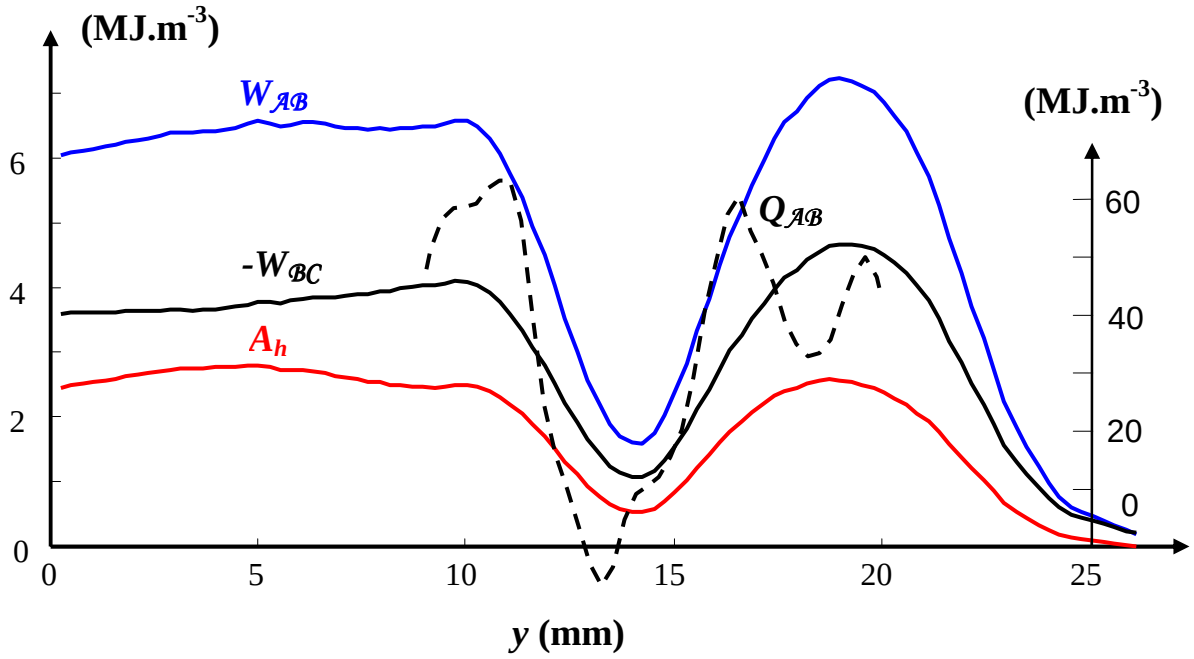


Fig.2.3.23 – *Confrontations locales des énergies mécaniques, de l'aire d'hystérésis et des sources de chaleur – essai (**1-3**)*

Le rapport R_M défini à l'équation 2.3.3, souligne l'importance de l'hystérésis et donc de la perte d'énergie mécanique qui l'accompagne. La figure 2.3.24 représente un profil de ce rapport sur l'axe de l'éprouvette. Il est relativement important et homogène, avec une moyenne de 38%, ce qui est souligne bien l'importance de l'hystérésis mécanique. Cette perte énergétique au cours d'un cycle thermodynamique, s'explique par la présence de dissipation : intrinsèque au matériau (d_1) **et/ou** thermique (d_2).

$$R_M = \frac{A_h}{\int_{\mathcal{A}}^{\mathcal{B}} w_{ext}\, dt} \qquad (2.3.3)$$

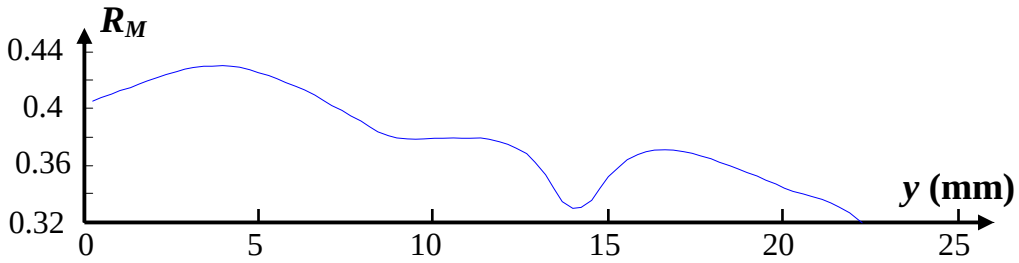


Fig.2.3.24 – *Rapport R_M*

Il est possible de calculer l'intégrale des sources de chaleur sur chaque cycle $Q_{\mathcal{AC}}$. Cette grandeur est de l'ordre de 1.4 MJ.m^{-3}. De même on calcule l'énergie calorifique mise en jeu à la charge ($Q_{\mathcal{AB}}$) et à la décharge ($Q_{\mathcal{BC}}$). Les valeurs absolues de ces dernières grandeurs sont sensiblement égales et valent : 28 MJ.m^{-3}. Cette valeur est autrement plus importante que les 1.4 MJ.m^{-3} de source cumulée sur un cycle. Sur un cycle thermodynamique, on définit alors, en chaque point matériel, l'indicateur R_T par :

$$R_T = \frac{\int_{\mathcal{T}_C} w_{ch}\,\mathrm{d}t}{\int_{\mathcal{T}_C} |w_{ch}|\,\mathrm{d}t} \tag{2.3.2}$$

Le rapport R_T met en évidence l'importance de la dissipation. En effet, l'énergie mise en jeu par les couplages s'annule sur un cycle thermodynamique isotherme ou isentropique et reste généralement faible entre ces deux cas extrêmes. Au contraire la dissipation intrinsèque est positive et ne peut que se cumuler dans la valeur de $Q_{\mathcal{AC}}$. Le rapport R_T tend vers 1 lorsque l'aire du cycle est induite par la dissipation intrinsèque et reste proche de 0 lorsqu'elle est plutôt induite par des effets de couplage. Cet indicateur vaut ici 0.026, ce qui traduit donc un comportement très faiblement dissipatif et fortement couplé.

2.3.5.3 Conclusion

Pour conclure, les mesures de champs couplées ont permis un suivi précis et quantitatif du phénomène de propagation de fronts de changement de phase. On a également pu établir clairement l'existence de phénomènes de couplage thermomécanique fort, ainsi que l'existence d'une dissipation intrinsèque faible en comparaison des énergies de couplage mises en jeu. Un autre point important est la relation de proportionnalité observée sur nos essais entre les sources de chaleur et la vitesse de déformation mesurées à l'échelle locale. Enfin, nous avons aussi montré l'existence d'un domaine de transition dont l'étendue, dans le plan σ_{yy}-θ, est réduite à une bande comprise entre deux droites parallèles distantes de quelques degrés Celsius.

Ces observations expérimentales vont servir de fondement dans la construction d'une loi de comportement thermomécanique dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 3

Modèle thermomécanique pour un alliage à mémoire de forme

Sommaire

3.1 Modèle pour un alliage à mémoire de forme
- 3.1.1 Potentiel énergie libre
- 3.1.2 Pseudo-potentiel de dissipation
- 3.1.3 Equations d'état – équations d'évolution – équation de la chaleur
- 3.1.4 Diagramme de transformation

3.2 Premiers résultats et discussion
- 3.2.1 Implémentation
- 3.2.2 Paramètres du modèle retenus pour les simulations
- 3.2.3 Comportement d'un élément de volume

3.3 Etude du comportement de structures
- 3.3.1 Comparaison des deux codes de calcul par élément finis
- 3.3.2 Comparaison qualitative avec l'expérience

3.1 Modèle pour un alliage à mémoire de forme

Nous allons présenter dans cette section le modèle retenu pour décrire le comportement pseudoélastique des AMF, tout en le positionnant vis-à-vis des modèles inspirés de la plasticité et des modèles micromécaniques. On commencera par décrire le choix des variables internes du système. Puis, les différents termes du potentiel énergie libre ainsi que ceux du pseudo-potentiel de dissipation seront introduits et commentés un à un, soit :

- en rappelant les arguments déjà formulés dans la littérature pour justifier leur existence,
- en justifiant notre choix motivé par les résultats de l'analyse expérimentale menée au chapitre précédent, choix qui respecte les limitations définies dans le chapitre d'introduction.

La connaissance des deux potentiels permettra ensuite d'écrire les équations du modèle ainsi que l'expression du diagramme de transformation.

3.1.1 Potentiel énergie libre

On se place pour le moment dans le cadre de la modélisation des AMF le plus général. Puis on le limitera au fur et à mesure au cadre choisi dans ce manuscrit, à savoir les AMF monocristallins, monovariants, dont on étudie la transformation σ-induite, pour un nombre limité de cycles.

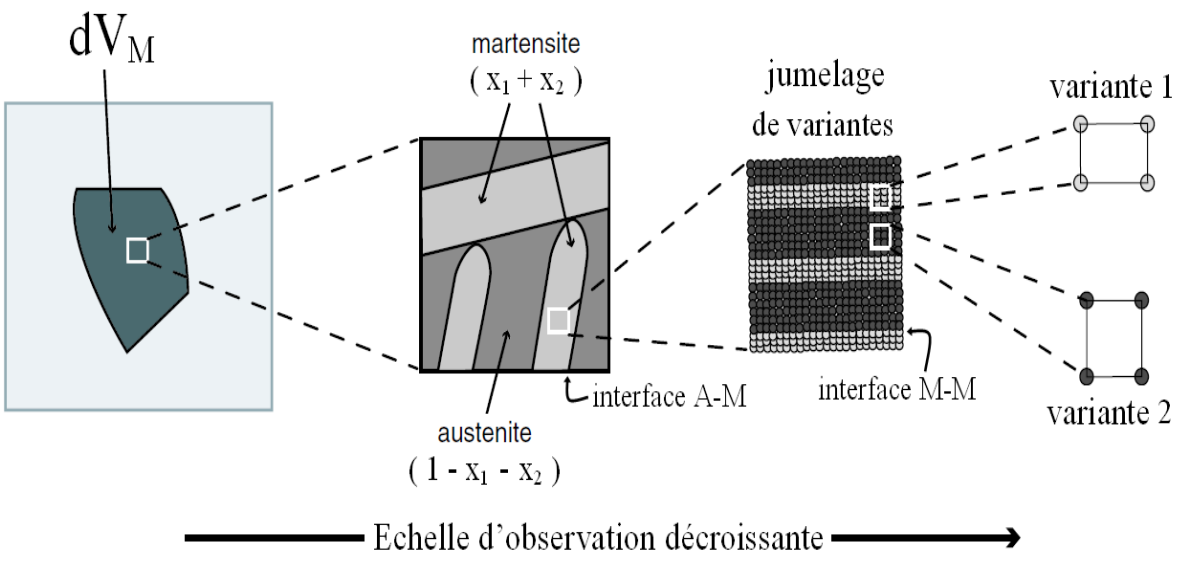


***Fig 3.1.1** – Microstructure et variables internes [Turtelaub 06]*

Pour un volume élémentaire représentatif (VER) dV_M, le schéma 3.1.1 montre une microstructure d'AMF complexe faisant intervenir plusieurs échelles caractéristiques, avec des plaquettes, insérées dans la phase mère austénitique, constituées elles-mêmes de plusieurs variantes de martensite (deux pour la figure 3.1.1).

Nous nous proposons d'associer au volume élémentaire un ensemble de variables internes x_i qui correspondent aux taux respectifs de la $i^{\text{ème}}$ variante dans ce volume (fig.3.1.1). La partition du volume entre austénite et martensite impose, pour N variantes de martensite, les conditions suivantes :

$$0 \le x_i \quad \text{et} \quad x = \sum_{i=1}^{N} x_i \le 1 \tag{3.1.1}$$

On se place sous l'hypothèse des petites perturbations et on considère une partition additive des déformations $\bar{\bar{\varepsilon}}$ en une déformation élastique $\bar{\bar{\varepsilon}}_{el}$, une déformation thermique $\bar{\bar{\varepsilon}}_{th}$, et une déformation de transformation $\bar{\bar{\varepsilon}}_{ch}$, définies dans les équations suivantes :

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_{el} = \bar{\bar{\varepsilon}} - \bar{\bar{\varepsilon}}_{th} - \bar{\bar{\varepsilon}}_{ch} \qquad \bar{\bar{\varepsilon}}_{th} = \bar{\bar{\alpha}}\theta \qquad \bar{\bar{\varepsilon}}_{ch} = \sum_{i=1}^{N} \bar{\bar{\beta}}_i x_i \tag{3.1.2}$$

avec $\bar{\bar{\alpha}}$ le tenseur de dilatation thermique, θ la variation de température et $\bar{\bar{\beta}}_i$ le tenseur de déformation de transformation, associée à la transformation en la variante i.

Les variables d'état du modèle sont alors $\left(\bar{\bar{\varepsilon}}, \theta, \{x_i\}_{i=1...N}\right)$. Nous choisissons de décomposer l'énergie libre spécifique ψ comme suit :

$$\psi\left(\bar{\bar{\varepsilon}}, \theta, \{x_i\}\right) = \psi_{thel}\left(\bar{\bar{\varepsilon}}, \theta, \{x_i\}\right) + \psi_{ch}\left(\theta, \{x_i\}\right) + \psi_{\text{int}\,AM}\left(\{x_i\}\right) + \psi_{\text{int}\,MM}\left(\{x_i\}\right) \tag{3.1.3}$$

avec ψ_{thel} l'énergie thermoélastique emmagasinée par le système, ψ_{ch} l'énergie associée au changement de phase austénite-martensite, ψ_{intAM} l'énergie associée aux interfaces austénite-martensite, et ψ_{intMM} l'énergie d'interaction associée à la création des interfaces entre variantes de martensite (*cf.* schéma 3.1.1).

Nous allons maintenant présenter le modèle en donnant l'expression de chacun des termes de la décomposition 3.1.3. La partie thermoélastique ne pose pas de problème majeur et s'exprime classiquement avec $\mathbf{A}$ le tenseur d'élasticité :

$$\rho.\psi_{thel} = \frac{1}{2}\left(\bar{\bar{\varepsilon}} - \bar{\bar{\alpha}}\theta - \sum_{i=1}^{N} \bar{\bar{\beta}}_i x_i\right) : \mathbf{A} : \left(\bar{\bar{\varepsilon}} - \bar{\bar{\alpha}}\theta - \sum_{i=1}^{N} \bar{\bar{\beta}}_i x_i\right) - \frac{1}{2}.\bar{\bar{\alpha}}\theta : \mathbf{A} : \bar{\bar{\alpha}}\theta - \frac{1}{2}\frac{\rho.C}{T_0}\theta^2 \tag{3.1.4}$$

Le premier terme correspond à l'énergie élastique, tandis que les deux derniers correspondent à la partie calorimétrique de l'énergie.

L'énergie de transformation ψ_{ch}, est choisie de la façon suivante :

$$\psi_{ch} = \frac{L_0}{T_0}\left(T - \tilde{A}\right)x \tag{3.1.5}$$

avec L_0 la chaleur latente associée à la transformation et $\tilde{A}$ la température de transformation, qui pour le moment s'identifie aux quatre températures de transformation (A_s, A_f, M_s, M_f)[16]. Ce type de modélisation est courant dans la littérature [Huang 98], [Siredey 99], [Sun 00], [Patoor 06]. Remarquons que l'expression de ψ_{ch} peut en partie être construite à partir d'arguments énergétiques, en se basant sur la relation de proportionnalité entre les sources de chaleur et la variation du taux de transformation trouvée expérimentalement.

L'apparition de la martensite dans l'austénite s'accompagne d'une interface austénite-martensite *A-M*. Un zoom sur cette interface est proposé sur la figure 3.1.2.a. Selon certains auteurs [Müller 01], [Lexcellent 96], [Turteltaub 06], cette interface emmagasine une énergie de surface ψ_{intAM} s'opposant à la transformation et s'expliquant par l'introduction d'une déformation locale, supposée élastique, permettant la cohérence entre les deux phases cristallines austénitique et martensitique. Cependant, dans le cadre de la théorie du plan invariant [James 00] aucune déformation élastique n'est requise pour assurer la cohérence des phases, d'où certaines propositions de modèle dépourvues d'énergie de surface [Patoor 06]. Suivant la récente remise en cause, dans certains cas particuliers, de l'universalité de cette théorie [Sun 00], et en dépit de la faible amplitude de cette énergie lorsqu'elle est estimée expérimentalement [Huang 98], [Lexcellent 96], on choisit ce terme pour ajouter un degré de liberté au modèle qui, à terme, permettra de doter le domaine de transformation d'une épaisseur.

Pour ce terme, la littérature [Müller 01], [Lexcellent 96], [Raniecki 98], [Garbry 00], [Müller 06], [Turteltaub 06] propose une expression de ψ_{intAM} du type :

$$\psi_{\text{int}\,AM} = A_\gamma.x.(1-x) \tag{3.1.6}$$

Cette fonction est représentée sur la figure 3.1.2.b, elle est en forme de cloche et peut s'interpréter physiquement comme suit. Au début de la transformation des noyaux de martensite sont noyés dans la phase austénitique et la surface des interfaces augmente avec leur fraction volumique, ce qui explique la croissance linéaire de l'énergie ψ_{intAM}. Peu à peu, ces noyaux s'agglomèrent, diminuant la surface des interfaces, pour atteindre un maximum au moment où le mélange d'austénite et de martensite est équilibré. Elle décroit à nouveau,

[16] au terme de la modélisation, on aura $A = A_f = M_s$

puisqu'on peut maintenant considérer que c'est l'austénite qui est en inclusion dans la martensite.

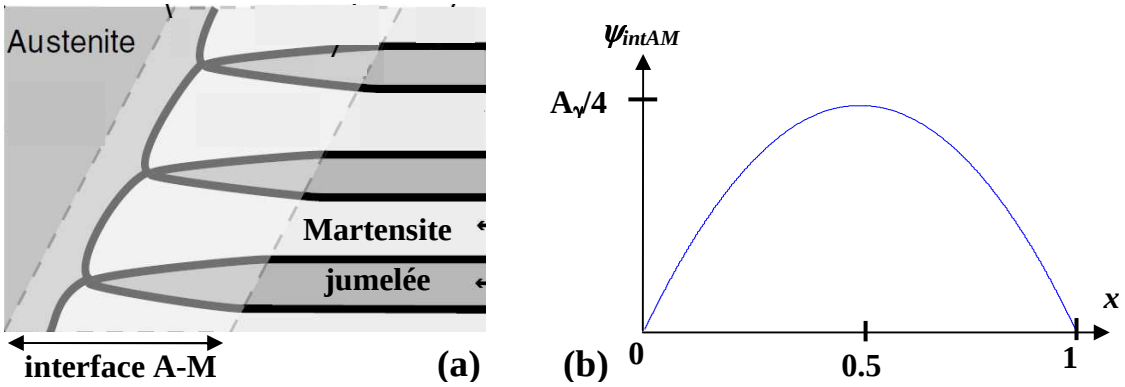


Fig. 3.1.2 – *(a) Définition de l'interface dans le cas où la martensite est jumelée [Turteltaub 06] et (b) proposition d'énergie de surface*

Dans le cadre du présent travail, on propose d'intégrer sa partie linéaire au terme ψ_{ch}. En effet ψ_{ch} possède lui aussi une composante linéaire en x (c'est $\tilde{A}.L_0/T_0$). On peut donc lui adjoindre A_γ. On renomme alors la composante linéaire totale obtenue A pour que cette construction soit 'transparente' :

$$A_\gamma x + \psi_{ch} = \underbrace{\left(A_\gamma - \tilde{A}\frac{L_0}{T_0}\right)}_{A} x + \frac{L_0}{T_0} T.x = \frac{L_0}{T_0}(T - A)x \tag{3.1.7}$$

En ce qui concerne la partie quadratique, on propose l'expression suivante :

$$\psi_{\text{int}\,AM}^{quad} = \frac{1}{2}\frac{L_0}{T_0}(A - M)x^2 \tag{3.1.8}$$

Cette expression est choisie de manière à définir l'épaisseur du domaine de transformation par les températures A et M. Nous discuterons sur ce diagramme, plus ou moins bien identifié expérimentalement, à la fin de cette section.

Pour finir, la littérature propose plusieurs formes d'énergie d'interaction entre variantes de martensite ψ_{intMM} [Gao 02]. La forme la plus généralement utilisée [Gall 99], [Lim 02], [Anand 03], [Hirsinger 03], [Peigney 06], [Liu 07] est la suivante :

$$\psi_{\text{int}\,MM} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} x_i H_{ij} x_j \tag{3.1.9}$$

avec H_{ij} la matrice d'interaction. Cette matrice se définit par des termes quasi nuls pour les variantes autoaccomodantes, et non nuls pour les autres [Siredey 99], [Entemeyer 00]. La construction de cette énergie d'interaction inter-martensitique repose sur une analyse micromécanique utilisant les outils de l'homogénéisation [Huang 98], [Siredey 99].

Dans le cadre de ce manuscrit, on considère qu'une seule variante se développe au cours de la transformation (σ-induite). Par conséquent, le dernier terme d'interaction ψ_{intMM} sera supposé nul. Pour résumer, la forme de l'énergie libre du modèle proposé est :

$$\rho.\psi = \begin{cases} \frac{1}{2}\left(\bar{\bar{\varepsilon}} - \bar{\bar{\alpha}}\theta - \sum_{i=1}^{N} \bar{\bar{\beta}}_i x_i\right) : \mathbf{A} : \left(\bar{\bar{\varepsilon}} - \bar{\bar{\alpha}}\theta - \sum_{i=1}^{N} \bar{\bar{\beta}}_i x_i\right) - \frac{1}{2}.\bar{\bar{\alpha}}\theta : \mathbf{A} : \bar{\bar{\alpha}}\theta \\ \quad - \frac{1}{2}\frac{\rho.C}{T_0}\theta^2 + \frac{\rho L_0}{T_0}(T - A)x + \frac{1}{2}\frac{\rho L_0}{T_0}(A - M)x^2 + I_C(x) \end{cases} \tag{3.1.10}$$

où $I_C(x)$ est la fonction indicatrice de x [Frémond 02] qui traduit mathématiquement les liaisons internes de la relation 3.1.1 :

$$I_C(x) = I_C\left(\{x_i\}_{i=1...N}\right) = \begin{cases} 0 & \{x_i\} \in C \\ +\infty & \{x_i\} \notin C \end{cases} \qquad C = \left\{\{x_i\}_{i=1...N} / \forall i, x_i \geq 0, x \leq 0\right\} \tag{3.1.11}$$

3.1.2 Pseudo-potentiel de dissipation

En ce qui concerne le pseudo-potentiel de dissipation, un certain nombre de modèles [Entemeyer 00], [Auricchio 04] associent à la transformation le pseudo-potentiel suivant :

$$\varphi_{ch} = \sum_{i=1}^{N} F_i^D \dot{x}_i^{\,2} \tag{3.1.12}$$

avec F_i^D la force thermodynamique associé à la variante i. Cette dissipation s'interprète comme une interaction des interfaces *A-M* et *M-M* avec les défauts (dislocations, précipités, joints de grain…) freinant la propagation des interfaces et échauffant le matériau. Une justification théorique de l'expression de φ_{ch} est développée dans [Patoor 06], bien que se plaçant dans le cas de processus isothermes.

Or nous avons vu que la dissipation était négligeable par rapport aux sources de couplage thermomécanique associées à la transformation de phase. Nous avons donc décidé de ne pas tenir compte ici de la dissipation intrinsèque. Par conséquent, le pseudo-potentiel de dissipation se réduira à sa partie thermique :

$$\varphi\left(\dot{\bar{\bar{\varepsilon}}},\{x_i\};\vec{q};T\right)=\varphi_{th}=\frac{1}{2kT}\vec{q}^{\,2} \tag{3.1.13}$$

3.1.3 Equations d'état – équations d'évolution – équation de la chaleur

Ayant connaissance de l'énergie libre et du pseudo-potentiel de dissipation, on peut maintenant établir les équations d'état (éq.2.1.6 à 2.1.8) et d'évolution (éq.2.1.10 à 2.1.12). On peut ainsi montrer que la contrainte irréversible $\bar{\bar{\sigma}}^{ir}$ est nulle tandis que la contrainte réversible $\bar{\bar{\sigma}}^{r}$ suit la loi de Hooke :

$$\left.\begin{aligned}\bar{\bar{\sigma}}^{r}&=\rho\frac{\partial\psi}{\partial\bar{\bar{\varepsilon}}}=\mathbf{A}:\bar{\bar{\varepsilon}}_{el}\\ \bar{\bar{\sigma}}^{ir}&=\frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\bar{\bar{\varepsilon}}}}=0\end{aligned}\right\}\quad\Rightarrow\quad\bar{\bar{\sigma}}=\mathbf{A}:\bar{\bar{\varepsilon}}_{el} \tag{3.1.14}$$ [17]

Le pseudo-potentiel de dissipation permet de retrouver la loi de diffusion de la chaleur retenue, ici la loi de Fourier (éq.2.2.21).

$$-k\frac{\overrightarrow{\mathrm{grad}}T}{T}=\frac{\partial\varphi}{\partial\vec{q}}=-\frac{\vec{q}}{T} \tag{3.1.15}$$

L'expression de l'entropie comporte différentes contributions avec, dans l'ordre, celles issues du couplage thermoélastique, celles liées à l'absorption de chaleur par le matériau et enfin celle associée au changement cristallographique accompagnant la transformation :

$$s=-\rho\frac{\partial\psi}{\partial\theta}=\bar{\bar{\alpha}}:\bar{\bar{\sigma}}+\frac{\rho C}{T_0}\theta-\frac{\rho L_0}{T_0}x \tag{3.1.16}$$

La variable conjuguée de x_i, notée A_{xi}, se scinde, successivement, en une partie associée au couplage mécanique, une partie issue de la transformation, et une partie liée au couplage interne. Or nous avons utilisé la fonction indicatrice qui doit être dérivée. Pour ce faire on définit le sous-différentiel associé à l'indicatrice de x, notée $\partial_{x_i}I_C(x)$. Pour plus de précision sur la signification mathématique du sous-différentiel consulter [Frémond 02], [Balandraud 00]. On a donc :

$$A_{xi}=-\bar{\bar{\beta}}_i:\bar{\bar{\sigma}}+\frac{\rho L_0}{T_0}(\theta+T_0-A)+\frac{\rho L_0}{T_0}(A-M)x_i\in\partial_{x_i}I_C(x) \tag{3.1.17}$$

L'équation de la chaleur (éq.2.2.24) associée au modèle est alors :

[17] Par commodité cette expression 3.1.14 sera utilisée implicitement par la suite, sachant qu'on peut toujours réexprimer la contrainte en fonction de la déformation élastique, et par suite en fonction de $\left(\theta,\bar{\bar{E}},x\right)$ (éq.3.1.2)…

$$\rho C\dot{\theta} - k\Delta T = -T.\overline{\overline{\alpha}} : \mathbf{A} : \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}} + T\frac{\rho L_0}{T_0}.\dot{x} \tag{3.1.18}$$

Elle se compose d'une part d'une source de chaleur thermoélastique $-T.\overline{\overline{\alpha}} : \mathbf{A} : \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}$ et d'autre part d'une source de chaleur de transformation $T\frac{\rho L_0}{T_0}.\dot{x}$. Lors de la transformation, la première est négligeable devant la seconde. Par conséquent, les sources de chaleur développées au cours de la transformation directe ($\dot{x}_i > 0$) sont bien positives et, réciproquement, lors de la transformation inverse ($\dot{x}_i < 0$) sont négatives. De plus, les vitesses de déformation thermoélastique et élastique[18] apportent une faible contribution à la vitesse de déformation $\dot{\overline{\overline{\varepsilon}}}$. On aura alors, pour un cas univariant :

$$\dot{\overline{\overline{\varepsilon}}} \approx \overline{\overline{\beta}}_1\dot{x}_1 = \overline{\overline{\beta}}_1\dot{x} \qquad \Rightarrow \qquad \rho C\dot{\theta} - k\Delta T \approx T\frac{\rho L_0}{T_0}\overline{\overline{\beta}}_1^{-1} : \dot{\overline{\overline{\varepsilon}}} \tag{3.1.19}$$

On retrouve le terme de proportionnalité ξ^{mes} liant les sources de chaleur aux vitesses de déformations, qui a pu être identifié expérimentalement (*cf.* section 2.3.5.1).

3.1.4 Diagramme de transformation

La nullité de la dissipation intrinsèque (*cf.* éq.3.1.13) se traduit par la nullité des forces thermodynamiques X_{x_i} . On a alors la relation suivante :

$$X_{x_i} = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{x}_i} = 0 = -A_{x_i} \text{ dès que l'on peut avoir } \dot{x}_i \neq 0 \tag{3.1.20}$$

Cette condition permet de définir dans l'espace des variables d'état (ou des variables conjuguées) le domaine de transition, domaine à l'intérieur duquel les phases peuvent coexister. Dans le cas d'une seule variante *i=1* et si $x_1 \in]0,1[$, la relation 3.1.20 s'exprime comme :

$$\overline{\overline{\beta}}_1 : \overline{\overline{\sigma}} = \frac{\rho L_0}{T_0}(T - A) + \frac{\rho L_0}{T_0}(A - M)x_1 \tag{3.1.21}$$

Le diagramme de transformation peut alors être tracé dans l'espace $\overline{\overline{\beta}}_1 : \overline{\overline{\sigma}}$ – T :

[18] En effet, $\overline{\overline{\varepsilon}}_{el} = \mathbf{A}^{-1}\overline{\overline{\sigma}}$ (éq.3.1.2, éq.3.1.14), et on a observé expérimentalement que durant la transformation $\dot{\overline{\overline{\sigma}}}$ est très faible.

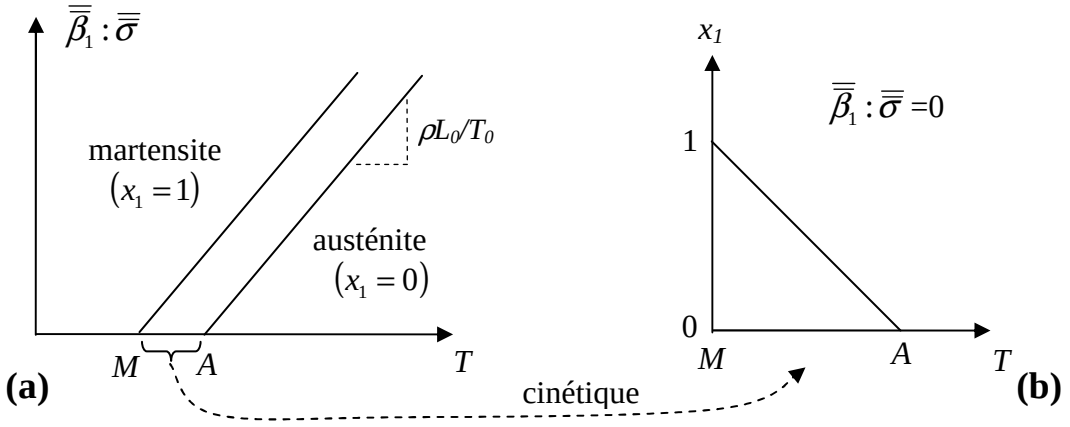


Fig. 3.1.3 – *(a) Diagramme de transformation de phase et (b) cinétique de transformation*

Ce diagramme correspond à celui proposé par la littérature (*cf.* fig.1.1.9) avec cependant la simplification au cas où $A_s = M_f$ et $A_f = M_s$. La pente de la ligne de transition, (éq.3.1.21), dépend entièrement de la contribution ψ_{ch} du potentiel énergie libre ψ. L'épaisseur du domaine est introduite dans notre modèle par l'intermédiaire du potentiel $\psi^{quad}_{\text{int } AM}$ (éq.3.1.8), qui apporte la seconde contribution à l'équation 3.1.21. La cinétique de transformation $x_1(\overline{\overline{\sigma}}, T)$ est alors totalement définie par l'équation 3.1.21. Elle s'écrit de façon algébrique. Son origine se trouve dans la nullité de la dissipation qui nécessite que la force thermodynamique associée à la production de martensite soit nulle. Par exemple, à contrainte nulle, elle évoluera linéairement avec la température comme l'illustre la figure 3.1.3.b. Cette construction est à confronter à celle proposée par [Patoor 06] pour qui l'épaisseur du domaine est la conséquence de phénomènes dissipatifs par l'introduction d'une force thermodynamique « critique » au-delà de laquelle commence la transformation.

Le choix adopté dans ce travail d'une dissipation nulle est conforme aux observations expérimentales et permettra au travers des simulations à venir d'analyser sans ambigüité l'importance des phénomènes de couplage sur le comportement mécanique des AMF. Notons enfin que l'ajout d'une dissipation ne pose conceptuellement aucun problème. Elle a été négligée ici puisque d'un autre ordre de grandeur par rapport aux énergies de couplages. Cependant il a été montré qu'une faible dissipation pouvait rendre compte de certains effets de vitesse avec notamment le mouvement des lignes du domaine de transformation. Une étude expérimentale plus poussée serait à réaliser pour confirmer ce fait, en jouant sur une gamme plus large de vitesses de déformation.

Pour en finir avec le domaine de transition, on se propose de discuter de la valeur de la chaleur latente proposée par la littérature. Cette chaleur latente peut être à la fois mesurée par DSC ou encore identifiée indirectement en se basant sur notre modèle. En effet, la pente du

domaine de transition K (éq.3.1.21), mais encore le coefficient de proportionnalité ξ^{mes} (éq.3.1.19), sont tous deux reliés à la chaleur latente :

$$K = \frac{\rho L_0}{T_0 \beta_{yy}} \qquad \xi^{mes} = T \frac{\rho L_0}{T_0 \beta_{yy}} \tag{3.1.22}$$

avec β_{yy} la composante suivant l'axe de traction du tenseur de transformation $\overline{\overline{\beta}}_1$.

Les paramètres matériaux retenus pour le modèle correspondent à ceux proposés au chapitre précédent, et sont rappelés dans le tableau 3.2.1, plus bas dans ce texte. La déformation β_{yy} associée à la transformation est posée égale à 0.09. Son estimation est issue des essais expérimentaux (**1-9**) et (**4-13**) pour lesquels la sollicitation est suffisamment grande pour assurer la fin de la transformation. Celle-ci est identifiée par la fin de l'élévation de la température que l'on identifie à la fin de la transformation (retour à l'équilibre thermique de l'éprouvette).

Origine	L (J.kg^{-1})	ξ^{mes} (MPa)	K (MPa.K^{-1})
[Nimésis]	**7200**	584	1.95
DSC	**1710**	138.7	0.46
(**1-3**)	42534	3450	**11.5**
(**1-2**)	81369	6600	**22**
[Cingolani 99]	7767	630	**2.1**
[Panoskaltsis 04]	7200	584	**1.95**
(**1-3**)	4808	**390**	1.3
(**4-12**)	3846.6	**312**	1.04
(**4-12**)	4389	**356**	1.19

Tab. 3.1.1 – *Comparaison des chaleurs latentes proposées par la littérature et estimées expérimentalement*

Le tableau 3.1.1 récapitule ces données, avec les résultats expérimentaux du chapitre précédent et des données issues de la littérature. Les valeurs en gras dans le tableau correspondent à la donnée brute issue de l'expérience ou de la littérature, les autres colonnes en sont déduites grâce aux deux relations 3.1.22. Par exemple, la troisième et quatrième ligne du tableau correspondent au résultat issu de la mesure de la pente du domaine de transformation présentée dans la section 2.3.4.3. Ou encore, les trois dernières lignes correspondent aux mesures du coefficient de proportionnalité ξ^{mes} réalisé à la section 2.3.5.1. On constate une grande disparité des résultats qui est certainement due en partie aux différentes méthodes utilisées pour les obtenir. En particulier, la discussion de l'estimation de la pente du diagramme de transformation, menée dans l'étude expérimentale du présent

manuscrit, appelle à la prudence, vu les écarts obtenus pour une même éprouvette (essai (**1-2**) et (**1-3**)). La littérature semble s'accorder sur une valeur d'environ 7000-8000 J.kg^{-1} pour la chaleur latente de transformation. Cependant, on préfèrera la valeur déduite de l'étude expérimentale locale qui a permis d'estimer le coefficient de proportionnalité ξ^{mes} du modèle proposé. En effet cette mesure est la plus fiable à nos yeux. Elle situe la chaleur latente aux alentours de 4000 J.kg^{-1}.

3.2 Premiers résultats et discussion

Le modèle va maintenant être implémenté, puis comparé à l'expérience. Cette confrontation sera réalisée en deux étapes, parallèles à la progression proposée dans l'étude expérimentale. La première s'intéressera à l'influence des fuites thermiques sur la réponse du matériau vu sa forte thermo-sensibilité (couplage thermomécanique fort). Cette première étude permettra de confirmer l'interprétation proposée expérimentalement à la sous-section 2.3.3.3 « Effets temporels sur le comportement ». La seconde étape s'intéressera à la capacité du modèle à reproduire les effets de structure observés expérimentalement avec la nucléation et la propagation d'un front de changement de phase.

Les buts poursuivis dans cette étude sont :

- de confirmer la pertinence du modèle en confrontant ses prédictions aux résultats expérimentaux proposés au chapitre précédent,
- de montrer qu'en l'absence de dissipation intrinsèque, le modèle permet de générer des boucles d'hystérésis,
- de mettre à l'épreuve le modèle dans sa capacité à générer un front de changement de phase.

Dans ce qui suit, on présentera brièvement le travail d'implémentation du modèle, réalisé en collaboration avec L. Stainier, dans le code de calcul par élément finis *Matlib*. Le modèle a également été implémenté dans le code de calcul commercial *Comsol Multiphysics*® afin de contrôler la qualité des schémas numériques d'intégration retenus. Ensuite, on précisera les paramètres matériaux retenus pour les calculs et on explicitera le protocole suivi pour estimer les paramètres d'échanges conducto-convectifs h_i avec l'extérieur. On passera alors à la première étape de la confrontation simulation-expérimentation, avec la réponse d'un élément de volume. Puis, on débutera la seconde étape en validant la résolution du problème de structure par le code *Matlib*, en confrontant les résultats obtenus par le code de calcul *Matlib* avec ceux obtenus par le code de calcul *Comsol*. La dernière étape consistera à comparer la réponse d'une éprouvette numérique à l'essai (**1-3**), pour une géométrie d'éprouvette et un chargement semblables.

3.2.1 Implémentation

Pour simplifier au maximum cette première approche numérique, nous nous sommes restreint au cas d'un tenseur élastique $\mathbf{A}$ isotrope, avec E le module d'Young et ν le coefficient de poisson :

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_{el} = \mathbf{A}^{-1}\bar{\bar{\sigma}} = \frac{1+\nu}{E}\bar{\bar{\sigma}} - \frac{\nu}{E}tr(\bar{\bar{\sigma}}).\bar{\bar{I}} \tag{3.2.1}$$

Le travail numérique et informatique d'implémentation a été réalisé dans le cadre d'une collaboration avec Laurent Stainier. Ma contribution a surtout pris place dans la discussion du modèle, puis le test et l'utilisation de la loi de comportement implémentée dans la *Matlib*. La *Matlib* est une bibliothèque portable de modèles constitutifs dédiés au comportement thermomécanique des matériaux solides. Elle se base sur l'expression du problème thermomécanique dissipatif sous forme variationnelle [Stainier 06]. De manière générale la formulation variationnelle consiste à réécrire un système d'équations différentielles partielles sous la forme d'une formulation faible, qui peut, sous certaines conditions, s'écrire comme un problème de minimisation [Raviart 93], [Lions 85]. La formulation variationnelle équivalente au problème thermomécanique est ensuite réécrite sous forme incrémentale [Yang 06], avant d'être implémentée dans un code aux éléments finis associé à une bibliothèque de lois de comportement, ici la *Matlib* [Stainier 03]. Les particularités de la bibliothèque de loi de comportement *Matlib* est d'être portable, c'est-à-dire qu'elle est indépendante d'un code aux éléments finis donné. De plus elle est monolithique, c'est-à-dire que la résolution mécanique et thermique est réalisée de manière couplée, et s'oppose à des approches alternées. La seconde implémentation utilise le code commercial *Comsol Mutiphysics*®, lui aussi utilisant un schéma de résolution monolithique. L'implémentation consiste à écrire le problème sous la forme des équations 2.1.17, 2.1.18 ainsi que l'équation d'équilibre : $div.\bar{\bar{\sigma}} = \vec{0}$ et les conditions aux limites. Le problème, qui est ensuite résolu par le système de manière «transparente» pour l'utilisateur.

3.2.2 Paramètres du modèle retenus pour les simulations

Les paramètres matériaux retenus correspondent à ceux du tableau 2.3.2 à l'exception du module d'Young choisi égal à 10 GPa, valeur intermédiaire entre le module d'Young proposé par la littérature et celui identifié sur la réponse macroscopique fig.2.3.9. Le tableau 3.2.1 regroupe ces données.

E (GPa)	ν	α (K^{-1})	ρ ($kg.m^{-3}$)	C ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	k ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	T_0 (K)
10	0.3	$1.8.10^{-5}$	7300	390	75	300

Tab.3.2.1 – *Constantes thermophysiques retenues pour les simulations (mécaniques et thermiques)*

En ce qui concerne les paramètres proprement liés à la transformation de phase, ils sont regroupés dans le tableau 3.2.2. Le choix de β_{yy} et de L_0 a déjà été discuté plus haut. En ce qui concerne la température *A*, elle est choisie en fonction de la contrainte à laquelle on souhaite voir la transformation commencer, la thermoélasticité modifiant peu la température de l'éprouvette avant la transformation. Selon l'équation 3.1.20, on a :

$$A = T - \frac{T_0}{\rho . L_0} \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{\beta}}_1 \tag{3.2.2}$$

Ensuite, trois cas sont envisagés :

- *M* = *A*, la taille du domaine de transformation est nulle,
- M = *A* - 1°C, le domaine de transformation est étroit, il s'apparente au domaine de transformation identifié au cours de l'essai (**1-3**). Remarquons cependant que la pente *K* choisie pour les simulations ne correspond pas à celle identifiée expérimentalement.
- *M* = *A* - 30°C, le domaine de transformation est large, il s'approche de ceux que proposent la littérature et le fournisseur de l'AMF CuAlBe monocristallin étudié ici.

L'objectif des premières simulations que nous allons présenter est d'étudier l'influence des effets de structure liés à la diffusion de la chaleur, pour les trois cas exposés ci-dessus. Cependant on rappelle que la taille du domaine de transformation est directement reliée au terme d'énergie de surface ψ_{intAM}. Or, on l'a déjà dit, cette énergie est faible, voir négligeable. Or pour le choix du domaine de transformation étroit ou large, le coefficient $A_\gamma = L_0 (A - M)/(2.T_0)$ associé à cette énergie est loin d'être négligeable. Il vaut respectivement 14.6 MPa et 438 MPa. La littérature propose plutôt 6.5 MPa [Rainecki 98], 4 MPa [Turteltaub 06] voir 0.181-0.083 MPa [Lexcellent 96], *etc.*

		Nul	Etroit		Large	
β_{yy}	L_0 (J.kg^{-1})	*M*=*A* (K)	*M* (K)	*A* (K)	*M* (K)	*A* (K)
0.08	4000	254	*A* - 1	254	*A* - 30	254

Tab.3.2.2 – *Constantes thermophysiques (liées à la transformation) pour les trois cas d'étude*

Pour finir de paramétrer la simulation, les constantes de fuites pour les essais sont h_{0D} dans le cas d'un élément de volume, et dans le cas tridimensionnel h_2 la constante de fuite

associée à la paroi à proximité des mors, et h_1 celle des autres surfaces. Leurs valeurs sont les suivantes :

h_{0D} (W.m^{-2}.K^{-1})	h_1 (W.m^{-2}.K^{-1})	h_2 (W.m^{-2}.K^{-1})
27.23	6	1500

Tab.3.2.3 – *Constantes de fuites par conducto-convection*

Elles ont étés identifiées à partir de la formule de la constante de temps τ_{th}^{0D} présentée dans la section 2.2.4.2 et rappelée ici :

$$\tau_{th}^{0D} = \frac{\rho C}{2} \frac{e.l.L}{\left(h_1(e+L).l + h_2.e.L\right)} \tag{3.2.3}$$

La constante τ_{th}^{0D} a été identifiée expérimentalement à 40 s et les dimensions de l'éprouvette sont indiquées dans le tableau 2.3.1. Dans le cas d'un élément de volume où $h_1 = h_2 = h_{0D}$ cette estimation est immédiate. Par contre, dans le cas tridimensionnel, on suppose que h_1 est égal à 6 W.m^{-2}.K^{-1} (air au repos) ce qui permet de déduire h_2 de l'équation 3.2.3. Ces valeurs ont été vérifiées numériquement en comparant une simulation de retour à l'équilibre thermique avec la réponse expérimentale équivalente.

3.2.3 Comportement d'un élément de volume

L'objectif poursuivi maintenant est de s'assurer que le modèle proposé permet : *(i)* de retrouver la non linéarité de la réponse mécanique et le phénomène d'hystérésis sans l'intervention de dissipation, *(ii-iii)* de retrouver une dépendance en temps du comportement associée aux échanges thermiques. Dans ce but, trois situations classiques ont été modélisées : *(a)* un cycle de charge-décharge sous déplacement imposé, *(b)* un essai comportant un palier de relaxation, *(c)* des essais de charge-décharge à différentes vitesses de sollicitation et pour différents coefficients d'échange h_{0D}. Dans ces trois cas, on a choisi de travailler avec les températures de transformation *A* et *M* associées au domaine de transformation large (*M* = *A* - 30°C).

3.2.3.1 Cycle de charge décharge

La sollicitation imposée à l'élément de volume se compose de deux cycles charge-décharge, réalisés à une vitesse de déformation constante de 7.10^{-4} s^{-1} (similaire à l'essai (**1-3**)). Le trajet dans l'espace thermomécanique est représenté sur la figure 3.2.1, avec dans

l'ordre chronologique, les temps associés au premier cycle t_0-t_1-t_2 et ceux associés au second cycle t_2-t_3-t_4. On observe que ce trajet a la même apparence que celui de l'essai (**1-3**) (*cf.* fig.2.3.8). On retrouve bien un chemin différent lors de la première charge (t_0-t_1) et lors de la seconde (t_2-t_3). Cette différence s'explique par le déséquilibre thermique présent au début du second cycle. Les projections du trajet thermomécanique dans le plan mécanique et le plan $\bar{\sigma}_{yy} - \bar{\theta}$ sont également reportées sur la figure 3.2.1, en plus clair. L'apparence de ces projections est qualitativement la même que celles obtenues expérimentalement.

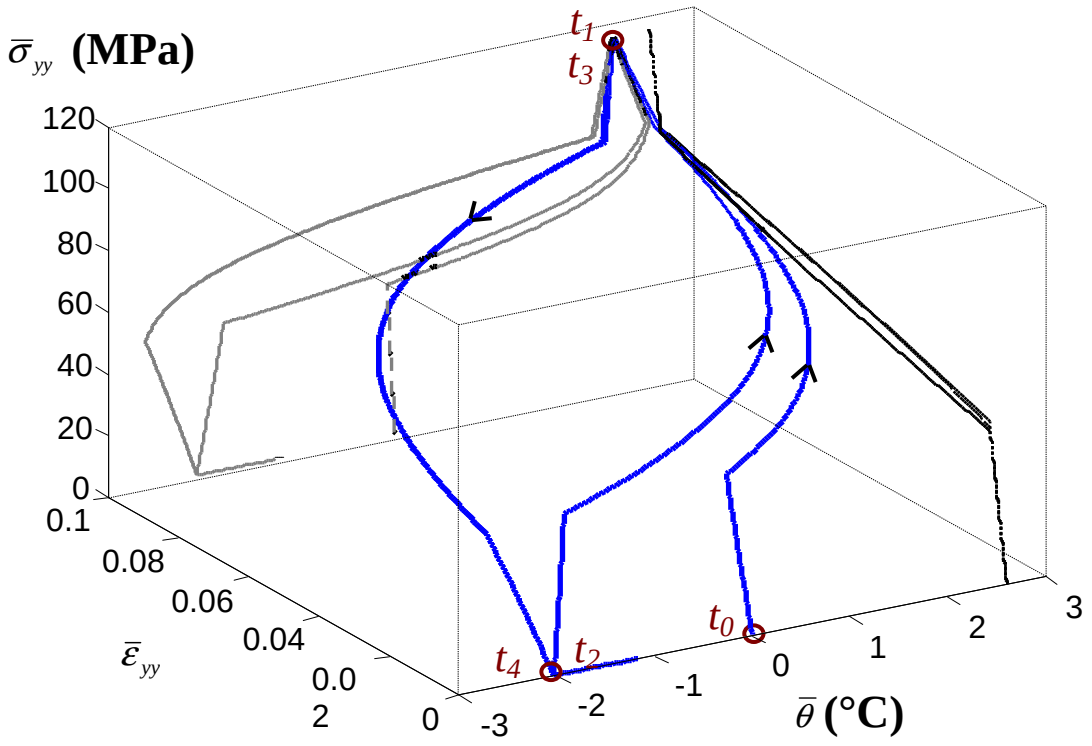


Fig. 3.2.1 – *Trajet dans l'espace thermomécanique d'un essai de charge décharge*

On va se concentrer maintenant sur la réponse mécanique. Elle est reportée sur la figure 3.2.2. La réponse est non linéaire, sans adoucissement mécanique, comme attendu. Lorsque la transformation est finie, le comportement est à nouveau thermoélastique, avec une pente identique à celle de la phase austénitique. Sur l'ensemble du cycle, on observe bien la création d'une boucle d'hystérésis, uniquement due aux fuites thermiques. Il convient de noter que la taille de cette hystérésis reste plutôt faible, pour les paramètres retenus dans ce modèle et pour un élément de volume matériel. On rappelle toutefois que toute modification des paramètres conduisant à amplifier à la fois les sources de couplage et les fuites de chaleur, doit amplifier du même coup la taille de la boucle d'hystérésis (éq.2.1.16).

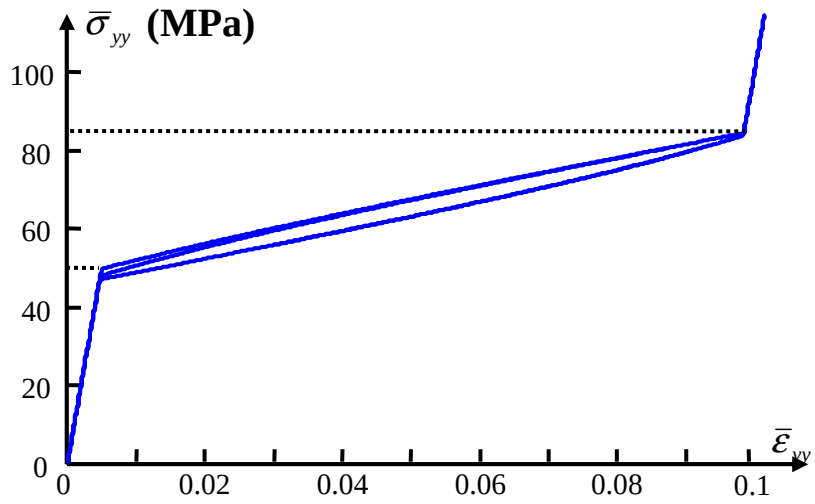


***Fig. 3.2.2** – Réponse mécanique et hystérésis*

3.2.3.2 Essai avec palier de relaxation

On va maintenant s'intéresser aux effets temporels sur le comportement. Le second essai correspond à un essai de charge-maintien-décharge piloté en déformation à une vitesse de 7.10^{-4} s^{-1}. Ce chargement est représenté en trait continu sur la figure 3.2.3.a, avec la réponse en température superposée en pointillé. On constate que durant le maintien, les fuites entrainent un début de retour à l'équilibre thermique. Au niveau mécanique cette décroissance thermique a pour conséquence une baisse de la contrainte (fig.3.2.3.b) qui s'explique par l'intermédiaire du diagramme de transformation. C'est le même phénomène qui a été observé au cours de l'essai (**5-6**) (*cf.* fig 2.3.13 et explications attenantes). La relaxation s'explique donc ici par le simple fait du couplage thermomécanique.

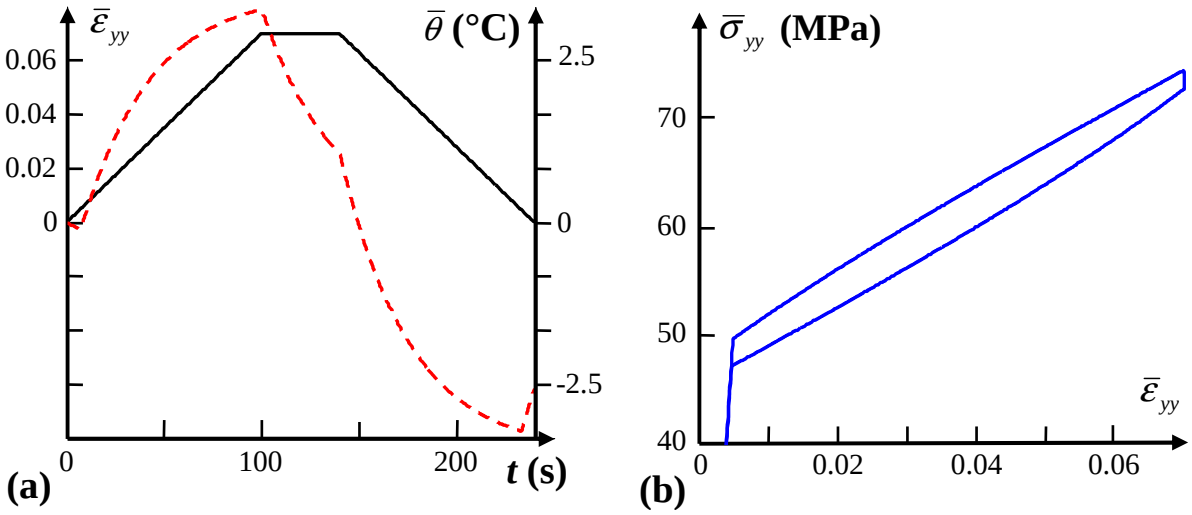


***Fig. 3.2.3** – Essai de relaxation : (a) chargement et évolution thermique (b) réponse mécanique*

3.2.3.3 Influence de la vitesse de sollicitation et du coefficient d'échange

De manière à explorer l'influence de la vitesse de sollicitation sur le comportement, deux essais de charge-décharge ont été réalisés, respectivement, à des vitesses de 7.10^{-5} s^{-1} et 7.10^{-3} s^{-1}. Leurs réponses dans l'espace mécanique sont reportées sur la figure 3.2.4, avec en trait plein l'essai rapide, et en pointillé l'essai lent. On retrouve le « durcissement » avec l'augmentation de la vitesse de sollicitation constaté expérimentalement lors de la comparaison des essais (**4-5**) et (**4-6**) (*cf.* fig.2.3.14).

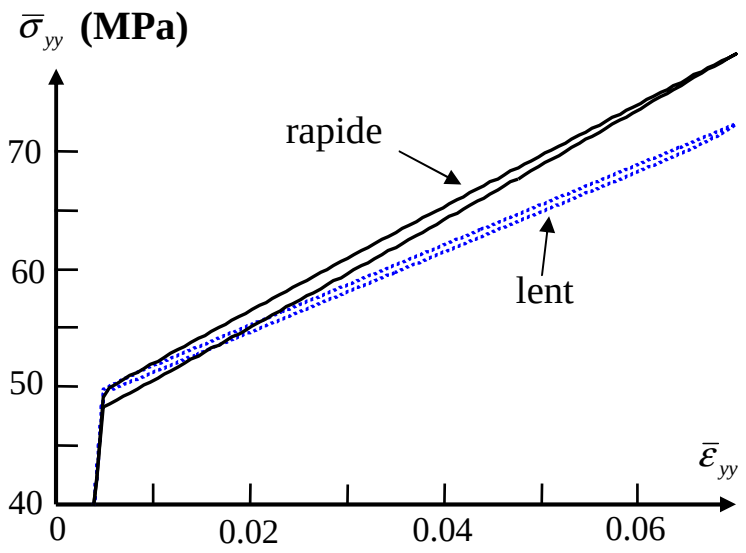


Fig. 3.2.4 – *Essai pour différente vitesse de sollicitation*

Afin de mieux comprendre l'origine de ce phénomène on représente sur la figure 3.2.5 les trajets de ces deux essais dans l'espace thermomécanique. L'essai rapide s'accompagne d'une élévation de la température importante, ce qui dans le diagramme de transformation a pour conséquence d'augmenter la contrainte nécessaire à la poursuite de la transformation, d'où le « durcissement » observé.

Cet échauffement plus important lors de l'essai rapide s'explique si l'on tient compte du rôle des fuites thermiques. Pour fixer les idées on compare ces deux essais aux deux cas limites suivants : le cas isotherme $(h_{0D} \to \infty)$ et le cas adiabatique $(h_{0D} = 0)$. Le chemin thermomécanique pour ces deux cas limites est identique lors de la charge et de la décharge. De plus, il n'y aucun phénomène temporel, donc aucun phénomène d'hystérésis puisque le temps d'équilibrage est soit nul soit infini. L'essai rapide tend vers le cas adiabatique : les échanges ont tendance à ne pas avoir le temps de se faire et l'échantillon s'échauffe sous l'effet des sources de chaleur accompagnant la transformation, tandis que le cas de l'essai lent

s'approche d'une transformation isotherme : les échanges ont le temps de contenir l'élévation de température associée à la transformation.

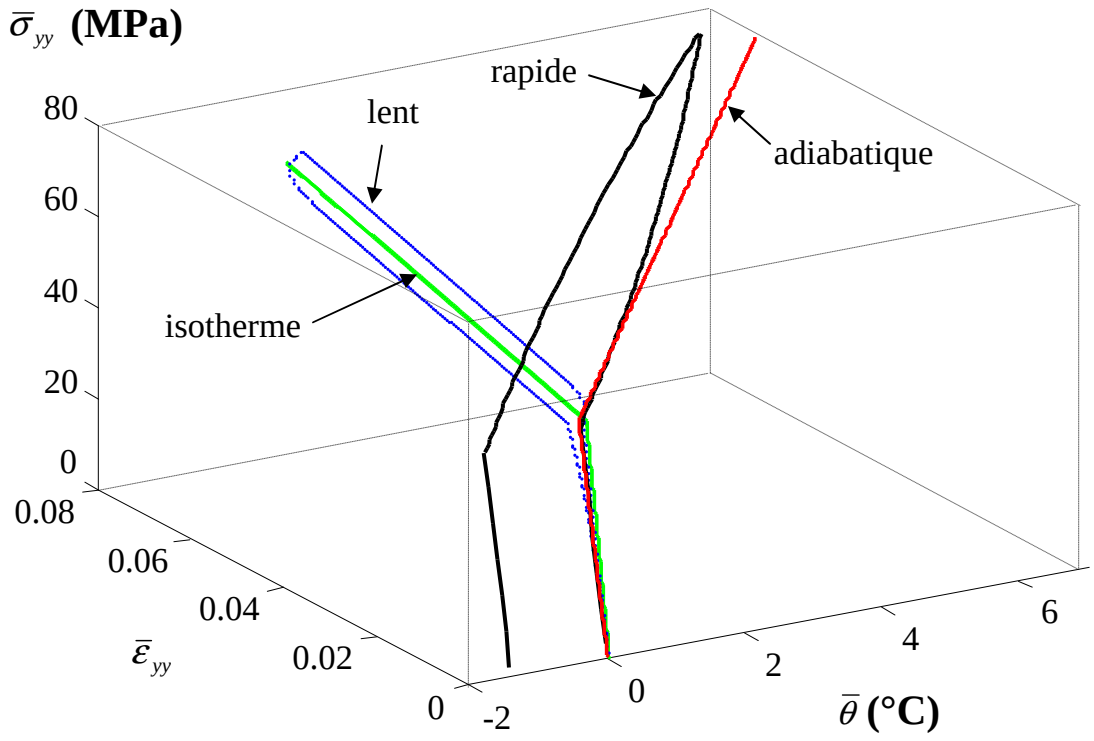


Fig. 3.2.5 – *Influence de la vitesse de sollicitation sur le chemin thermomécanique comparé à aux cas d'échange limites : isotherme et adiabatique*

3.3 Etude du comportement de structures

Dans cette seconde partie on présente des résultats de simulation obtenus sur des structures tridimensionnelles. La première structure étudiée est une éprouvette munie de congés à ses deux extrémités. Cette géométrie présente la particularité de concentrer les contraintes sur la partie centrale de l'éprouvette. L'idée derrière ce premier choix est de favoriser l'apparition du front de changement de phase par l'intermédiaire de ce gradient de contrainte d'origine géométrique. Cet exemple fournit l'occasion d'éprouver la performance de l'implémentation pour les deux codes de calcul. Dans un second temps, des essais sur une géométrie plus proche de l'éprouvette expérimentale seront ensuite simulés. Cette simulation sera confrontée aux résultats expérimentaux afin de mettre en avant les performances et les limitations du modèle proposé.

3.3.1 Comparaison des deux codes de calcul par éléments finis

3.3.1.1 Conditions d'essai

La première géométrie est une éprouvette d'essai de traction munie de congés de raccordement. La figure 3.3.1 représente un huitième de cette éprouvette, supposée parfaitement symétrique, avec les cotes de l'éprouvette en mm reportées sur la figure. Il convient toutefois de rappeler que si les hypothèses sur la symétrie du problème conduisent à une réduction très forte de la taille du problème et du coût des calculs, elles interdisent, par construction, toute reconstruction d'une solution hétérogène non symétrique sur l'échantillon complet. Les maillages utilisés pour les deux codes sont reportés sur la figure 3.3.1. Ils se composent tous d'éléments hexaédriques du premier ordre et ils sont très similaires. Deux points A et B, sont indiqués sur la figure. Ces points vont permettre d'étudier la réponse locale de l'éprouvette.

Les paramètres du modèle utilisés pour cette simulation sont différents de ceux proposés précédemment. Ils sont reportés dans le tableau 3.3.1. Le domaine de transformation est réduit à une ligne, dont la pente K est de 2.89 MPa.K^{-1}. Les autres différences notables sont le module d'Young, beaucoup plus important ici, ainsi que le coefficient de fuites dans le mors h_2, ici égale à celui des surfaces en contact avec l'air.

E (GPa)	ν	α (K^{-1})	ρ (kg.m^{-3})	C (J.kg^{-1}.K^{-1})	k (W.m^{-1}.K^{-1})	T_0 (K)	β_{yy}= -β_{xx}	L_0 (J.kg^{-1})	M (K)	A (K)	$h_1 = h_2$ (W.m^{-2}.K^{-1})
85	0.3	1.9.10^{-5}	7800	390	120	315	0.06	7000	300	300	5

Tab.3.3.1 – *Paramètres du modèle*

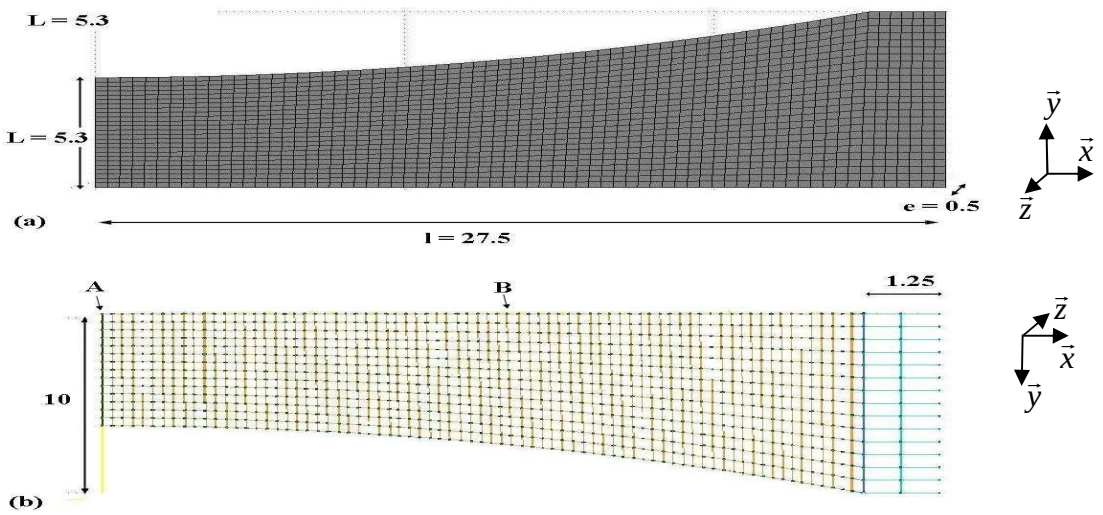


***Fig.3.3.1** – Géométrie et maillage d'un huitième de l'éprouvette (a) Comsol (b) Matlib*

Les conditions aux limites du huitième d'éprouvette sont définies sur :

- la surface $x = l = 27{,}5$ mm : déplacement imposé selon x, à une vitesse de 0.0167 mm.s^{-1}, le coefficient d'échange est h_2,
- la surface $x = 0$: déplacement nul selon x, aucun échange thermique,
- la surface $y = 0$: déplacement nul selon y, aucun échange thermique,
- la surface $z = 0$: déplacement nul selon z, aucun échange thermique,
- les 3 autres surfaces frontières : échange thermique avec pour coefficient h_1.

3.3.1.2 Comparaison des réponses locales

De manière à comparer la résolution numérique des deux codes de calcul, on propose de confronter la réponse des points *A* et *B*. La figure 3.3.2 représente l'évolution du taux de martensite pour ces deux points et pour le code de calcul utilisant la Matlib en trait plein, et pour le code Comsol en pointillé.

Les deux codes de calculs présentent des résultats relativement similaires et permettent d'obtenir un front de changement de phase. En effet, le taux de martensite augmente progressivement au centre *A* de l'éprouvette, et n'atteint le point *B* qu'un certain temps après la fin de la transformation du point *A*. Les temps t_1 = 10 s et t_2 = 50 s indiqués sur la figure serviront dans la suite de la comparaison. Si on regarde maintenant la réponse mécanique pour les points *A* et *B*, figure 3.3.3, on constate que les réponses sont très différentes. Le point *A* possède un plateau au cours de la transformation, incliné selon une pente douce. Puis lorsque la transformation est accomplie, la réponse redevient élastique (temps t_2).

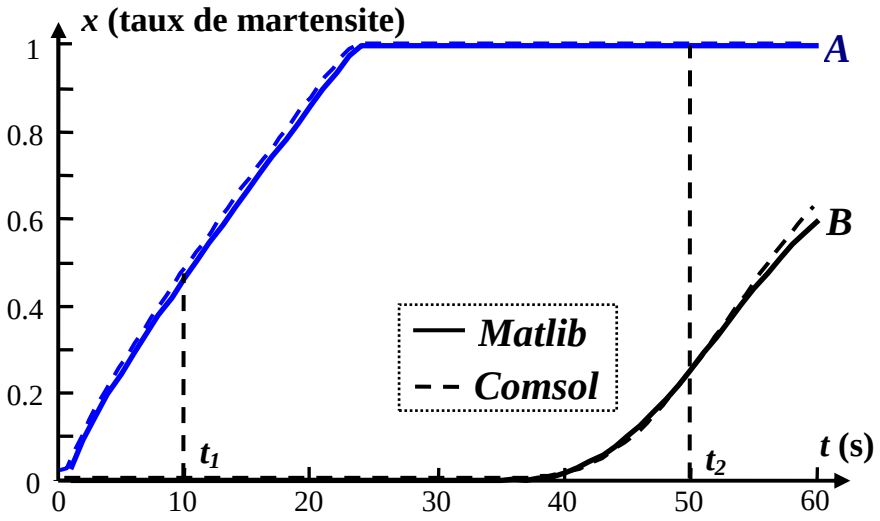


***Fig.3.3.2** – Evolution du taux de martensite x pour les points A et B*

Le comportement du point *B* est plus surprenant. La contrainte au temps t_1 est plus faible que pour le point *A*, ce qui est normal puisque la largeur en *A* est plus faible qu'en *B*. Par contre la réponse s'éloigne rapidement de la pente élastique, un peu comme ce qui a pu être observé au niveau expérimental, et lors de la transformation l'évolution de la contrainte est rapide, par exemple autour de t_2. Les deux codes de calculs fournissent des réponses quasi identique pour le point *A*, mais le point *B* présente des différences. Ces différences s'expliquent parce que contrairement à la température, ou à la proportion de phase, les contraintes ne sont pas directement connues aux nœuds et doivent être recalculés. Les différences peuvent s'expliquer par le mode de calcul retenu[19].

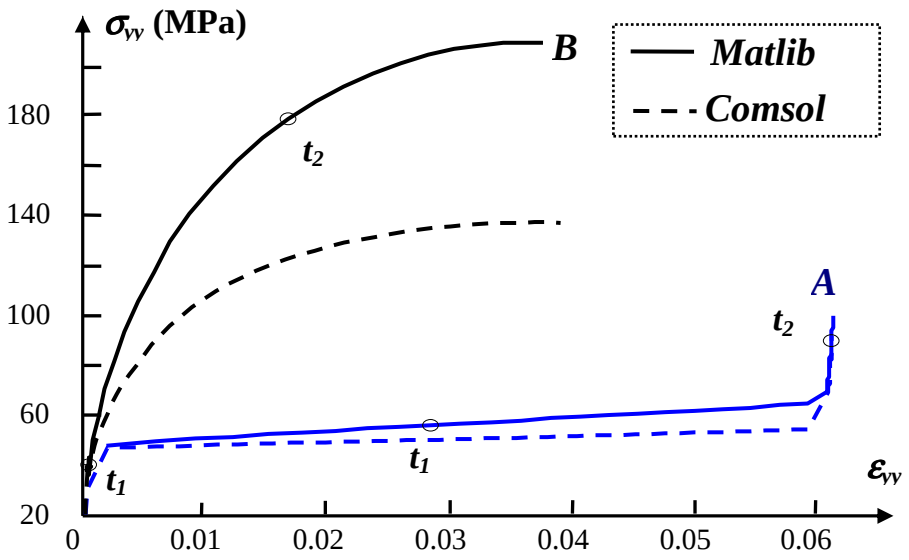


***Fig.3.3.3** – Réponse mécanique des points A et B*

[19] Interpolation directe pour Comsol et interpolation des valeurs calculées aux points de Gauss pour Matlib

La figure 3.3.4 représente la réponse des deux points dans l'espace de la ligne de transformation ($\bar{\bar{\sigma}} : \bar{\bar{\beta}}$ -θ) (la ligne de transition y est représentée pas des pointillés). Les deux codes sont ici encore très corrélés. On trouve bien le point *A* qui parcourt la ligne de transformation dès le commencement de l'essai, ce qui est cohérant avec la figure 3.3.2. Lorsque la transformation arrive à son terme, il la quitte et la contrainte augmente rapidement, puis après une légère chute elle croit plus lentement. Le point *B* présente un trajet plus complexe, il semble longer une ligne parallèle à la ligne de transition, avant une augmentation de la contrainte rapide jusqu'à arriver sur la ligne de transformation. L'augmentation en température qui précède la transformation s'explique par le phénomène de conduction. Ce réchauffement thermique est à rapprocher aux observations expérimentales locales. En effet, on a pu observer une augmentation de la température bien que le front ne soit pas encore arrivé. Ce phénomène illustre bien la problématique qu'il y a derrière la mesure de la température. L'évolution thermique n'est pas seulement le fait des sources de chaleur, ici thermoélastiques, mais est également due à la diffusion de la chaleur. C'est cette problématique qui a rendue nécessaire l'utilisation de l'équation de la chaleur comme outil d'analyse de l'expérience, et qui nous a permis de remonter aux sources de chaleur à partir des températures.

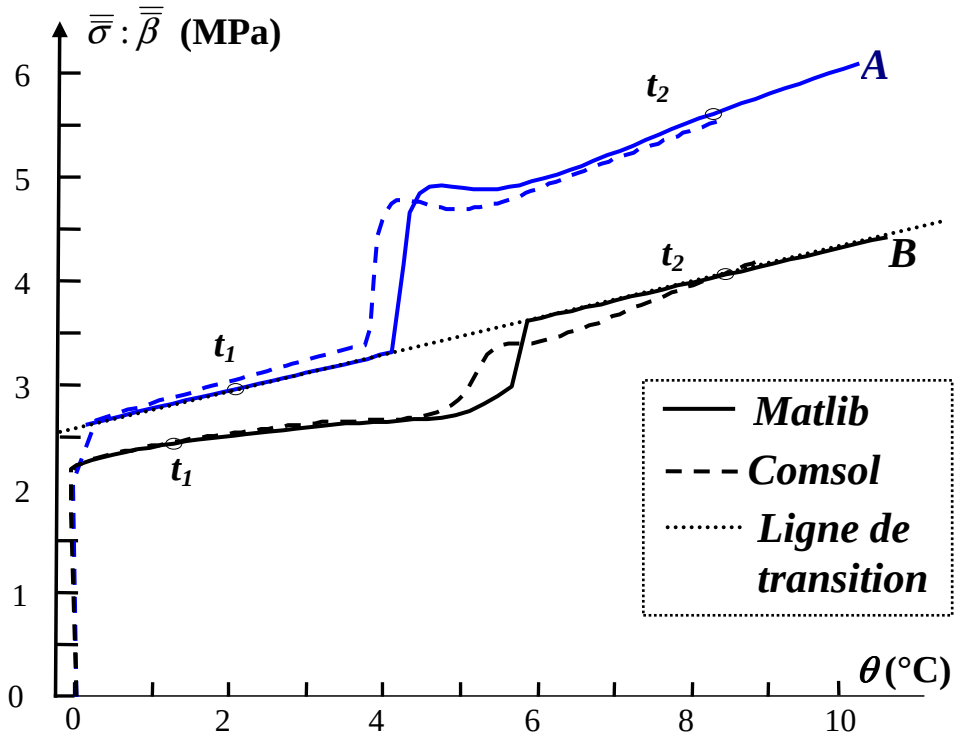


Fig.3.3.4 – *Positionnement de la réponse des points A et B vis-à-vis de la ligne de transition (en pointillé)*

3.3.1.3 Comparaison et évolution des champs de taux de martensite, de contrainte et de température

Pour compléter la confrontation des résultats donnés par les deux codes de calculs, on se propose de comparer différents champs de valeurs au cours de l'essai. La figure 3.3.5 compare le taux de martensite en 1, 10 et 50 secondes, pour les deux codes. La forme et les intensités du champ de taux de martensite sont similaires. Comme on l'a vu sur la figure 3.3.2, la martensite nucléée (t = 1 s) au centre de l'éprouvette puis croît (t = 10s) jusqu'à atteindre la valeur de 1 avant de se propager (t = 50 s). On observe également que la transformation s'organise sous la forme d'une bande inclinée.

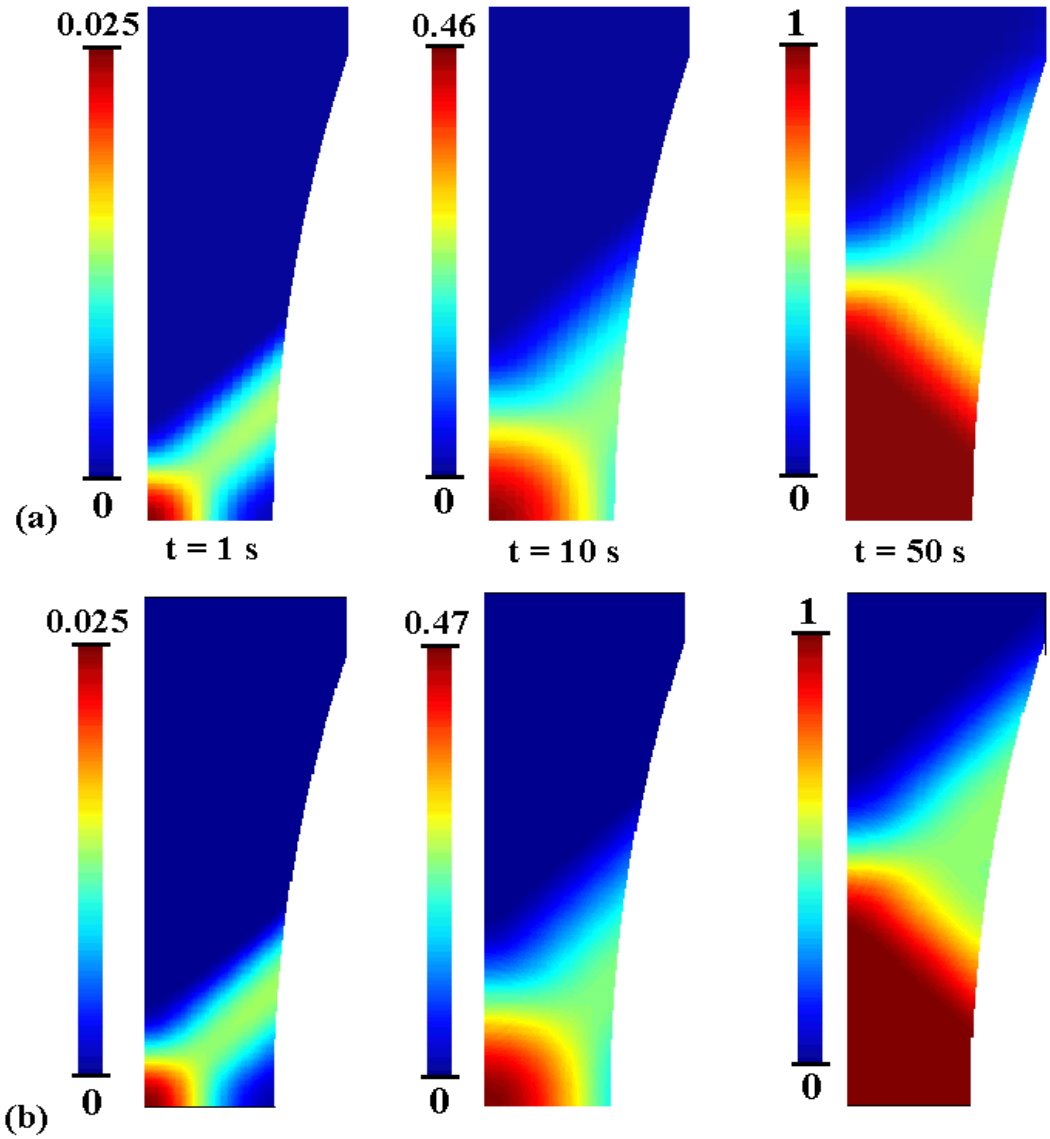


***Fig.3.3.5** – Evolution du taux de martensite x dans l'éprouvette pour le code de calcul (a) Matlib et (b) Comsol*

On peut aussi mettre en relation la dynamique du front de changement de phase avec la distribution de la contrainte. Pour cela on a choisi de représenter la contrainte de von Mises σ_{eq}, dont l'expression, avec σ_1, σ_2 et σ_3 les composantes principales du tenseur de contrainte, est :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2} \tag{3.3.1}$$

La figure 3.3.6 reporte cette valeur et va tout d'abord être comparée à la figure 3.3.5. On constate que la nucléation en t = 1s a lieu là où la concentration de contrainte est la plus importante, soit au point *A*. On retrouve également une bande inclinée là où se concentre la contrainte et qui correspond à la bande de martensite déjà observée sur la figure 3.3.5. La persistance de cette bande au cours du chargement (t = 10 et 50 s) observée sur la figure 3.3.5 est elle aussi corrélée à une bande de concentration de contrainte sur la figure 3.3.6. La contrainte dans une section droite est très inhomogène, et elle ne permet pas ici de faire l'hypothèse de contrainte plane postulée au cours de l'analyse expérimentale. Cette inhomogénéité est en grande partie le fait de la géométrie. On regardera avec attention si on a le même problème dans le cas d'une éprouvette rectangulaire, ce qui pourrait remettre en cause la mesure expérimentale de la contrainte (*cf.* hypothèse faite dans son calcul). Le comportement correspond bien à ce qui était attendu, à savoir un nucléation au centre de l'éprouvette et l'existence d'un front de changement de phase tous deux fortement liée à des concentrations de contraintes (elles mêmes reliées à la géométrie de l'éprouvette).

Pour illustrer l'importance des effets thermiques au cours de la transformation, avec l'élévation non négligeable de la température, la figure 3.3.7 reporte les champs de température respectivement en 10 et 50 secondes. Les résultats pour les deux codes de calculs sont encore une fois similaires. On observe une élévation locale de la température concentrée autour de la transformation, avec un gradient de température relativement élevé à t = 10 s, mais plus modeste à t = 50 s. L'importance de l'élévation de température est due au faible coefficient de fuites thermiques h_1 et h_2. L'influence de cette élévation de température sur la transformation, défavorisant la transformation, est négligeable du fait des concentrations de contrainte.

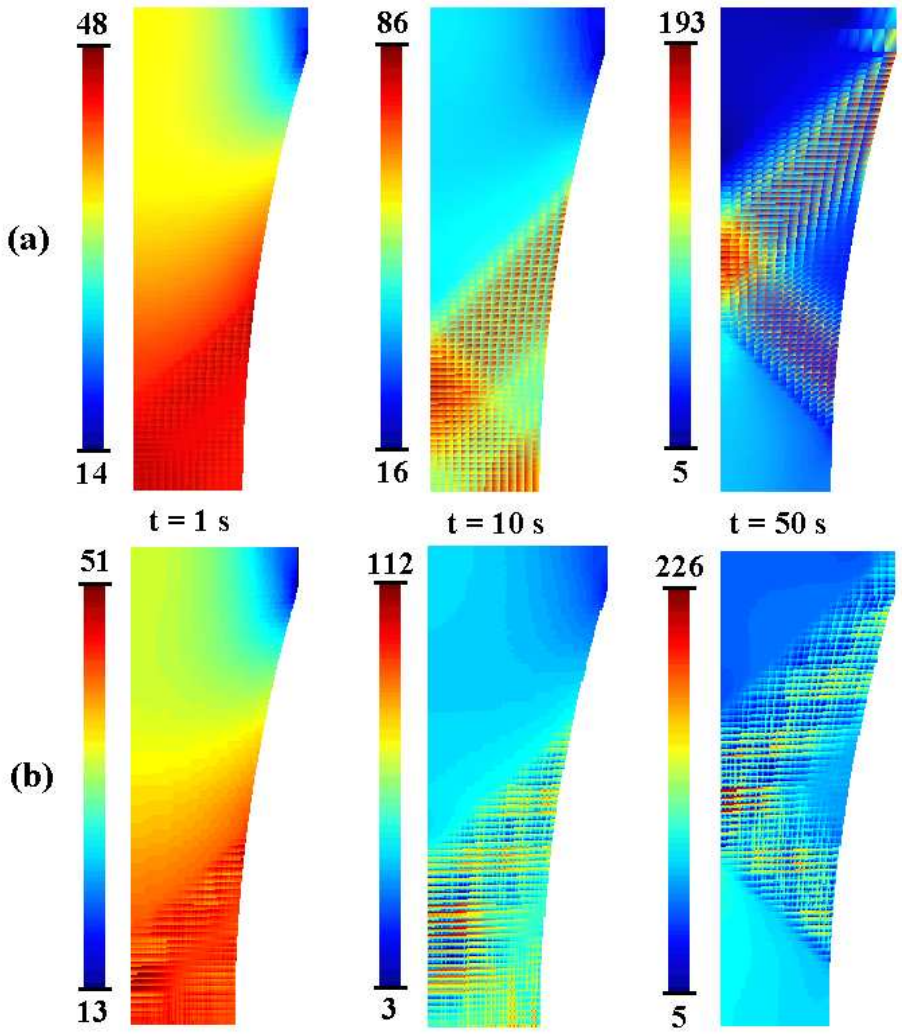


Fig.3.3.6 *– Evolution de la contrainte de von Mises (MPa) pour (a) Matlib (b) Comsol*

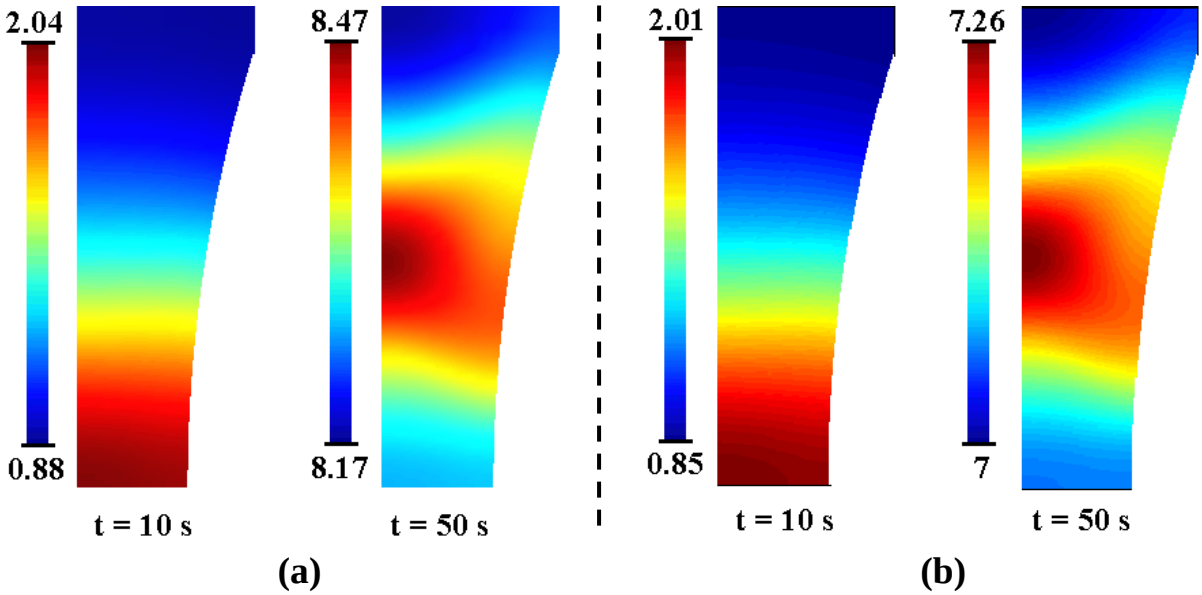


Fig.3.3.7 *– Evolution de la différence de température θ (°C) dans l'éprouvette calculé avec (a) Matlib et (b) Comsol*

3.3.2 Comparaison qualitative avec l'expérience

La validité des deux codes de calcul et leur capacité à reproduire le phénomène de nucléation et de propagation d'un front de changement de phase ont été vérifiées. Cependant, dans ce premier exemple, on a facilité le démarrage du front par l'intermédiaire d'une concentration de contraintes d'origine géométrique. Cet essai a néanmoins permis de retrouver des effets de structure proches de l'expérience, avec notamment l'existence d'une augmentation de la contrainte pendant la transformation (point *A* sur la figure 3.3.3), mais aussi la même forme de trajet complexe dans l'espace contrainte-température avant la transformation (point B sur la figure 3.3.4). On souhaite maintenant se rapprocher des conditions expérimentales, aussi bien en terme de paramètre du modèle, qu'en en terme de géométrie. Dans ces conditions, la présence d'un front ne sera plus conditionnée par une concentration de contrainte, mais, elle sera plutôt la conséquence d'un gradient de température dont l'importance dépend de l'intensité des fuites thermiques, notamment celles dans les mors qui conditionnent l'existence de gradients de température longitudinaux.

3.3.2.1 Conditions d'essai

L'éprouvette correspond à un ruban de longueur 108 mm, de largeur 10.6 mm et d'épaisseur 1.82 mm. Le maillage tétraédrique utilisé est représenté sur la figure 3.3.8 et contient 792 éléments. Un maillage plus régulier, formé d'hexaèdres, a également été réalisé et les résultats obtenus ont été comparés à ceux associés à ce premier maillage. Les résultats obtenus, pour les deux maillages, étant très similaires, ils ne seront pas comparés ici.

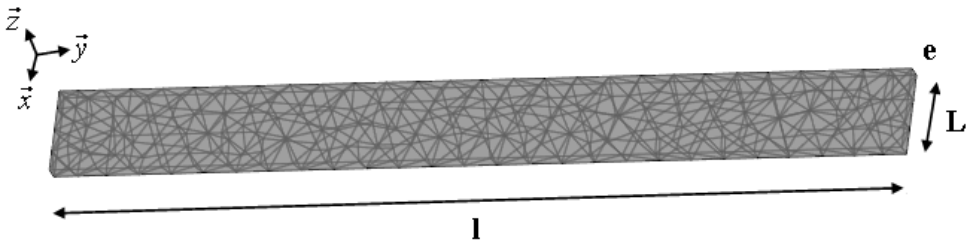


Fig.3.3.8 – *Maillage de l'éprouvette 1*

Les paramètres utilisés pour cette simulation correspondent à ceux proposés dans la section 3.2.2 à l'exception de *A* qui est égale à 280 K et h_2 égale à 500 $W.m^{-2}.K^{-1}$.

On peut à nouveau se limiter à un huitième de l'éprouvette, avec des conditions aux limites identiques à celles proposées dans le cas précédent, et pour une vitesse de chargement maintenant égale à 0.1 $mm.s^{-1}$.

3.3.2.2 Réponse globale

On propose de suivre, ci après, une lecture des résultats dont le déroulement est parallèle à celui suivi dans l'analyse expérimentale. Celle-ci s'articulait d'abord autour de la réponse globale de l'éprouvette. Ici, cette réponse est calculée par une opération de moyenne appliquée à la totalité de l'éprouvette. Elle est notée ici aussi par des barres $\left(\bar{\sigma}_{yy}, \bar{\varepsilon}_{yy}, \bar{\theta}, ...\right)$. La réponse globale dans l'espace macroscopique est reportée sur la figure 3.3.9. Elle correspond à la réponse expérimentale, avec une phase linéaire, puis un plateau, avant une nouvelle phase linéaire. La contrainte monte jusqu'à 160 MPa, mais pour faciliter la lecture ici, et dans la suite, on n'a représenté qu'un zoom compris entre 0 et 80 MPa, et on indique par des pointillé le fait que la courbe est tronquée. Lors de la décharge, l'essai laisse clairement apparaître une hystérésis. Rappelons encore une fois, au risque d'être insistant, que le modèle est dépourvu de dissipation intrinsèque.

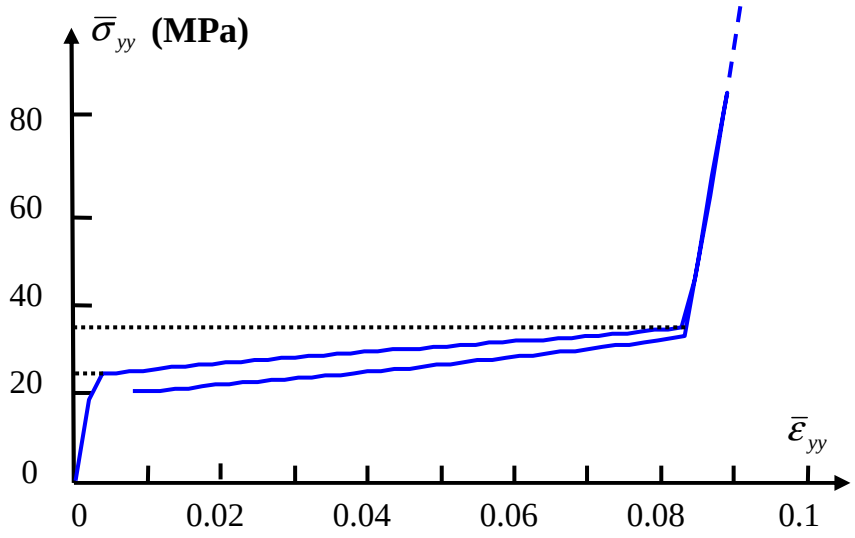


Fig.3.3.9 – *Réponse mécanique globale*

En ce qui concerne le positionnement de la réponse globale vis-à-vis du diagramme de transition, on a choisi, pour continuer le parallèle avec l'expérience, de représenter $\bar{\sigma}_{yy} - \bar{\theta}$, plutôt que $\left(\overline{\bar{\bar{\sigma}} : \bar{\bar{\beta}}}\right) - \bar{\theta}$, sur la figure 3.3.10. Ceci est cohérent avec la forme de $\bar{\bar{\beta}}$ (diagonale) et de $\bar{\bar{\sigma}}$. Le refroidissement thermoélastique initial est peu visible, par contre l'échauffement accompagnant la transformation est important, avec une variation thermique moyenne de près de 9°C, ce qui est beaucoup plus important que pour l'essai expérimental (**1-3**) où l'écart thermique était, rappelons le, d'environ 2°C. Cette différence s'explique à la fois par la vitesse plus importante de la simulation (*cf.* la variation de température de 7.5°C reporté pour l'essai (**4-5**) pour une sollicitation de 0.2 mm.s^{-1}), par le coefficient de fuite dans les mors h_2, 3 fois plus faible que celui identifié expérimentalement (tab.3.2.3), et enfin les dimensions de

l'éprouvette qui ont été doublées.. Le domaine de transformation globale est équivalent au domaine de transformation local dans le cas considéré ici, à savoir $A = M$. Il est réduit à une ligne de transition, est sa pente est bien celle qui est attendue, à savoir 1.2 MPa.K^{-1}. C'est également la « tendance » qui avait été observé au niveau expérimental, avec un domaine de transition semblable à l'échelle globale et locale (*cf.* fig.2.3.10 et fig.2.3.17).

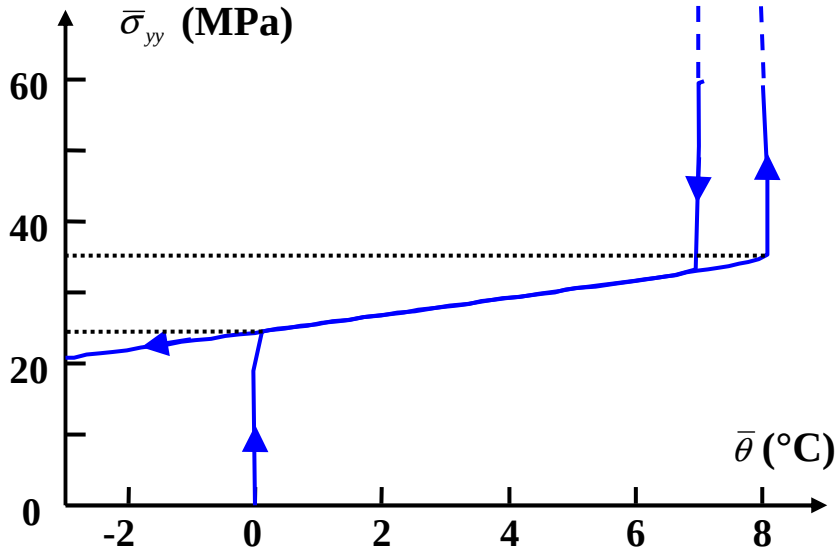


***Fig.3.3.10** – Réponse thermique globale :* $\bar{\sigma}_{yy} - \bar{\theta}$

Cette stricte équivalence entre domaine de transformation global et local est à nuancer dans le cas où A est différent de M, avec par exemple une différence de 1°C. La réponse globale correspond alors à la figure 3.3.11, avec les deux lignes de transformation en pointillés. On observe que la réponse sort de ce domaine alors que la transformation n'est pas accomplie sur toute l'éprouvette, c'est un effet de structure. On constate également que le choix de représenter $\bar{\sigma}_{yy}$ plutôt que $\left(\bar{\bar{\sigma}} : \bar{\bar{\beta}}\right)$ n'a pas toujours d'incidence sur l'identification du domaine de transformation pour la géométrie considérée. Ce constat conforte le travail expérimental qui a été mené autour du diagramme de transformation en se basant sur la réponse $\bar{\sigma}_{yy} - \bar{\theta}$.

On peut maintenant présenter le trajet parcouru dans l'espace thermomécanique, en trait plein sur la figure 3.3.12. Il ressemble à la réponse mesurée expérimentalement, avec une boucle thermomécanique définie par une élévation lors de la charge des trois variables contrainte, déformation et température, et de leur diminution lors de la décharge. La figure 3.3.12. comporte également en pointillé la réponse d'un essai plus rapide (vitesse de 0.2 mm.s^{-1}) et plus lent (vitesse 0.05 mm.s^{-1}). La variation thermique pour l'essai rapide est plus importante que pour l'essai lent. En effet, les fuites ont moins le temps de jouer leur rôle dans

l'essai rapide. L'influence de la vitesse sur la réponse macroscopique correspond donc à ce qui à pu être observé sur les simulations réalisées sur un élément de volume (*cf.* fig.3.2.5). On retrouve la même tendance, lorsqu'on augmente la vitesse de l'essai la réponse thermomécanique tend vers le cas adiabatique.

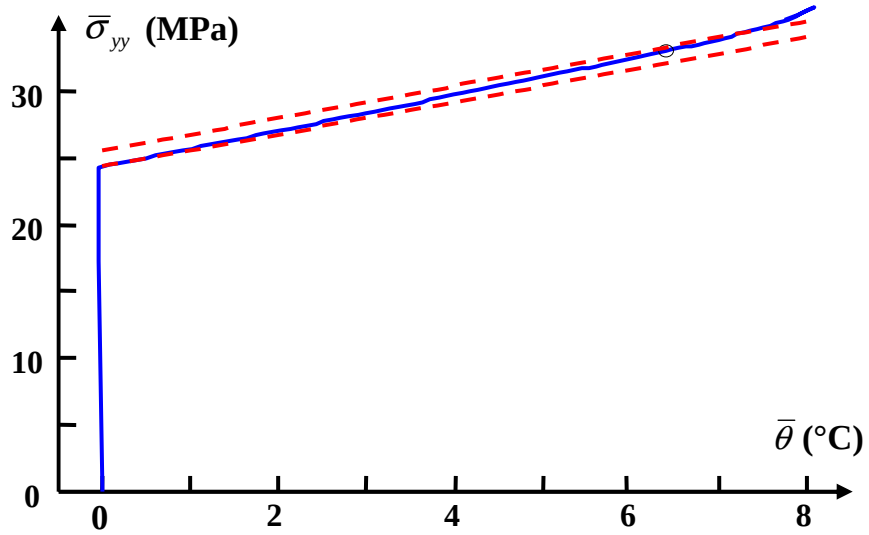


Fig.3.3.11 – *Domaine de transformation et réponse globale dans le cas A – M = 1*

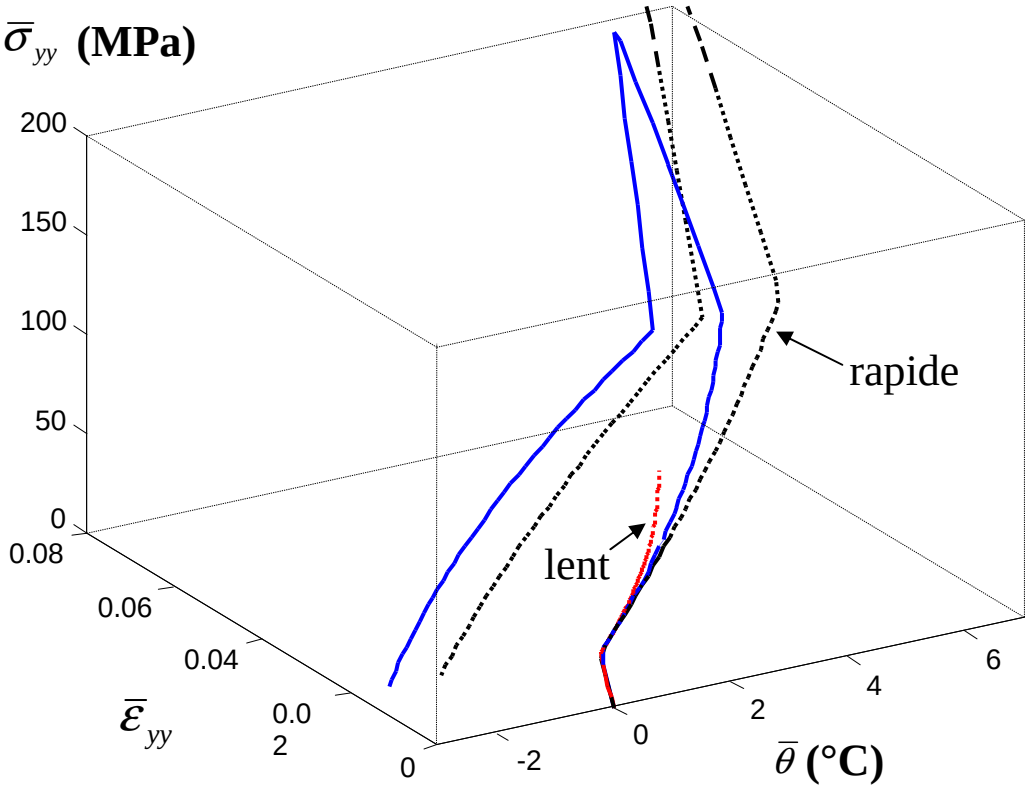


Fig.3.3.12 – *Réponse dans l'espace thermomécanique*

3.3.2.3 Réponse locale

Précédemment, on a montré pour l'élément de volume que cette variation de la température avec la vitesse de sollicitation s'accompagne d'un relèvement de la pente mécanique $\partial\sigma/\partial\varepsilon$ (fig.3.2.5), ce qui est en accord avec les observations expérimentales faites lors de la confrontation des essais (**4-5**) et (**4-6**) (*cf.* fig.2.3.12). Les simulations sur la structure présentent le même phénomène, avec par exemple l'évolution de la pente du plateau en fonction de la vitesse, représentée sur la figure 3.3.13 pour le nœud situé à l'extrémité de l'éprouvette et de coordonnée (54, 0, 0). La figure comporte également en pointillé un essai pour lequel h_1 = 250 W.m^{-2}.K^{-1}, ce qui correspond à la situation où l'éprouvette est plongée dans de l'eau. On retrouve le résultat indiqué dans la littérature, et signalé lors de l'étude expérimentale, la pente du plateau diminue fortement avec l'augmentation des échanges thermiques entre l'éprouvette et l'extérieur. L'essai est alors proche du cas isotherme.

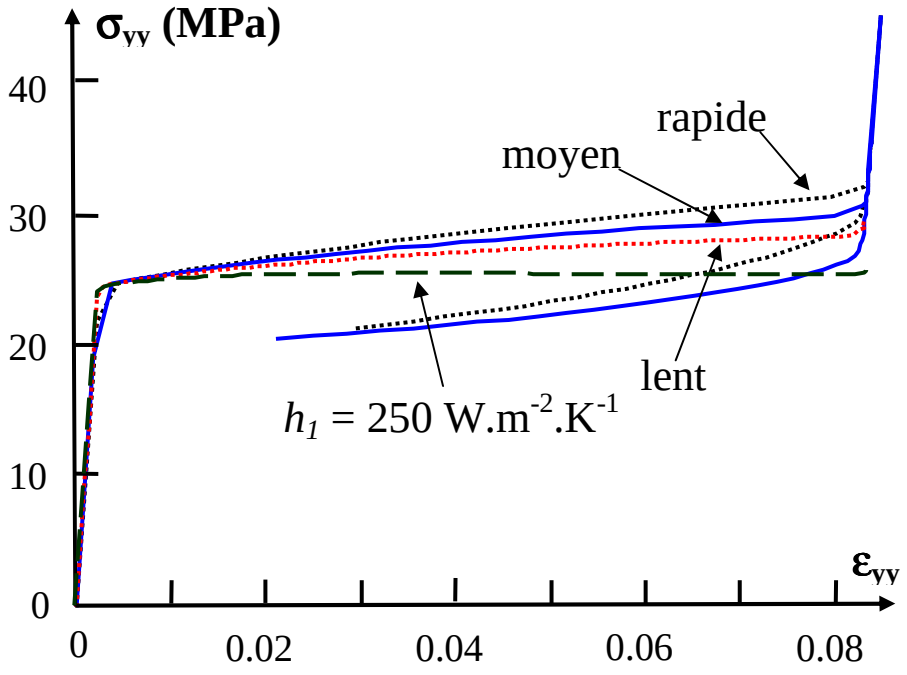


Fig.3.3.13 – *Evolution de la réponse mécanique locale avec la vitesse de sollicitation*

Revenons à l'essai de base, pour lequel la vitesse de sollicitation est de 0.05 mm.s^{-1}. La figure 3.3.14 représente l'évolution du taux de martensite des nœuds *A* en trait plein et *B* en pointillé. Ces deux points ont pour coordonnées respectives (54, 0, 0) et (25, 0, 0). Le nœud *A* croit plus rapidement que *B*, et finit de transformer dès 50 s. Le nœud *B* présente d'abord une croissance relativement linéaire jusqu'à un taux de transformation proche de 80%, suivi d'une chute avant de croitre très rapidement jusqu'à 1. La valeur du taux de martensite maximal du point *B* avant la croissance rapide est très élevée. Elle correspond au

taux de martensite transformé de manière homogène pendant la transformation rapide du point *A*.

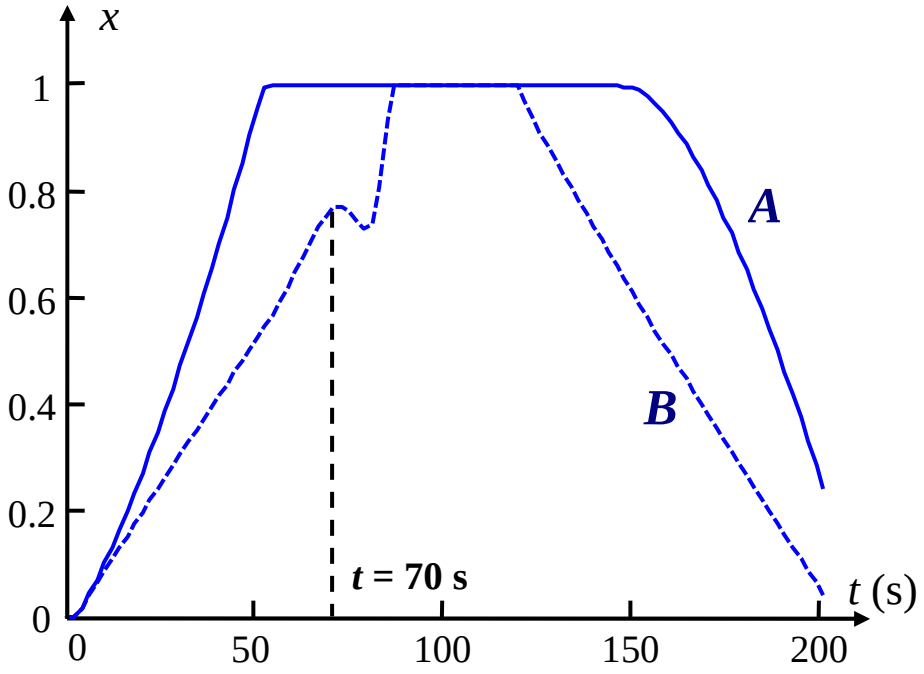


Fig.3.3.14 – *Evolution du taux de martensite aux nœuds de coordonnées (54, 0, 0) et (25,0,0)*

De manière à mieux se représenter l'hétérogénéité de la transformation, on propose de représenter la distribution de taux de martensite à 70 secondes. Cet instant se positionne sur la figure 3.3.14 à proximité de la décroissance du taux de martensite du point *B*. Outre cette distribution, la figure 3.3.15 reporte les sources de chaleur et la déformation selon l'axe de traction ε_{xx}. On constate que le taux de martensite ne se distribue pas de façon homogène. Une partie de l'éprouvette, contenant le point *A*, est totalement transformée tandis que le reste de l'éprouvette n'est que partiellement transformée. On identifie le front de changement de phase à la frontière de la partie de l'éprouvette totalement transformée. Il est incliné comme on a pu l'observer expérimentalement (fig.2.3.15). Le front est bien signalé par les sources les plus importantes. Il est intéressant de constater qu'il existe une sorte d'« anti-front » situé à environ 30 mm, précédant le front. Il correspond à la diminution du taux de martensite sur la figure 3.3.14, avec des sources légèrement négatives (fig.3.3.15.b). Il correspond à la localisation du minimum de déformation ε_{xx}. Cet « anti-front » est suivi par ce qui semble être un second front, aux environs de 20mm, qui se déplace de concert avec le premier front.

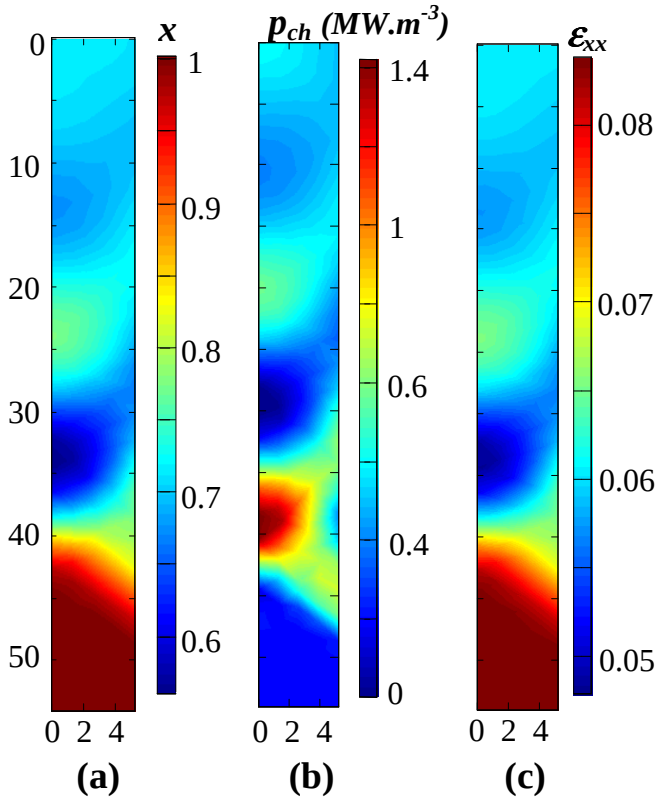


Fig.3.3.15 – *Distributions au temps t = 70 s (a) du taux de martensite (b) des sources de chaleur (c) de la déformation* ε_{xx}

La figure 3.3.16 représente l'évolution de la distribution du taux de martensite dans l'éprouvette en différents instants de l'essai. La nucléation puis la propagation du front s'y distinguent clairement.

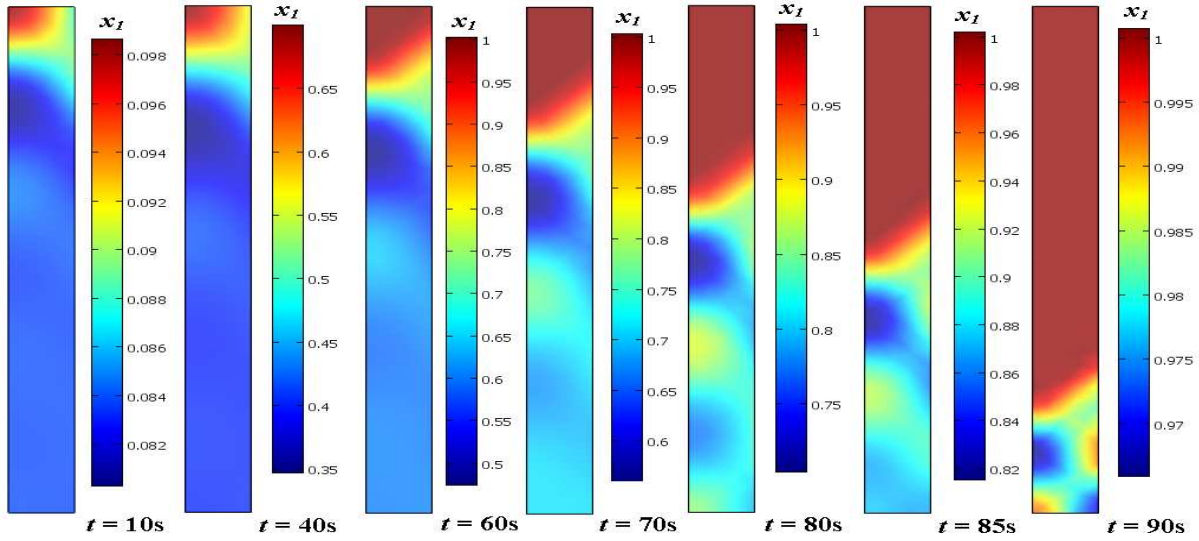


Fig.3.3.16 – *Evolution du taux de martensite au cours de l'essai et présence d'un front de changement de phase sur un huitième d'éprouvette*

Pour synthétiser ce qui vient d'être vu, on propose de représenter l'évolution temporelle du profil de taux de martensite situé en y = 0 mm (fig.3.3.17). Le chargement mécanique est indiqué en pointillés blancs. La transformation a lieu dans toute l'éprouvette avec une croissance plus rapide sur le bord situé en contact avec les mors. Le front se met ensuite en mouvement dès que la transformation sur le bord est finie. Parallèlement, il se forme un second front en x = 30 mm, qui se propage de concert avec le premier. Cette évolution est similaire aux observations expérimentales. De plus, la plus grande régularité de la décharge vis-à-vis de la charge a également été observée expérimentalement sur l'essai (**1-3**) avec 3 fronts à la charge contre deux à la décharge.

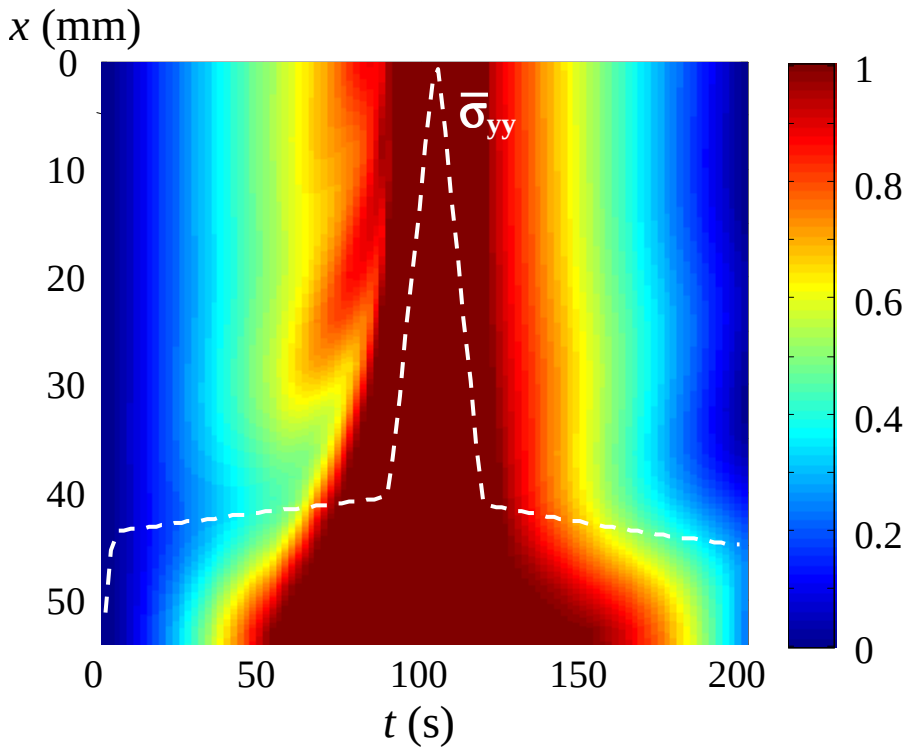


Fig.3.3.17 – *Evolution du profil de taux de martensite (y = 0 mm)*

Les modèles tridimensionnels proposés par [Anand 03] ou [Liu 07] retrouvent eux aussi une nucléation qui apparaît sur les extrémités de l'éprouvette rectangulaire en contact avec les mors. Cette nucléation s'explique, selon nous, par les conditions aux limites thermiques choisies par les auteurs. Elles sont sévères en imposant une température à ces surfaces égale à la température extérieure (condition de Dirichlet). Bien que les modèles d'Anand, celui de Liu et celui proposé plus haut soient différents (leurs modèles intègrent un terme de dissipation), la nucléation se produit dans chaque cas aux extrémités de l'éprouvette avant de se propager. Pour mieux comprendre, on considère les fuites perpendiculaires à l'échantillon. Elles sont caractérisées pour [Anand 03] par un coefficient d'échange h_1 égale à 12 $W.m^{-2}.K^{-1}$ contre 160 $W.m^{-2}.K^{-1}$ pour [Liu 07]. Cette différence se retrouve au niveau de la

cinétique de la localisation. Pour Liu, la cinétique aux extrémités de l'échantillon est proche de la transformation dans le reste de l'éprouvette, rendant le front quasi-inexistant (fig.3.3.18.a), alors que dans le cas de [Anand 03] le front se distingue clairement et se propage dans l'éprouvette (fig.3.3.18.b). Le même comportement a été observé lors de nos simulations. Nous ne les reportons pas ici, mais en comparant l'essai présenté ci-dessus à un essai pour lequel h_1 = 250 W.m^{-2}.K^{-1} on retrouve le même comportement. Ceci montre une fois de plus le rôle majeur joué par les conditions aux limités thermiques dans la cinétique et la propagation des fronts de changement de phase.

Fig.3.3.18 – *Distribution de martensite obtenue (a) par [Liu 07] avec h_1 =* 160 W.m^{-2}.K^{-1} *(b) par [Anand 03] avec h_1 =* 12 W.m^{-2}.K^{-1}

Discussion :

Le modèle proposé se base en grande partie sur les observations expérimentales réalisées au chapitre précédent. On vient de voir qu'il permettait de générer un front de changement de phase qui démarre au contact des mors avant de se propager. La réponse thermomécanique associée à la transformation de l'éprouvette est qualitativement analogue aux mesures expérimentales, avec un trajet thermodynamique qui se caractérise par une élévation de température accompagnant le processus de déformation. On a vu également que ces variations de température sont de nature à modifier la cinétique de transformation. La transformation σ-induite n'est donc pas entièrement pilotée par les contraintes mais dépend aussi des variations de température engendrées par le caractère exo-endothermique de la transformation. Bien entendu ces variations de température dépendent des mécanismes de diffusion dans la matière. Par ailleurs, la thermosensibilité du matériau, induite par une forte interaction entre état thermique et état mécanique lors du changement de phase, a permis de

retrouver numériquement l'existence de boucle d'hystérésis. Enfin, la sensibilité à la température confère au matériau un comportement dépendant du temps, non pas à cause d'une quelconque viscosité (le modèle ayant été volontairement privé ici de tout effet dissipatif intrinsèque), mais à cause de la diffusion de la chaleur au sein du matériau (que l'on peut associer à des effets dissipatifs thermiques).

CHAPITRE 4

Une modélisation de la transformation martensitique par dynamique moléculaire

Sommaire

Introduction

4.1 Présentation générale de la dynamique moléculaire

4.1.1 Problème mécanique
4.1.2 Système thermomécanique équivalent
4.1.3 Echanges avec l'extérieur
4.1.4 Bilan d'énergie

4.2 La méthode de DM pour l'étude des AMF

4.2.1 Cristallographie des AMF
4.2.2 Diversité de l'utilisation – Intérêt de l'approche
4.2.3 Outils d'analyses adaptés à l'étude de la transformation de phase martensitique

4.3 Simulation de la transformation martensitique par DM

4.3.1 Etude des réponses d'un modèle DM d'AMF
4.3.2 Influence de la taille de l'échantillon

Introduction

L'ensemble du travail qui précède s'est focalisé sur l'aspect méso/macroscopique de la transformation de phase, et s'est conclu par des simulations numériques confirmant le rôle important des effets de couplage dans la compréhension du comportement des alliages à mémoire de forme. Ces échelles d'investigation sont celles, importantes, des applications de ces matériaux (stents, actionneurs). Cependant, comme nous l'avons présenté dans les premiers chapitres, l'échelle des mécanismes de la transformation de phase est la maille cristalline. D'autres approches de modélisation permettent de décrire le comportement de la matière à ces échelles microstrucutales. De façon non exhaustive, on peut citer les modèles utilisant la méthode de Monte Carlo, présentée par exemple dans [Viot 08] ou [Hayoun 02], la méthode des champs de phase [Khachaturyan 06a-b], [Albers 04], [Finel 09] qui a permis de reproduire la microstructure fine des AMF, ou encore les méthodes « ab-initio » qui résolvent de manière approchée l'équation de Schrödinger [Liu 04]. Cette dernière approche reste très limitée dans l'étude des AMF du fait du coût de calcul rapidement prohibitif, comme le montre par exemple [Ackland 08] qui simule le comportement d'un ensemble de seulement 64 atomes. Nous verrons néanmoins que son utilisation reste un moyen d'investigation des potentiels interatomiques utilisés en dynamique moléculaire (*cf.* sous-section 4.1.1.2). La dynamique moléculaire a quant à elle pour but la description prédictive de l'évolution de systèmes de particules pouvant être des atomes, des molécules ou de façon moins courante des grains comme dans [Richefeu 05]. Nous chercherons à exploiter une partie des possibilités offertes par ce type d'approche pour reproduire à l'échelle atomique un changement de réseau cristallographique.

L'objectif plus fondamental de cette étude sera de tenter de relier les différentes échelles en construisant le système thermomécanique mésoscopique équivalent au système cristallographique étudié de façon à pouvoir définir sa température, la chaleur latente accompagnant la transformation de phase et son énergie libre. On pourra alors aller vers une étude des propriétés de convexité de l'énergie libre en fonction de la dimension du système, et tenter de comparer l'énergie libre à celle utilisée à l'échelle mésoscopique dans ce manuscrit, en augmentant, autant que faire ce peut, la taille du système étudié.

Nous commencerons ce chapitre par une description générale de la méthode de Dynamique Moléculaire (DM). Le système moléculaire sera ensuite réinterprété dans un cadre thermodynamique, ce qui permettra d'établir le bilan énergétique du système. La section suivante est dédiée à la présentation des aspects spécifiques liés à l'application de la

démarche DM aux AMF. Elle s'ouvre sur une présentation de la cristallographie des AMF. Différents résultats de la littérature sont ensuite donnés afin d'établir des points de comparaison sur lesquels sera validée la méthode développée dans le cadre de ce travail. La dernière section expose les résultats des simulations, avec une première phase de contrôle du code implémenté au cours de cette thèse, une seconde phase d'étude de la transformation martensitique modélisée par DM, enfin une troisième phase où l'on étudie l'influence de la dimension du système sur la transformation.

4.1 Présentation générale de la dynamique moléculaire

L'objectif de la DM est de modéliser l'évolution d'un système de particules en interaction, qui, pour ce qui nous concerne, se trouvent être des atomes. L'évolution du système est régie par le principe fondamental de la dynamique. Le choix du type d'atomes, des conditions initiales qui les animent, et le choix du type d'interaction qui les lie constituera le modèle d'un système physique donné. Ici, le modèle d'AMF choisi correspond à un alliage équiatomique, de type NiTi, constitué d'atomes métalliques soumis à un potentiel de Lennard-Jones et formant un cristal parfait austénitique. Après avoir rappelé les principes de la dynamique moléculaire, on présentera la démarche permettant de construire le système thermodynamique équivalent à cet ensemble d'atomes. On proposera ensuite des méthodes permettant de faire évoluer le système macroscopique par l'intermédiaire d'échange énergétique, avant de réaliser le bilan d'énergie du système.

4.1.1 Problème mécanique

4.1.1.1 Principe fondamental de la dynamique

1) Ecriture et interprétation

Le système étudié est un système mécanique conservatif composé de N atomes répartis dans un volume V. A chaque atome i est attribué une masse m_i, une position $\vec{r}_i$, une vitesse $\dot{\vec{r}}_i$, une impulsion $\vec{p}_i = m_i \dot{\vec{r}}_i$, et une accélération $\vec{a}_i$. On définit un micro-état du système comme l'ensemble des couples $(\vec{r}_i, \vec{p}_i)_{i=1...N}$. Vitesses et accélérations sont définies par rapport à un repère galiléen. Chaque atome i est soumis à l'ensemble des forces $\vec{F}_{ij}$ induites par les atomes j. Ces forces dérivent d'un potentiel $\phi_{ij}(r_{ij})$, avec $r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$ la distance entre les atomes i et j. On peut alors définir l'énergie potentielle E_p du système comme la somme des potentiels de chaque atome, l'énergie cinétique E_c comme la demi-somme des vitesses au carré et l'énergie totale E du système comme la somme de ces deux énergies. Pour résumer, le système est constitué d'un ensemble d'atomes, chacun soumis à une force qui va faire évoluer sa position. Cette évolution du système est régie par le principe fondamental de la dynamique :

$$\sum_{j=1}^{N} \vec{F}_{ij} = m\vec{a}_i \tag{4.1.1}$$

A tout instant, la résolution de ces équations pour l'ensemble des atomes fournit le micro-état courant du système. En pratique, cette résolution est menée *via* une intégration numérique de ce système couplé (et non linéaire) d'équations différentielles du 2nd ordre. Notons que ces équations peuvent être réinterprétées en terme énergétique dans le cadre de la

mécanique analytique [Hare 07]. L'intérêt d'une telle réécriture est d'assurer au schéma d'intégration d'être conservatif (*E* doit être constant). En effet, toute la problématique numérique réside en cette conservation énergétique. Pour plus de détails sur cet aspect, le lecteur pourra se reporter à [Orriols 03], [Tuckerman 00], [Omleyan 02], [Duffour 00], [Monovasilis 07].

2) Méthode d'intégration numérique

Un schéma d'intégration classique en DM est le schéma explicite du second ordre de « Velocity Verlet », dont la précision est o(dt^2) :

Au pas de temps *k*, $$\vec{r}_i^{\,k+1} = \vec{r}_i^{\,k} + \dot{\vec{r}}_i^{\,k} dt + \vec{a}_i^{\,k} \frac{dt^2}{2} \qquad \vec{a}_i^{\,k} = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \vec{F}_{ij}^{\,k} \qquad (4.1.2)$$

Pour assurer la stabilité du système (schéma explicite), l'incrément temporel *dt* doit être choisi suffisamment petit pour permettre la fluctuation atomique. Pour orienter ce choix, on constate qu'au voisinage de l'équilibre, les potentiels interatomiques peuvent être approchés par des oscillateurs harmoniques. Leur temps caractéristique est alors de l'ordre de 10^{-13}-10^{-14} s [Kastner 03]. On choisit un incrément de temps égal à un centième de ce temps caractéristique.

La littérature propose d'autres schémas numériques, comme des schémas explicites du second ordre (Verlet, Leap Frog, Beeman) [Allen 87], le schéma implicite prédicteur-correcteur de Gear [Allen 87], [Pöschel 05], [Kolafa 05], ainsi que des schémas d'ordre supérieur [McLachalan 92]. Les schémas d'ordre supérieur sont construits de manière à assurer au mieux la conservation de l'énergie, mais, en contrepartie, ils nécessitent plus de ressource en termes de temps de calcul. Nous avons vérifié qu'à l'échelle de nos simulations, l'intégration de Velocity Verlet offrait un bon compromis entre ces deux aspects.

4.1.1.2 Potentiel interatomiques

Le potentiel interatomique utilisé dans ce travail est celui de Lennard-Jones. On signale cependant l'existence d'un deuxième type de potentiel, plus à même de modéliser le comportement des AMF, mais également plus délicat d'utilisation [Deutch 95].

1) Potentiel de Lennard-Jones

Dans le cas d'atomes, l'interaction résulte à la fois des forces coulombiennes liant l'ensemble des noyaux et des électrons et la répulsion résultant du principe d'exclusion de

Pauli. Le potentiel liant les atomes peut être approximé par le potentiel de Lennard-Jones (LJ) (éq.4.1.3) tracé à la figure 4.1.1. Les paramètres $\left(e_{ij}^{LJ}, r_{ij}^{LJ}\right)$ permettent notamment de définir le minimum du potentiel à une valeur de $-e_{ij}^{LJ}$ Joules pour un rayon valant $\tilde{r}_{ij}^{LJ} = 2^{1/6} r_{ij}^{LJ}$.

$$\phi_{ij}\left(r_{ij}\right) = e_{ij}^{LJ}\left(\left(\frac{r_{ij}^{LJ}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{r_{ij}^{LJ}}{r_{ij}}\right)^{6}\right) \tag{4.1.3}$$

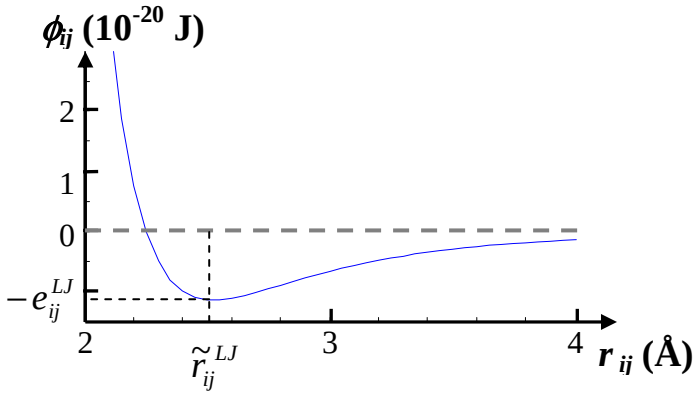


***Fig.4.1.1** – Potentiel de Lennard-Jones*

2) Potentiels de la méthode de l'atome entouré (EAM)

Le potentiel de Lennard-Jones est une approximation raisonnable pour les gaz rares. Du fait de sa simplicité, son utilisation peut être généralisée à l'étude des métaux uniquement dans un but prospectif, comme c'est le cas dans la présente étude. Cependant cette approche reste limitée. En effet, les AMF sont principalement constitués de métaux de transition, qui sont les éléments correspondant aux groupes 4 à 11 du tableau périodique des éléments, et parmi lesquels on trouve Ti, Fe, Ni, Cu… Or, ces éléments ont la propriété de posséder une sous-couche électronique *d* partiellement remplie, permettant aux électrons présents sur cette sous-couche de se délocaliser dans le réseau métallique, et de former un gaz d'électrons délocalisé, de densité ρ_i. Ce gaz génère alors des interactions supplémentaires F_i sur l'atome *i* [Vascon 97]. Finalement, l'énergie potentielle totale E_{p_i} imposée par le système à l'atome *i* se décompose en une interaction $\sum_j \phi_{ij}\left(r_{ij}\right)$ de l'ensemble des atomes du système sur l'atome *i*, et l'action F_i du nuage d'électron sur l'atome :

$$E_{p_i} = \frac{1}{2}\sum_j \phi_{ij}\left(r_{ij}\right) + F_i\left(\underbrace{\sum_j \rho_j\left(r_{ij}\right)}_{\rho_i}\right) \tag{4.1.4}$$

Les potentiels EAM les plus couramment utilisés sont les propositions de Baskes [Daw 89], de Finnis-Sinclair [Finnis 84], [Cleri 93], [Lai 00], [Sato 07], [Li 08], [Liu 08], [CCMS 08], de Johnson [Johnson 89-91], ou encore de Farkas [Ruda 96], [Pasianot 92], [Trinite 06], [Ackland 03].

3) Détermination des paramètres du potentiel

Dans un cas comme dans l'autre, le choix des paramètres peut être établi :

- à partir de certaines propriétés du matériau modélisé [Cleri 93] comme ses paramètres de mailles, ses constantes élastiques, son énergie de cohésion…
- à partir de simulation ab initio [Trinite 06].
- à partir de la littérature, par exemple [Halcioglu 75], [Kumeta 01] pour le potentiel de LJ, éventuellement associé à des lois de mélanges [Al-Matar 04] dont les limites d'applications sont discutées dans [White 00].

Notre approche s'attachant à une étude qualitative, on utilisera uniquement le potentiel de Lennard-Jones, avec des paramètres adaptés de ceux proposés par [Kastner 03].

4) Approximation du potentiel et temps de calcul

Le coût principal d'une simulation par DM réside dans le calcul des forces d'interaction. Pour réduire ce coût on part du constat que le potentiel interatomique décroit rapidement vers zéro. Dans le cas du potentiel de Lennard-Jones (*cf.* fig.4.1.1), on considère qu'au-delà de 2.5 à 3 fois $\tilde{r}_{ij}^{LJ}$ le potentiel est négligeable [Allen 86]. Par conséquent, le calcul de la force s'appliquant à un atome peut se limiter à la contribution des atomes situées à une distance inférieure à cette distance critique, appelé rayon de coupure r_{cut}. En pratique on construit régulièrement, pour un intervalle de temps de t_{frais} pas de temps, et pour chaque atome une liste de voisin soit en testant la distance des atomes deux à deux, soit en subdivisant au préalable l'espace en sous-blocs de manière à restreindre la recherche aux seuls blocs voisins [Bernard 97]. Pour des questions de conservation de l'énergie :

- le potentiel est modifié à partir d'un rayon de troncature r_{tronc} par une fonction de troncature (*cf.* fig.4.1.2.b), dans ce travail cette fonction correspond à celle proposée dans le code [Charmm]. Elle a pour propriété d'être nulle en r_{cut} et elle assure la continuité énergétique en r_{cut}.

- une distance de tolérance δ_{tol} est ajoutée au rayon de coupure dans la constitution de la liste des voisins. Un atome situé dans cette zone de « tolérance » pourra rentrer dans

le domaine d'influence de l'atome sans nécessiter la reconstruction de la liste des voisins pour être pris en considération.

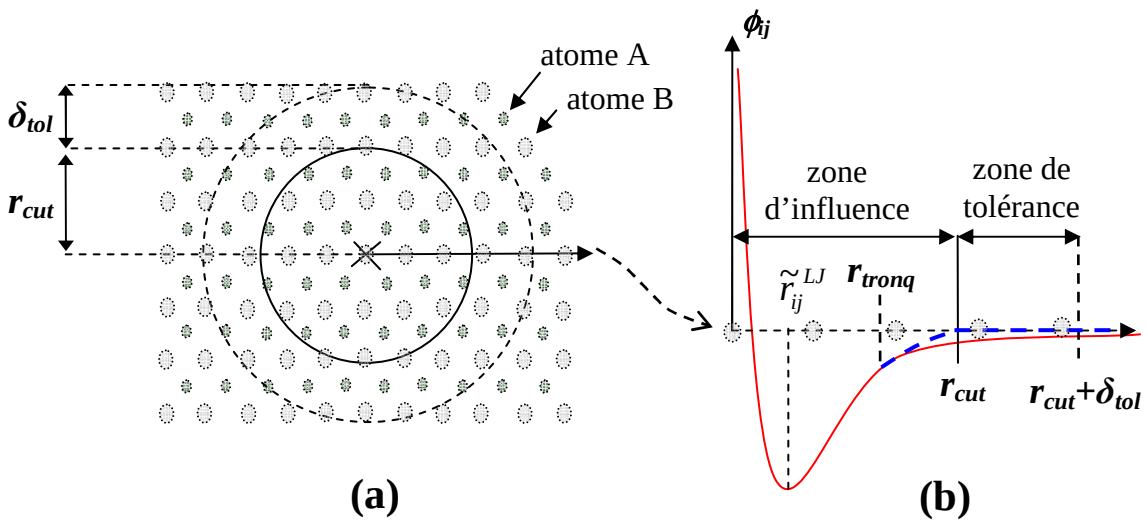


Fig 4.1.2 – *(a) Rayon de coupure r_{cut}, distance de tolérance δ_{tol} et liste des voisins (b) Fonction de coupure schématique*

4.1.1.3 Conditions initiales

Le principe fondamental de la dynamique nécessite pour être résolu de connaître les positions et les vitesses initiales des atomes du système. Dans toute simulation de DM, l'état du système est caractérisé par la position de ses constituants. Leur disposition peut être aléatoire (gaz, fluide…) ou ordonnée (solide cristallin…). Dans le cas des AMF, l'étude cristallographique réalisée à la section 4.2.1 permettra d'initialiser les positions du modèle d'AMF proposé.

En ce qui concerne les composantes des vitesses initiales, quelles que soient leur distributions, elles tendent très rapidement (environ 30 pas de calcul dans notre cas) vers une distribution de type normale de type Maxwell-Boltzmann. On choisit donc d'effectuer directement un tirage des vitesses initiales dans cette distribution (*cf.* [Devroye 86], [Viot 08] pour la mise en œuvre numérique).

4.1.2 Système thermomécanique équivalent

4.1.2.1 Etat macroscopique

La résolution numérique des équations fournies par le PFD permet de connaître l'évolution du micro-état $\left(\vec{r}_i, \dot{\vec{r}}_i\right)_{i=1...N}$ du système. Il évolue dans un espace à 6N-dimension, appelé ensemble des micro-états Ω. Or la condition de conservation de l'énergie (*E* constante) limite cette évolution à un sous-ensemble μ de Ω. De plus la physique statistique [Honerkamp 02] nous apprend qu'à l'équilibre ces micro-états accessibles sont équiprobables. Ainsi, c'est la contribution équiprobable de l'ensemble de ces micro-états accessibles qui définit l'état macroscopique du système observé. Par conséquent, toute variable d'état macroscopique $\langle A \rangle$ est égale à la moyenne de l'observable $A(\vec{r}, \vec{p})$ lui correspondant, sur l'ensemble des micro-états accessibles. On parle alors de moyenne thermodynamique, ou de moyenne d'ensemble :

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\Omega} A(\vec{r}, \vec{p}) d\mu}{\mu(\Omega)} \tag{4.1.5}$$

En pratique, pour les simulations par DM, le calcul de la moyenne thermodynamique est inaccessible. On fait alors l'hypothèse d'ergodicité qui permet de confondre la moyenne thermodynamique $\langle A \rangle$ de l'observable *A* avec sa moyenne temporelle $\overline{A}$, calculée sur un temps n_{eq} suffisamment long (environ 5000 pas de temps dans notre cas) afin d'assurer la représentativité de la moyenne temporelle du phénomène supposé à l'équilibre :

$$\overline{A} = \frac{1}{n_{\text{eq}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{eq}}} A\left(\vec{r}^{\,k}, \vec{p}^{\,k}\right) \approx \lim_{n_{\text{eq}} \to \infty} \frac{1}{n_{\text{eq}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{eq}}} A\left(\vec{r}^{\,k}, \vec{p}^{\,k}\right) \underset{ergodicité}{\overset{hyp}{\approx}} \langle A \rangle \tag{4.1.6}$$

4.1.2.2 Grandeurs thermomécaniques

L'état macroscopique se caractérise par des grandeurs thermomécaniques macroscopiques : la température $\langle T \rangle$, la contrainte $\langle \overline{\overline{\sigma}} \rangle$ et la déformation $\langle \overline{\overline{\varepsilon}} \rangle$. Celles-ci correspondent aux moyennes des grandeurs microscopiques *T*, $\overline{\overline{\sigma}}$ et $\overline{\overline{\varepsilon}}$, dont on va maintenant donner l'expression. Ces grandeurs peuvent être définies sur l'ensemble des N atomes du système ou sur un sous-ensemble de *K* atomes, *K* compris entre 1 et *N*.

La température microscopique *T* est classiquement donnée par l'expression suivante [Diu 96], la reliant à l'énergie cinétique du système :

$$T = \frac{2}{D.K.k_B} \sum_{i=1}^{K} \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^{\,T} \dot{\vec{r}}_i \tag{4.1.7}$$

D est la dimension spatiale du système et k_B est la constante de Boltzmann.

Le volume associé à chaque atome peut être calculé par la méthode du diagramme de Voronoï (fig.4.1.3). Le volume de l'ensemble des K atomes correspond alors à la somme du volume des atomes le constituant. Dans le cas où le nombre d'atomes est important, ce volume peut être approché par l'enveloppe des K atomes (fig.4.1.3) estimée à partir des positions moyennes des atomes situées sur le bord de l'ensemble.

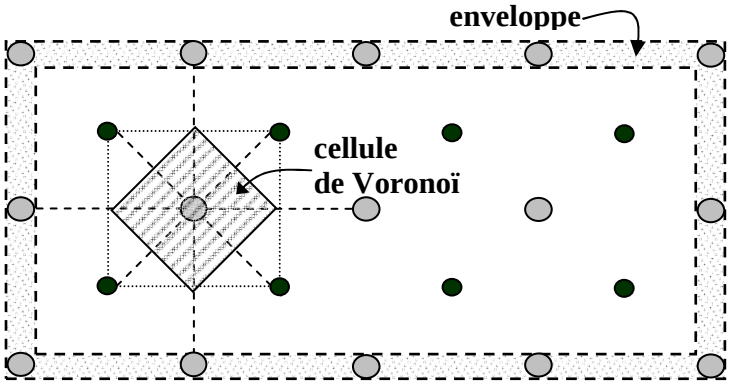


Fig.4.1.3 – *Cellule de Voronoï d'un atome et enveloppe de l'ensemble des atomes*

La connaissance du volume permet d'exprimer la pression P et le tenseur de contrainte $\overline{\overline{\sigma}}$ à partir du théorème du viriel [Clausius 70], [Allen 87], [Ruhle 08] :

$$PV = K.k_B T + \frac{1}{D}\sum_{i=1}^{K}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{K}\vec{F}_{ij}\vec{r}_{ij} \qquad \sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{D.V}\left(D.K.k_B T\delta^{\alpha\beta} + \sum_{i=1}^{K}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{K}F_{ij}^{\alpha}r_{ij}^{\beta}\right) \qquad (4.1.8)$$

Enfin, on définit la déformation locale au voisinage de chaque atome, à partir de la configuration de référence définie par l'ensemble $\left\{\vec{r}_i^{\,0}\right\}_{i=1..N}$ et de la configuration courante définie par l'ensemble $\left\{\vec{r}_i\right\}_{i=1..N}$. En effet, il existe un unique gradient de transformation discret $\overline{\overline{F}}_p$ décrivant l'évolution des positions relatives entre l'atome p et l'un de ses voisins i :

$$\vec{r}_i - \vec{r}_p = \Delta\vec{r}_{pi} = \overline{\overline{F}}_p \Delta\vec{r}_{pi}^{\,0} \qquad (4.1.9)$$

De cette façon, on associe un milieu continu au voisinage de l'atome p, dont le gradient de transformation sera estimé par $\hat{\overline{\overline{F}}}_p$, l'approximation de $\overline{\overline{F}}_p$, satisfaisant de manière optimale l'équation 4.1.9 généralisée à l'ensemble des voisins de l'atome p. On définit à cet effet l'erreur des moindres carrés pondérés :

$$\phi_p = \sum_{i=1}^{N} \left(\Delta\vec{r}_{pi} - \overline{\overline{F}}_p \Delta\vec{r}_{pi}^{\,0}\right)^T \left(\Delta\vec{r}_{pi} - \overline{\overline{F}}_p \Delta\vec{r}_{pi}^{\,0}\right) \omega\left(\frac{\left\|\vec{r}_{pi}\right\| - \min\limits_{i\in[1,N]}\left\|\vec{r}_{pi}\right\|}{r_{cut}^{\omega}}\right) \tag{4.1.10}$$

avec la fonction de pondération ω suivante [Gullet 08] :

$$\omega(r) = \begin{cases} 1 - 6r^2 + 6r^3 & : \quad r \le 1/2 \\ 2 - 6r + 6r^2 - 2r^3 & : \quad 1/2 < r < 1 \\ 0 & : \quad 1 \le r \end{cases} \tag{4.1.11}$$

et avec r_{cut}^{ω} la distance de coupure au-delà de laquelle la fonction ω est nulle (ici r_{cut}^{ω} = 8 Å). La fonction de pondération est représentée sur la figure 4.1.4. Son rôle est de donner plus d'importance dans le calcul de la déformation aux atomes situés à proximité de *i*.

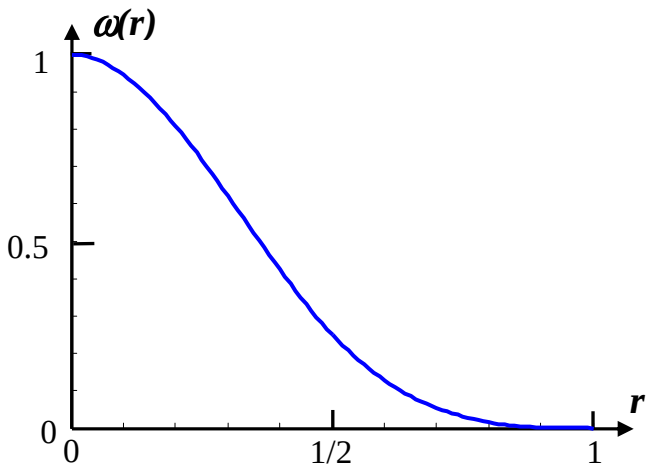


Fig.4.1.4 – *Fonction de pondération*

La connaissance du gradient de transformation approché $\hat{\overline{\overline{F}}}_p$ donne accès au tenseur des déformations, comme par exemple celui de déformation de Green-Lagrange. La déformation d'un ensemble d'atome se définit enfin comme la moyenne de la « déformation » des atomes le constituant.

4.1.2.3 Conditions aux limites périodiques

Les tailles et temps de calculs devenant très rapidement prohibitifs, la dynamique moléculaire ne peut considérer que de petits volumes de matière (jusqu'à une boîte de 57.4 nm × 57.4 nm × 109.9 nm constituée de 30 million d'atomes [Kadau 07]). De plus, de part les interactions particulières qu'ils subissent, les atomes situés à proximité de la frontière du

système possèdent une énergie différente des atomes situés au cœur du système. Cette différence est illustrée sur la figure 4.1.5 qui correspond au champ d'énergie potentielle E_{p_i} associé à chaque atome (200 atomes, potentiel LJ avec les paramètres du tableau 4.3.2) :

$$E_{p_i} = \sum_{i=1}^{N} \phi_{ij}\left(r_{ij}\right) \tag{4.1.12}$$

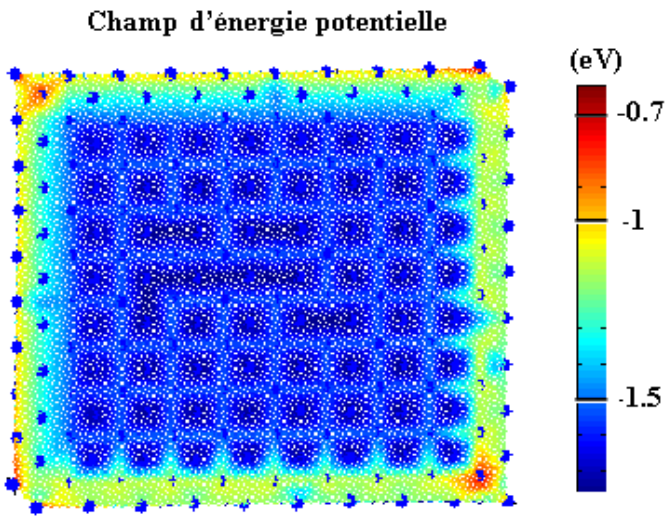


Fig.4.1.5 – *Illustration de l'effet de surface : champ d'énergie potentielle E_{p_i} dans le cas de conditions aux limites libres*

Pour contourner ces deux problèmes, on applique des conditions aux limites périodiques au système. L'échantillon s'interprète alors comme la cellule de base d'un milieu périodique infini. La figure 4.1.6 illustre le principe de cette schématisation : l'échantillon (contenu dans une boîte) est reproduit de manière virtuelle et à l'identique sur chacun de ses bords. Par exemple l'atome 1' représente la reproduction virtuelle de l'atome 1. Ainsi, les atomes situés sur les bords de l'échantillon interagissent avec les atomes virtuels voisins, il n'y a plus d'énergie de surface. Si l'un des atomes de l'échantillon est amené à sortir de la boîte par l'un de ses cotés, comme par exemple l'atome 2, il devient en se déplaçant un atome virtuel (ici 2^{+}'). Il réapparaît alors par périodicité sur le coté opposé sous la forme d'un atome réel (ici 2^{+}). Les formes de boîte les plus simples sont parallélépipédiques. Néanmoins, des symétries plus complexes ont aussi été proposées, par exemple dans [Allen 86]. Naturellement, la forme de la boîte retenue induit un biais car elle impose de fait sa symétrie au système [Liu 04]. Dans le cas de solides cristallins, il est donc nécessaire d'utiliser des formes de boîte cohérentes avec la cristallographie, ce qui peut s'avérer délicat dans le cas de la transformation martensitique puisque la symétrie de la phase austénitique et différente de

celle de la phase martensitique. Dans ce travail, la forme retenue est un pavé, respectant la symétrie cubique de la phase austénitique (*cf.* section 4.2.1).

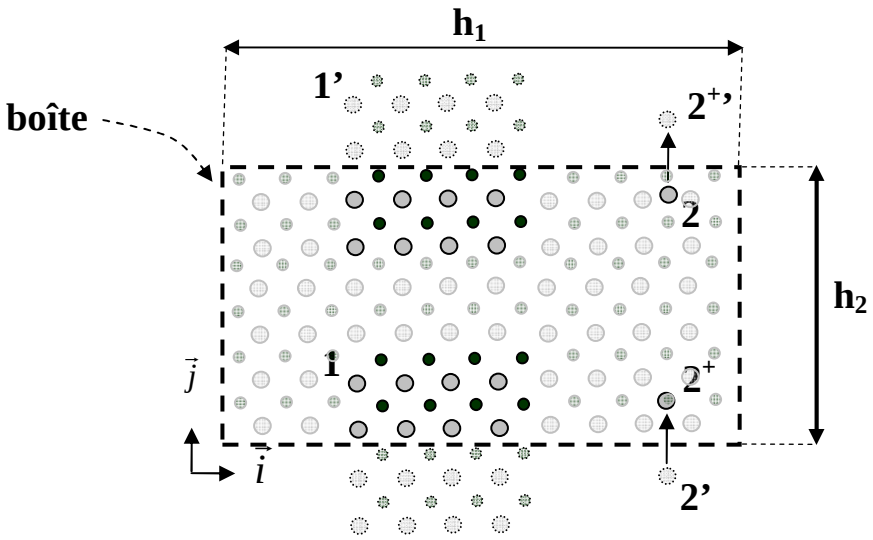


Fig.4.1.6 – *Conditions aux limites périodiques*

Le second intérêt des conditions aux limites périodiques est de pouvoir définir facilement le volume et le tenseur de déformation de l'échantillon. Dans le cas général d'une boîte parallélépipédique de coté (h_1,h_2,h_3), on peut définir un tenseur $\overline{\overline{h}} = \left(h_1.\vec{i}, h_2.\vec{j}, h_3.\vec{k}\right) = \left(\vec{h}_1, \vec{h}_2, \vec{h}_3\right)$, dont le déterminant est égal au volume de l'échantillon, $V = \det \overline{\overline{h}}$. Pour introduire la notion de déformation, on commence par exprimer les positions initiales des atomes $\vec{r}_0$ (*resp.* courantes $\vec{r}$) en fonction du tenseur $\overline{\overline{h}}_0$ (*resp.* $\overline{\overline{h}}$) et des coordonnées généralisées $\vec{s}$ [Parinello 81] :

$$\vec{r}_0 = \overline{\overline{h}}_0 \vec{s} \qquad\qquad \vec{r} = \overline{\overline{h}}\,\vec{s} \tag{4.1.13}$$

On peut alors définir le tenseur métrique du système initial $\overline{\overline{G}}_0 = \overline{\overline{h}}_0^{\,T}\overline{\overline{h}}_0$ (resp. du système courant $\overline{\overline{G}} = \overline{\overline{h}}^{\,T}\overline{\overline{h}}$) et le produit scalaire associé. Dans la configuration déformée, ce produit scalaire définit le tenseur de Cauchy-Green droit $\overline{\overline{C}} = \overline{\overline{F}}^{\,T}\overline{\overline{F}}$ [Rougée 97] :

$$\left\langle d\vec{r}, d\vec{r}\right\rangle = d\vec{r}^{\,T} d\vec{r} = d\vec{s}^{\,T}\overline{\overline{h}}^{\,T}\overline{\overline{h}}\,d\vec{s} = d\vec{r}_0^{\,T}\overline{\overline{C}}\,d\vec{r}_0 = d\vec{s}^{\,T}\overline{\overline{h}}_0^{\,T}\overline{\overline{C}}\,\overline{\overline{h}}_0 d\vec{s} \Rightarrow \overline{\overline{C}} = \overline{\overline{h}}_0^{-T}\overline{\overline{h}}^{\,T}\overline{\overline{h}}\,\overline{\overline{h}}_0^{-1} \tag{4.1.14}$$

à partir duquel on calcul le tenseur de Green-Lagrange :

$$\overline{\overline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\left[\overline{\overline{C}} - \overline{\overline{I}}\right] = \frac{1}{2}\left[\overline{\overline{h}}_0^{-T}\overline{\overline{h}}^{\,T}\overline{\overline{h}}\,\overline{\overline{h}}_0 - \overline{\overline{I}}\right] \tag{4.1.15}$$

Remarquons enfin qu'il est possible de limiter les conditions aux limites périodiques à une direction. On dira alors que les conditions aux limites sont mixtes.

4.1.3 Echange d'énergie avec l'extérieur

Jusqu'à présent nous avons considéré que le système était isolé et conservatif, (ensemble microcanonique en physique statistique). Si maintenant le système est en contact avec l'extérieur, les échanges d'énergie par transfert thermique et par travail mécanique vont faire évoluer l'ensemble μ des micro-états accessibles au système, et par définition son état d'équilibre macroscopique (*cf.* éq.4.1.5). Cet apport d'énergie peut être local, c'est-à-dire limité à quelques atomes, ou global, c'est-à-dire réparti sur tout le système.

4.1.3.1 Effets thermiques

En ce qui concerne la modélisation des transferts thermiques dans un système géré par la DM, on a vu à l'équation 4.1.7 la relation de proportionnalité suivante :

$$T \propto E_c \propto \sum_i \left(\dot{\vec{r}}_i\right)^2 \tag{4.1.16}$$

Pour faire évoluer la température, on peut donc agir sur les vitesses en les rééchelonnant par un coefficient χ. Ainsi, en notant par une étoile les grandeurs avant rééchelonnage, on aura :

$$\dot{\vec{r}}_i = \chi.\dot{\vec{r}}_i^{\,*} \Rightarrow E_c = \chi^2.E_c^* \Rightarrow T_i = \chi^2.T_i^* \tag{4.1.17}$$

Pour atteindre une température donnée T_{ext} (température extérieure au système), le coefficient χ le plus immédiat est $\sqrt{T_{ext}/T_i^*}$ [Ruhle 07]. On aura alors, après un seul pas de temps, $T_i = T_{ext}$. Ce type de transfert thermique ne sera utilisé que pour initialiser la température du système.

Pour une sollicitation plus progressive, on peut choisir le coefficient de Berendsen [Berendsen 84], [Ruhle 07] :

$$\chi = \sqrt{1 + \frac{dt}{\tau_T}\left(\frac{T_{ext}}{T_i^*} - 1\right)} \tag{4.1.18}$$

avec τ_T une constante de temps. En notant toujours par une étoile les grandeurs avant rééchelonnage, la température au cours du processus de rééchelonnage sera :

$$T = \frac{2}{DNk_B}\frac{1}{2}m_i\dot{\vec{r}}_i^{\,T}\dot{\vec{r}}_i = \frac{2}{DNk_B}\frac{1}{2}m_i\left(\chi.\dot{\vec{r}}_i^{\,*}\right)^T\chi.\dot{\vec{r}}_i^{\,*} = \chi^2 T_i^* = T_i^* + \frac{dt}{\tau_T}T_{ext} - \frac{dt}{\tau_T}T_i^* \tag{4.1.19}$$

Cette expression peut se réécrire comme :

$$T_i^* - T_{ext} = -\tau_T \frac{\left(T_i - T_i^*\right)}{dt} = \tau_T \frac{dT_i}{dt} \qquad \Rightarrow \qquad T_i = T_0 e^{-\frac{t}{\tau_T}} + T_{ext} \tag{4.1.20}$$

La température tend donc asymptotiquement vers la température T_{ext} sous le contrôle de la constante de temps τ_T. Cette méthode est généralement appelée thermostat de Berendsen. C'est cette sollicitation qui a été retenue par la suite dans les simulations, pour sa simplicité d'implémentation.

Ce transfert thermique s'accompagne d'un apport d'énergie $\Delta E_{p_i}^*$, et cela à chaque pas de temps et pour chaque atome :

$$E_{p_i} = \chi^2 . E_{p_i}^* = E_{p_i}^* + \frac{dt}{\tau_T}\left(\frac{T_{ext}}{T_i^*} - 1\right) E_{p_i}^* = E_{p_i}^* + \Delta E_{p_i}^* \tag{4.1.21}$$

L'inconvénient de cette méthode numérique, est qu'elle génère un système physique différent de ce que prévoit la physique statistique (ensemble canonique). Pour s'approcher de la théorie, des méthodes stochastiques [Hansmann 96], [Skeel 99] et des méthodes de système étendu[20] [Hoover 06], [Tuckerman 00], [Orriols 03], [Legoll 04] on été développées. Pour plus de détails, le lecteur intéressé pourra se reporter par exemple à la thèse de [Legoll 04] qui traite de cette problématique.

4.1.3.2 Travail mécanique

En ce qui concerne la modélisation des chargements mécaniques deux solutions ont alors été envisagées :

1) La première consiste à contrôler le déplacement moyen de certains atomes, par exemple à imposer une extension des atomes situés sur les faces inférieure et supérieure de l'échantillon. Cette méthode a déjà été utilisée dans le cas des AMF [Kastner 06], [Sato 07].

2) Dans le cas de conditions aux limites périodiques, la déformation de l'échantillon est directement liée aux dimensions $\overline{\overline{h}}$ de la boîte de périodicité (éq.4.1.15). Il suffit donc de rééchelonner la boîte par un coefficient $\overline{\overline{\chi}}$ pour solliciter l'échantillon ($\overline{\overline{h}} = \overline{\overline{\chi}}.\overline{\overline{h}}^*$). Dans le cas de la traction, seule une dimension varie selon une vitesse v_T : $h_{11} = v_T . h_{11}^*$

[20] Qui se base sur la minimisation de l'énergie du système en utilisant la méthode du Lagrangien augmenté

Dans le cas d'une traction dans la direction de l'orientation cristallographique, la première méthode pose des problèmes lors de la transformation martensitique, elle bloque la transformation. Par conséquent, nous avons privilégié la seconde méthode, avec la possibilité de se restreindre à des conditions aux limites mixtes. D'autres propositions existent dans la littérature (barostat de Berendsen [Ruhle 08], système étendu [Anderson 80], [Parinello 81], [Souza 97], [Hernandez 03], [Okumura 06] couplage DM/EF [Legoll 04-06], [Gu 07], [Anciaux 07]), cependant dans le cadre de ce travail, l'implémentation de ces méthodes n'a pas pu être envisagée faute de temps.

4.1.4 Bilan énergétique

1) Premier principe de la thermodynamique

Dans le cas du système étudié par DM, l'énergie cinétique K du système est égale à :

$$K = \frac{1}{2} m_S \vec{v}_S{}^2 \qquad \text{où } m_S = \sum_{i=1}^{N} m_i \qquad \text{et } \vec{v}_S = \frac{1}{m_S} \sum_{i=1}^{N} m_i \dot{\vec{r}}_i \tag{4.1.22}$$

avec m_S la masse du système et $\vec{v}_S$ sa vitesse qui décrit son mouvement de solide rigide. Dans le cas d'un processus mécaniquement quasi-statique, on s'assure que cette vitesse est nulle en rééchelonnant régulièrement les vitesses des atomes [Allen 86]. L'énergie mécanique E_m est alors égale à :

$$E_m = U + K \underset{\vec{v}_S = \vec{0}}{=} U = E = E_p + E_c \tag{4.1.23}$$

avec l'énergie interne U qui est égale à la somme de l'énergie potentielle E_p et de l'énergie cinétique E_c.

Le premier principe de la thermodynamique associé au théorème de l'énergie cinétique permet d'écrire :

$$dU = -\delta W_{\text{int}} + \delta Q \tag{4.1.24}$$

avec δW_{int} le travail des efforts intérieurs égal à :

$$-\delta W_{\text{int}} = \int dV . \overline{\overline{\sigma}} : d\overline{\overline{\varepsilon}} = V . \overline{\overline{\sigma}} : d\overline{\overline{\varepsilon}} \tag{4.1.25}$$

et δQ les transfert de chaleur égaux à (thermostat de Berendsen – éq.4.1.21) :

$$\delta Q = \sum_{i=1}^{N} \Delta E_{c_i}^{*} \tag{4.1.26}$$

On peut donc réécrire la relation 4.1.24 comme :

$$dU = dE = dE_c + dE_p = V.\overline{\overline{\sigma}} : d\overline{\overline{\varepsilon}} + \sum_{i=1}^{N} \Delta E_{c_i}^* \tag{4.1.27}$$

2) Energie libre

La variation de l'énergie libre F peut s'exprimer en fonction de la variation d'énergie interne :

$$dF = dU - TdS - SdT = V.\overline{\overline{\sigma}} : d\overline{\overline{\varepsilon}} + \sum_{i=1}^{N} \Delta E_{c_i}^* - TdS - SdT \tag{4.1.28}$$

Cependant la variation d'énergie libre est simplifiée dans le cas d'un essai réversible ($\delta Q = TdS$) isotherme :

$$dF = V.\overline{\overline{\sigma}} : d\overline{\overline{\varepsilon}} \tag{4.1.29}$$

Dans un cadre plus général, le calcul de la variation d'énergie libre devient plus difficile du fait de l'évaluation de l'entropie S (*cf.* [Kadau 01a]). D'autres méthodes pour le calcul de l'énergie libre ont été proposées dans la littérature [Chipot 96], [Schurhammer 01], [Darve 01], [Geneste 09] mais n'ont pas été explorées dans ce travail, faute de temps.

4.2 La méthode de DM pour l'étude des AMF

La modélisation du comportement des AMF par DM nécessite d'effectuer deux choix qui vont conditionner la microstructure de l'échantillon numérique étudié : celui du potentiel atomique, présenté à la section précédente, et celui des positions initiales des atomes. C'est ce dernier point que nous allons traiter maintenant par le biais de rappel sur la description cristallographique des AMF. Ensuite, nous présenterons quelques exemples issus de la littérature traitant des AMF.

4.2.1 Cristallographie et microstructure des AMF

4.2.1.1 Cristallographie des transformations de phase displacives

De manière générale, les transformations de phase sans diffusion, appelées displacives, se caractérisent par une phase haute température, appelée austénite, et une phase basse température, appelée martensite, par analogie à la transformation austéno-martensitique dans les aciers. Outre les alliages à mémoire de forme, d'autres matériaux tels que les céramiques [Kelly 02], ou encore les pérovskites [Dove 97], [Fu 04], présentent ce type de transformation. La diffractométrie rayon X permet d'accéder à la symétrie des différentes phases et de caractériser leurs paramètres de maille. Le tableau 4.2.1 regroupe un certain nombre de résultats de ce type d'études, qui peuvent être complétés par les compilations de [Zanzotto 99], [Lexcellent 04], [Otsuka 05], [Balandraud 07]. La notations des phases austénitiques et martensitiques suivent les notations de Strukturbericht et de Ramsdel, définies dans l'annexe A. Le paramètre de maille de la phase austénitique y est noté a_0, tandis que ceux de la phase martensitique sont notés (a, b, c, θ).

matériau	article	austénite	a_0 (Å)	martensite	a (Å)	b (Å)	c (Å)	θ (°)
Zr	[Goldak 66]	A2		H	3.233	a	5.149	
AuCd	[Otsuka 07]	B2	3.342	H	8.116	a	5.804	
$Fe_{80}Ni$	[Reed 69]	B2	2.87	B2	3.583			
$CuZn_{24.7}Al_{11}$	[Yang 86]	DO_3	5.87	18R	4.45	5.27	38.66	89
$CuAl_{10}Be_{0.8}$	[Kuo 06]	DO_3	5.88	18R	4.32	5.21	38.28	
$CuAl_{11.8}Be_{0.42}$	[Balo 02]	DO_3	5.77	18R	4.48	5.28	38.04	86.03
$CuAl_{11.8}Be_{0.47}$	[Balo 01]	DO_3	5.77	18R	4.45	5.18	38	88
$CuAl_{12.3}Be_{0.52}$	[Moreau 95]	DO_3	5.82	18R	4.46	5.22	38.25	83.3
$CuAl_{24.2}Be_{2.95}$	[Lexcellent 04]	DO_3	5.82	6M	4.46	5.22	12.75	83.3
$NiTi_{50}$	[Künzi 04]	B2	3.01		2.88	4.12	4.62	96.8
$NiMn_{50}$	[Gao 06]	B1	3.62	$L1_0$	3.74		3.52	

Tab.4.2.1 – *Structure cristalline et paramètres de maille de divers matériaux à transformation de phase*

En pratique, le type d'information contenue dans le tableau 4.2.1 permet d'initialiser les positions des atomes dans le système utilisé en DM. Très souvent, les AMF sont composés de 2 ou 3 types d'atomes. Dans le cas d'alliages binaires, on alterne ainsi les types d'atome. Si leur répartition n'est pas équiatomique, les atomes excédentaires peuvent remplacer les atomes déficitaires de manière aléatoire [Ozgen 04], [Rubini 93], [Abromeit 08]. Dans le cas d'alliages ternaires, la disposition statistique des atomes se base sur des études cristallographiques spécifiques au matériau en question, comme illustré dans le cas du CuZnAl dans [Satto 00] et celui du CuAlBe dans [Moreau 01].

Une information importante fournie par le tableau 4.2.1 correspond aux paramètres de maille de l'austénite et de la martensite après transformation. Ces paramètres permettent de définir le tenseur gradient de transformation $\overline{\overline{F}}_I$ correspondant [Abeyaratne 01]. Ce sera un des buts de la simulation de DM de retrouver ces deux grandeurs caractéristiques de la cinétique de la transformation et de les comparer à celles de la littérature.

4.2.1.2 Microstructure des AMF

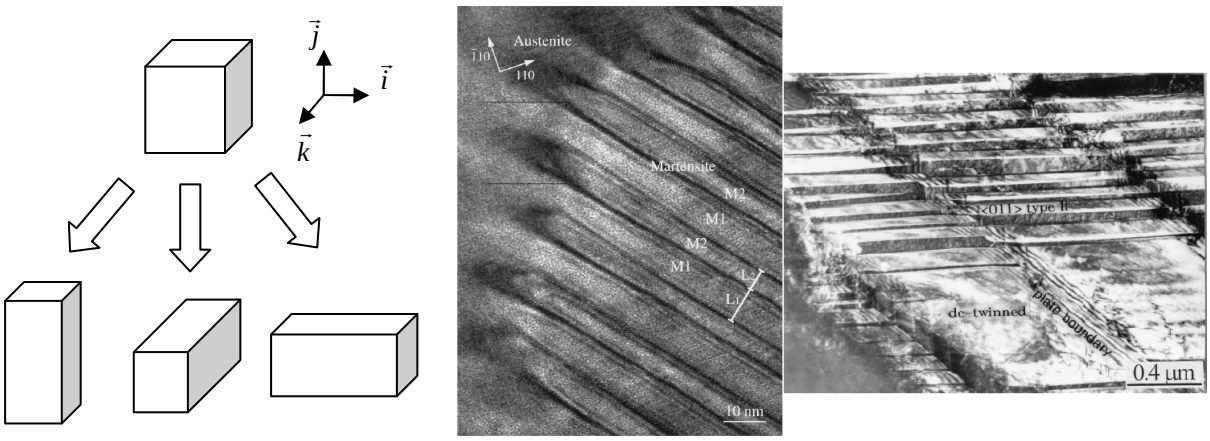
La phase martensitique est moins symétrique que la phase austénitique, c'est-à-dire que l'ordre de son groupe d'espace est plus faible. Cette perte de symétrie rend possible l'apparition (équiprobable, à contrainte nulle) de plusieurs variantes de martensite, comme le montre la figure 4.2.1.a dans le cas d'une transformation cubique-tétragonale. Dans cette illustration la phase tétragonale la plus en bas à gauche n'est pas invariante sous l'action d'une rotation de 90° selon les axes $(\vec{i},\vec{k})$. Cette perte de symétrie peut être compensée par l'existence possible de deux autres variantes de martensite illustrées sur la figure 4.2.1.a. Cette propriété permet de connaître, *a priori*, le nombre de variantes et permet de générer à partir du tenseur de Bain $\overline{\overline{U}}_I$ d'une des variantes, le tenseur de Bain $\overline{\overline{U}}_J$ des autres variantes [Abeyaratne 01] :

$$\overline{\overline{U}}_J = \overline{\overline{R}}^T \overline{\overline{U}}_I \overline{\overline{R}} \tag{4.2.1}$$

avec $\overline{\overline{R}}$ un tenseur de rotation laissant invariant la phase austénitique.

La possible coexistence de ces variantes est en partie responsable de toute la richesse et de la complexité de la transformation de phase dans les AMF. En effet, elles permettent au matériau d'accommoder les contraintes thermomécaniques environnantes en développant plusieurs variantes. Une organisation microstructurale particulière apparait alors, comme illustrée sur les clichés de microscopie électronique 4.2.1.b-c. De nombreux articles sont dédiés à l'étude expérimentale de ces microstructures [Zhang 99], [Balo 02], [Kuo 06], [Sari 06]... D'autre études théoriques s'intéressent à la prédiction des microstructures possibles

pour une symétrie donnée d'austénite [James 00], [Abeyaratne 01]. La simulation numérique de ces microstructures peut être réalisée à différentes échelles et à l'aide de différentes méthodes : champs de phases [Albers 04], [Finel 09], DM [Kastner 09].



(a) **(b)** CuZnAl [Portier 99] **(c)** NiTi [VanHumbeeck 99b]

Fig.4.2.1 – *(a) Variantes de martensite dans le cas de transformation cubique-tétragonale (b-c) Microstructure typique des AMF (jumelage, ou twinning, de deux variantes M1 et M2)*

4.2.2 Diversité de l'utilisation – Intérêt de l'approche

Le tableau 4.2.2 regroupe un certain nombre d'études par DM déjà effectuées sur des AMF biatomiques de différentes natures et pour différentes compositions. Dans ce tableau, la dénomination $A_{50}B$ correspond à un matériau équiatomique de composants A et B. Chacune de ces études s'est intéressée à une problématique particulière. Certaines touchent plus particulièrement *(i)* au comportement des AMF, d'autres *(ii)* à l'évolution de la microstructure [Hildebrand 08], [Ackland 08], [Kastner 09], ou bien *(iii)* à la conséquence d'un choc [Kadau 07] ou encore *(iv)* à l'influence d'un défaut sur le comportement. Dans ce dernier cas, le défaut peut être dû à la présence d'un précipité [Sato 07], d'une dislocation [Rifkin 04], [Kuznetsov 01], d'un joint de grain [Abromeit 08], d'une fissure [Grujicic 97], [Guo 07] ou encore d'une surface libre [Grujicic 95], [Kadau 01b], [Ackland 08]. Ces défauts induisent une concentration des contraintes qui favorisent la nucléation de la transformation de phase.

	matériau	**D**	**N**	**CL**	**thermique**	**mécanique**	**potentiel**
[Kadau 01b]	$Fe_{80}Ni$	3	1000	pério.	syst.étendu		Baskes
[Kadau 01b]	$Fe_{80}Ni$	3	1 million	libre	syst.étendu		Baskes
[Kadau 02]	$Fe_{80}Ni$	3	1000	pério.	syst.étendu	syst.étendu	Baskes
[Grujicic 97]	$Fe_{60-80}Ni$	3	3217	mixte	Berendsen	DM/EF	Johnson
[Grujicic 96]	$Ti_{75-85}V$	3	960-	pério.	Berendsen		Johnson
[Abromeit 08]	$Ni_{60-65}Al$	3	65536 - 123646	pério.	Berendsen	Berendsen	Farkas
[Rubini 93]	$Ni_{64}Al$	3	1008	pério.	syst.étendu	syst.étendu	Baskes
[Ozgen 04]	$Ni_{62.5}Al$	3	1024	pério.	rééchelon.	syst.étendu	LJ
[Kazanc 08]	$Ni_{62.5}Al$	3	2000	pério.	rééchelon.	syst.étendu	Johnson
[Guo 07]	NiAl	3	~130000	pério.	MaxBol.		Farkas
[Rifkin 04]	$Ni_{62.5}Al$	3	4500	mixte	Ø	Ø	Farkas
[Sato 07]	$Ni_{50}Ti$	3	1280-	pério/libre		bloq.atome	Finnis
[Hildebrand	$Ni_{50}Mn$	2	2800	pério.	syst.étendu	syst.étendu	LJ
[Shimono 06]	$A_{50}B$	3	?	pério.	syst.étendu	syst.étendu	LJ
[Kastner 03]	$A_{50}B$	2	41-298-	libre/at.fix	rééchelon.	Ø	LJ
[Kastner 06]	$A_{50}B$	2	41	libre/at.fix	rééchelon.	bloq.atome	LJ
[Kastner 09]	$A_{50}B$	2	9216 - 262144	libre	rééchelon.	Ø	LJ
Ce travail	$A_{50}B$	2	200 à	pério/mixte	Berendsen	boîte pério.	LJ

Tab 4.2.2 – *Etude des matériaux de transition par DM dans la littérature (D est la dimension du problème, N le nombre de particules, CL le type de conditions aux limites)*

La présente étude se positionne parmi la première catégorie de ces études. Notre sujet est le comportement des AMF. En effet, on souhaite construire un modèle d'AMF pour lequel

apparait une transformation martensitique, et on souhaite étudier qualitativement l'influence de la dimension du système sur le comportement du matériau, notamment sur l'évolution de l'énergie libre. On va voir dans ce qui suit la capacité de modéliser la transformation martensitique par une approche de DM.

On trouve également dans le tableau 4.2.2 des informations sur les méthodes de DM choisies par les différents auteurs. Une première remarque est la relative diversité des approches. Néanmoins, le potentiel de type Lennard-Jones LJ est quasiment restreint aux modélisations heuristiques des AMF $A_{50}B$, comme la notre, les autres études à portée plus qualitatives utilisant des potentiels de type EAM (Baskes, Johnson, Farkas, Finnis-Sinclair). En ce qui concerne les sollicitations, l'emploi de l'approche des systèmes étendus (syst.étendu) est relativement rependu. On trouve néanmoins des auteurs qui utilisent le couplage DM/EF, d'autres la méthode par restriction du mouvement d'atomes (bloq.atome), d'autres encore les méthodes de rééchelonnage, avec, éventuellement, l'utilisation de la distribution de Maxwell-Boltzmann (MaxBol.). Pour finir, on peut constater le grand nombre d'études comptant seulement quelques milliers d'atomes.

La dernière ligne du tableau 4.2.2 correspond aux essais réalisés dans le cadre de ce manuscrit. Etant donné l'objectif uniquement qualitatif de notre étude, les choix de se placer dans un espace bidimensionnel avec un potentiel de LJ, une sollicitation thermique de Berendsen et une sollicitation mécanique imposée par le biais de la boîte périodique[21] sont cohérents avec le reste de la littérature. Notons également que le nombre d'atomes considéré dans les simulations est en bonne place vis-à-vis de la littérature.

Dans ce qui suit nous allons détailler quelques résultats, correspondant aux articles cités dans le tableau 4.2.2. Ces exemples vont permettre :

1) de montrer que la DM permet de calculer une énergie libre non convexe semblable à celle proposée dans les modèles cristallographique (*cf.* Chapitre I). C'est justement la raison qui nous a poussés à développer une approche atomique : retrouver le potentiel non convexe proposés par ces modèles, et étudier son évolution avec la dimension de l'échantillon.

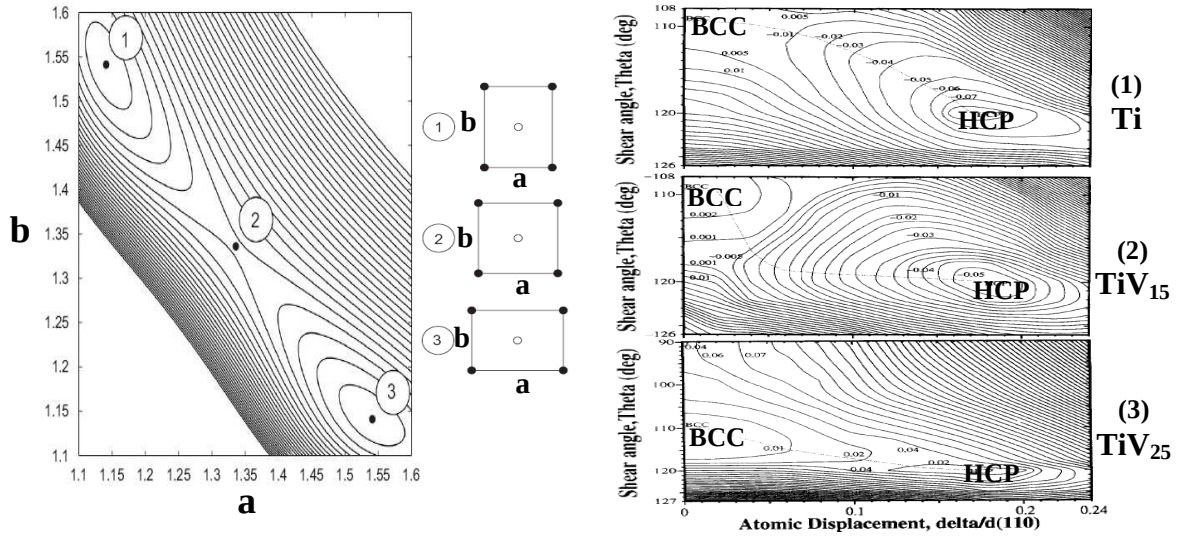
2) de confirmer que le comportement modélisés est bien celui d'un AMF, avec en particulier la possibilité de générer une transformation T-induite et sa microstructure, mais aussi une transformation σ-induite, pour finalement construire un diagramme de phase.

3) d'illustrer les implications des conditions aux limites sur le comportement.

[21] Remarquons que la sollicitation mécanique par la méthode des systèmes étendus utilise également la déformation de la boîte de périodicité, en l'asservissant de manière à ce qu'il tende vers une dimension cible.

4.2.2.1 Caractérisation des phases stables

Le premier intérêt de l'approche par DM consiste à obtenir les phases stables du système. Ces dernières peuvent être obtenues rapidement en résolvant l'équilibre statique du système. La configuration d'équilibre correspond alors à l'état du système au zéro absolu. Nous appellerons mécanique moléculaire cette restriction statique de la DM. L'énergie potentielle est vue comme une fonction des paramètres de maille du réseau cristallin, dont les extrema correspondent aux phases du système. Les figures 4.2.2 représentent les isovaleurs de l'énergie potentielle en fonction de certains paramètres de maille. La figure 4.2.2.a met en évidence la présence de deux phases tétragonales stables, notées 1 et 3, et une phase cubique métastable, notée 2, dont les paramètres de mailles sont notés *a* et *b*. De même les figures 4.2.2.b permettent d'étudier l'évolution de la stabilité de la phase hexagonale compacte (HCP) par rapport à la phase cubique centrée (BCC) en fonction de l'ajout de vanadium, cette phase devenant métastable pour 25% at. de vanadium.

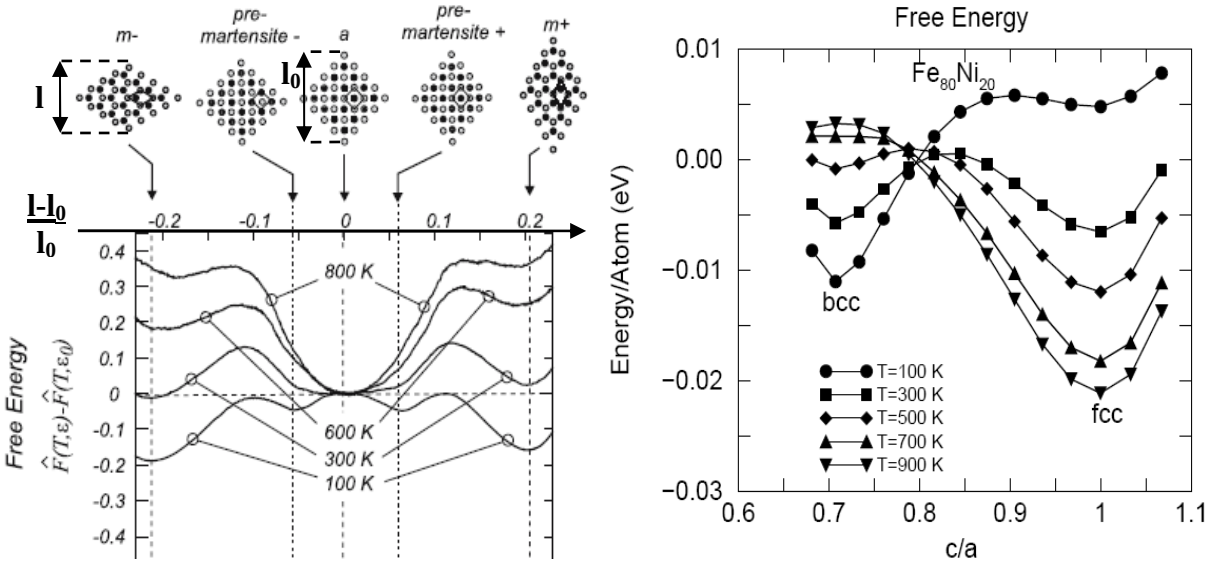


(a) biatomique, potential LJ [Hildebrand 08] **(b)** biatomique, potential EAM [Grujicic 96]

Fig 4.2.2 – *Energie potentielle du système en fonction des paramètres de maille*

4.2.2.2 Potentiel énergie libre

Revenons à la DM. On a vu dans la section précédente que l'on pouvait calculer la variation d'énergie libre du système soumis à une sollicitation isotherme (éq.4.1.29). Les figures 4.2.3 reportent les énergies libres de deux études de la littérature, en fonction d'un paramètre géométrique lié à la déformation pour différentes températures. On observe la présence de deux phases qui sont, pour le graphe 4.2.3.a, cubique centrée et hexagonale, et pour le graphe 4.2.3.b, cubique centrée (BCC) et cubique face centrée (FCC). Dans les deux cas, la phase cubique centrée est métastable à basse température, puis gagne en stabilité lorsque la température augmente, au détriment de la seconde phase.



(a) [Kastner 06] **(b)** [Kadau 02]

Fig 4.2.3 – *Evolution de l'énergie libre (Free Energy) en fonction de la température*

Ce type d'énergie libre à plusieurs puits de potentiel peut être construit théoriquement, soit dans le cadre de l'approche de Landau, par un développement de Taylor [Toledano 87], [Izyumov 84], [Toledano 96], [Heritier 98], soit en s'appuyant sur l'hypothèse de Cauchy-Born [Zanzotto 96], [Blanc 01] pour réaliser un changement d'échelle [Vedentam 05, Zanzotto 03]. Dans l'une ou l'autre de ces approches, le potentiel est bâti à partir des polynômes invariants sous l'action du groupe de symétrie du cristal [Smith 58], [Thionnet 03]. La figure 4.2.4 reporte l'un de ces potentiels d'énergie libre. On retrouve d'une part les trois puits de potentiels mis en évidence par DM (fig.4.2.3) et d'autre part le même type de variation du potentiel en fonction de la température. Ces types de potentiels, présentés ici à l'échelle atomique, correspondent à ceux proposés dans les modèles d'énergie libre basés sur la cristallographie [Falk 90], [Zanzotto 03], [Vedentam 05] (*cf.* chapitre I).

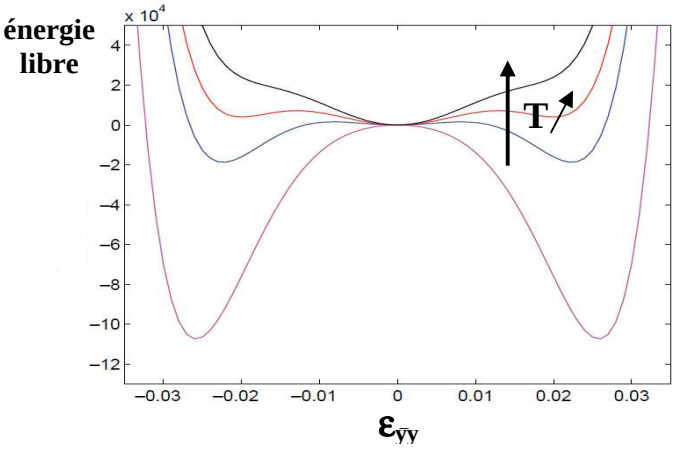


Fig 4.2.4 – *Energie libre de type Landau [Albers 04]*

4.2.2.3 Transition de phase induite thermiquement et mécaniquement

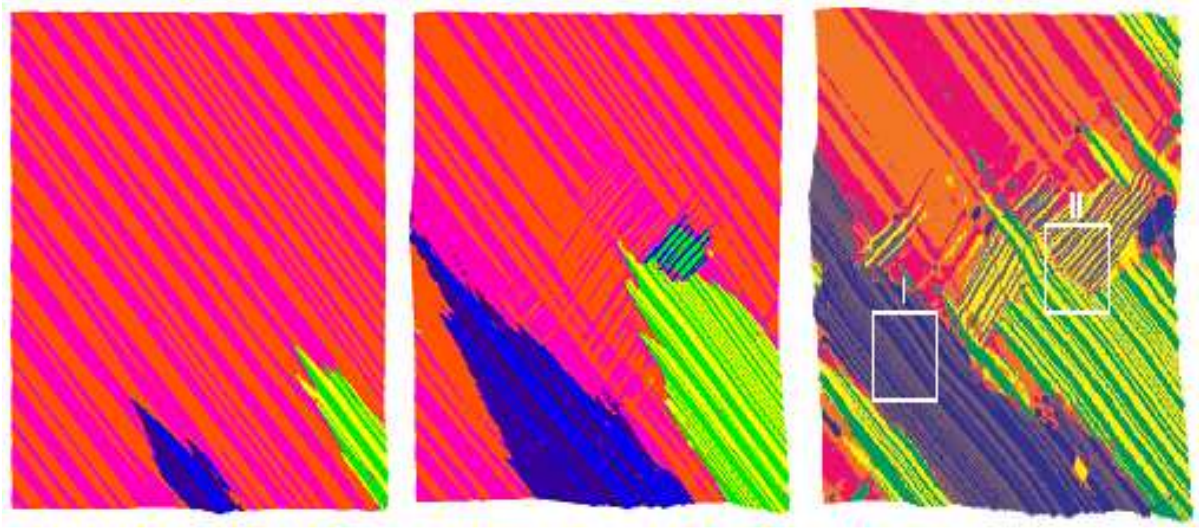
La DM permet aussi de rendre compte des changements de phase subis par le système sous l'effet de sollicitations thermiques et/ou mécaniques. Par exemple, le développement de la microstructure, qui correspond à un phénomène coopératif fortement dépendant de l'échelle de description. Ce phénomène peut être directement mis en évidence par des analyses de DM. Il en va de même de la réponse thermomécanique accompagnant la transformation.

Dans un premier temps, nous allons nous appuyer sur les variations de l'énergie libre présentées sur la figure 4.2.3. En effet l'énergie libre permet de prévoir l'évolution de la stabilité des phases du système en fonction du chargement imposé. Lorsque la température diminue, la phase martensitique devient stable ce qui provoque la transition de phase induite thermiquement (T-induite). De manière similaire, lorsqu'on déforme le système, celui-ci va passer du puits de potentiel correspondant à l'austénite à celui de la martensite, cette fois la transformation est mécaniquement induite (σ-induite). On rappelle encore une fois que l'ensemble des exemples présentés ici correspond aux articles répertoriés dans le tableau 4.2.2. Par conséquent nous renvoyons le lecteur à ce tableau pour connaître exactement les conditions d'essais.

La transformation de phase induite thermiquement a été simulée en DM par différents auteurs. Nous distinguerons les essais présentant une surface libre [Kastner 03-09], [Abromeit 08], [Kadau 01b], de ceux n'en présentant pas [Shimono 06], [Kazanc 08], [Kadau 02], [Ozgen 03]. La figure 4.2.5 présente une transformation T-induite avec des conditions limites libres sur un échantillon bidimensionnel. La martensite, représentée en bleu, bleu foncé, vert ou jaune selon les variantes, commence par nucléer sur les surfaces libres de l'échantillon (fig.4.2.5.a). Puis la transformation se propage, complexifiant la microstructure et le nombre de variantes (fig.4.2.5.b-c). Un résultat similaire a été obtenu en 3D par [Kadau 01b][22].

Dans le cas de conditions aux limites périodiques, la boîte de périodicité va imposer sa symétrie au système rendant la transformation brutale, comme l'illustre la figure 4.2.6 avec la modification brusque du rapport des paramètres de maille (a+b)/c. On remarque également sur la courbe 4.2.6 que la température de transformation austénite-martensite *A* est plus faible que celle de la transformation inverse *M*, phénomène classiquement observé lors de l'étude macroscopique par DSC de la transformation de phase des AMF.

[22] http://www.thp.uni-duisburg.de/~kai/index_1.html



(a) **(b)** **(c)**

Fig 4.2.5 – *Transformation thermiquement activée avec surface libre [Kastner 09]*[23]

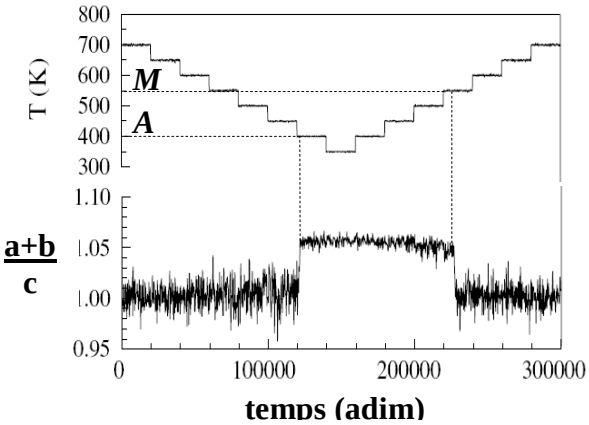


Fig 4.2.6 – *Transformation thermiquement activée sans surface libre [Kazanc 08]*

Dans le cas d'une transformation de phase induite mécaniquement, la DM permet de d'obtenir la réponse contrainte-déformation. Par exemple, la figure 4.2.7.a présente les résultats d'une traction réalisée en pilotant les atomes de deux faces opposées. Au départ, la réponse est sensiblement linéaire, puis une chute de contrainte accompagne la transformation de phase du fait du changement de cristallographie, révélée par le taux de martensite en rouge. La réponse mécanique pour l'essai représenté sur la figure 4.2.7.b présente une chute de contrainte plus douce car la sollicitation est faite ici suivant une orientation privilégiée de la martensite.

[23]Animation correspondante : http://www.ph.ed.ac.uk/cmatter/gja/Mart/suppl_information/

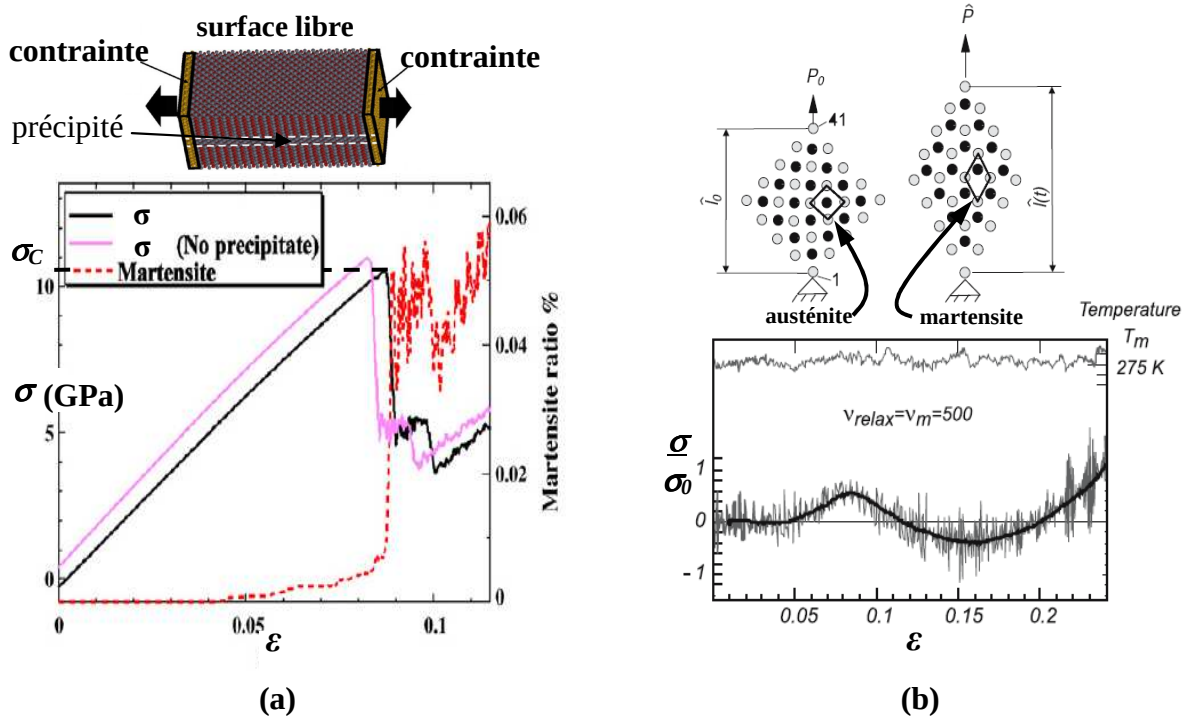


Fig 4.2.7 – *Transformation mécaniquement activée (a) déplacement imposé sur les rangées d'atomes de deux faces opposées, d'après [Sato 07] (b) déplacement imposé aux coins de l'échantillon, d'après [Kastner 06]*

Pour finir, la DM rend possible la construction du diagramme de transformation, soit en réalisant une sollicitation thermique à contrainte constante [Kazanc 08] soit, de manière équivalente, en réalisant une sollicitation mécanique à température constante [Abromeit 08]. La figure suivante présente l'une de ces études. Elle a permis de rendre compte de l'influence de la composition de l'alliage sur le diagramme de transformation :

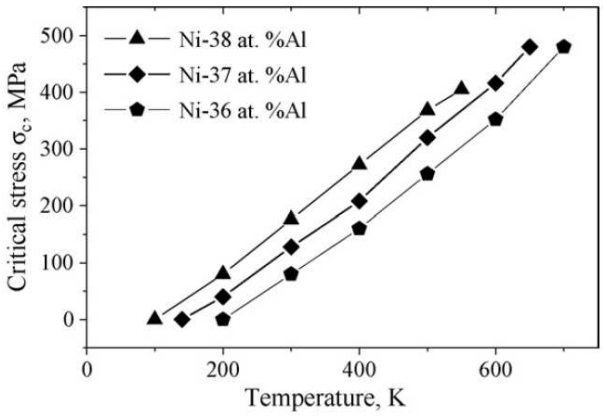


Fig 4.2.8 – *Diagramme de transformation en fonction de la composition [Abromeit 08]*

4.2.3 Outils d'analyses adaptés à l'étude de la transformation de phase martensitique

Nous avons déjà présenté de manière générale la définition du système thermomécanique ainsi que la température, la déformation et la contrainte qui lui étaient associées. Or, on a introduit au chapitre 3 le taux de phase transformée x utilisé pour construire les potentiels associés au modèle mésoscopique d'AMF. Il semble intéressant de faire de même au niveau microscopique, au cours des essais de DM. On va donc présenter dans ce paragraphe une méthode permettant de détecter les différentes phases du système et de déterminer le taux global de martensite x en cours d'essai. Cette information nous donnera la cinétique de transformation, mais permettra également d'observer la forme de l'énergie libre en fonction de ce taux de martensite.

Un second concept introduit à l'échelle mésoscopique est la chaleur latente L_0 (J.kg^{-1}) associée à la transformation de phase. Nous verrons que la transformation s'accompagne d'une redistribution brutale de l'énergie entre l'énergie potentielle E_p et l'énergie cinétique E_c du système. La chaleur latente sera naturellement reliée à l'apport thermique de la transformation, soit encore la variation d'énergie cinétique puisque $T \propto E_c$. Pour finir on définira d'autres grandeurs thermomécaniques auxquelles on a accès par l'intermédiaire de la DM.

4.3.1.1 Détection de phase et taux de martensite

La figure 4.2.9.a représente un exemple d'évolution de la géométrie du cristal au cours de la transformation : la phase austénitique, de paramètre géométrique a et b, se situe à gauche et la phase martensitique à droite. La figure 4.2.9.b correspond à l'évolution du paramètre de maille a au cours de la transformation, μ_{aA} et μ_{aM} étant ses moyennes avant et après transformation. Une méthode naturelle pour identifier la phase en présence sera donc d'établir un critère sur les paramètres de mailles [Sato 07]. Ici, par exemple, la phase sera austénitique si $\mu_a < 2.5$.

Plutôt que de nous baser sur la distance entre atome, nous avons préféré utiliser la fonction de corrélation de paire g [Viot 08]. Cette fonction indique la probabilité de trouver un atome $\vec{r}_2$ dans une coquille d'épaisseur Δr et de rayon r centrée sur l'atome $\vec{r}_1$ considéré. Cette coquille est illustrée par le schéma 4.2.10.a. La fonction de corrélation de paire se calcule selon la relation suivante, avec $N_P(r)$ le nombre d'atomes intérieurs à la coquille située à la distance r de $\vec{r}_1$.

$$g\left(r = \left\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right\|\right) = \frac{V}{N}\frac{N_P(r)}{4\pi.r^2\Delta r} \propto \frac{N_P(r)}{r^2} \qquad (4.2.2)$$

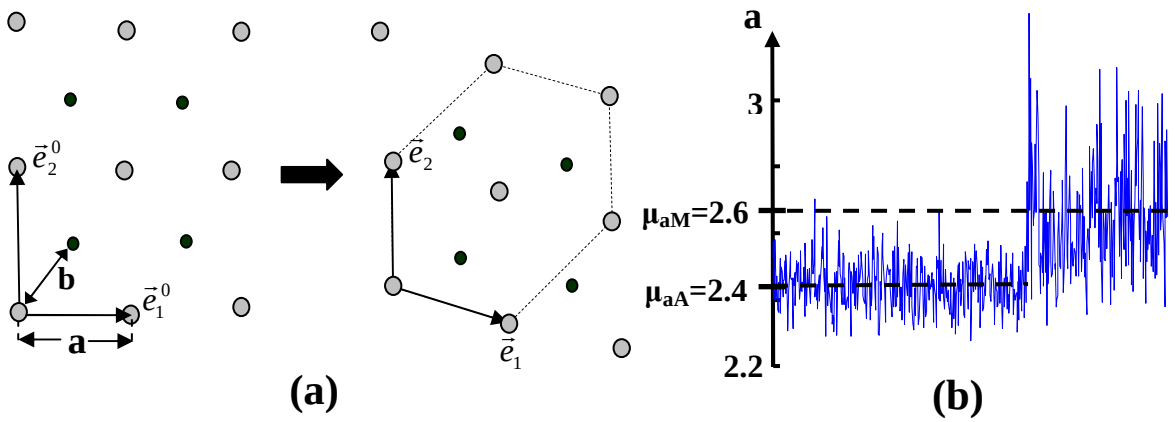


Fig.4.2.9 – *(a) Evolution de la géométrie au cours de la transformation*
(b) Evolution la longueur de maille a

La figure 4.2.10.b présente un exemple de graphe de cette fonction pour un système austénitique, en pointillé, et martensitique, en trait plein. On identifie les caractéristiques (*a*, *b*) aux deux premiers pics de ces courbes. Les phases sont identifiées en appliquant des critères sur les positions de ces pics. Par exemple, le matériau est considéré austénitique au point étudié si le critère suivant est vérifié :

$$\left(\max_{1.3\le r\le 1.7} g(r) > 1.5\right) \cup \left(\max_{2.1<r\le 2.7} g(r) < 2.4\right) \cup \left(\max_{3.5<r\le 4.2} g(r) < 3.8\right) \qquad (4.2.3)$$

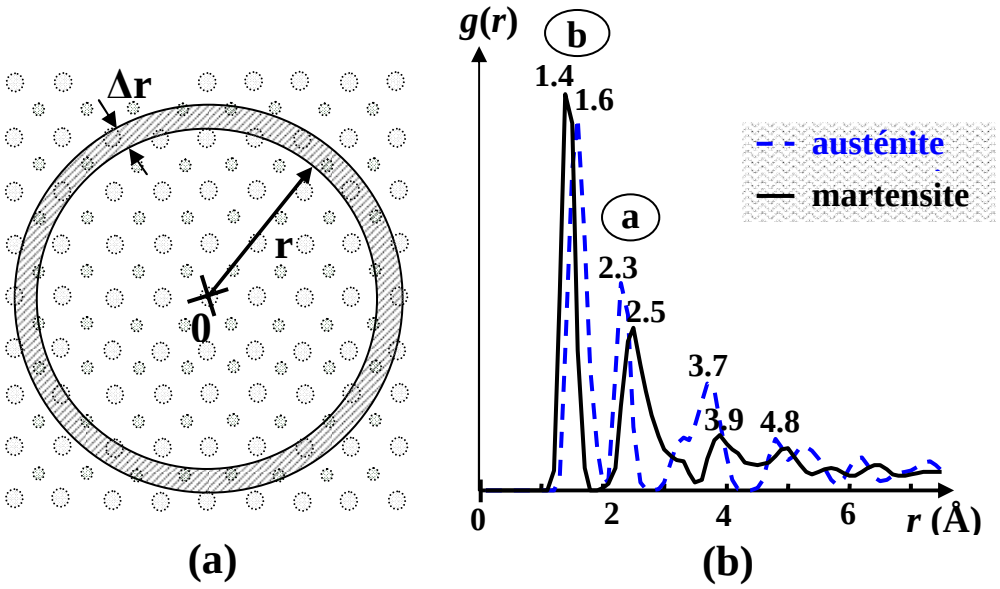


Fig.4.2.10 – *(a) Schéma bidimensionnel de la coquille d'épaisseur Δr*
(b) Fonction de corrélation de paire pour notre système avant et après transformation

Naturellement, ces critères doivent être optimisés pour chaque cas étudié. De plus, cette identification ne permet pas la distinction des différentes variantes de martensite. Pour compléter notre étude, nous proposons d'évaluer le tenseur gradient de transformation, à partir de la matrice de passage liant la base initiale $\vec{e}_i^{\,0}$ à la base transformée $\vec{e}_i$, représenté sur la figure 4.2.9.a. On a alors :

$$\overline{\overline{F}} = \overline{\overline{h}}\,\overline{\overline{h}}_0^{-1} \qquad \text{où} \quad \overline{\overline{h}} = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\right) \tag{4.2.4}$$

On peut en déduire le tenseur de déformation pure $\overline{\overline{U}}_1 = \sqrt{\overline{\overline{F}}^T\overline{\overline{F}}}$, (avec $F = RU$ et $U^2 = F^TF$) et par suite le comparer à ceux proposés pour les AMF dans la littérature [Bhattacharya 00], [James 00], [Liew 03], [Balandraud 07].

4.3.1.2 Chaleur latente et autres grandeurs thermomécaniques

La réorganisation géométrique des atomes qui caractérise la transformation de phase a pour conséquence de modifier l'énergie potentielle du système. En effet la matière se réorganise et les distances interatomiques changent totalement (*cf.* fig.4.2.9). On verra au cours des simulations que cette évolution de l'énergie potentielle est négative pour une transformation dans le sens austénite vers martensite. Or d'après le principe de conservation de l'énergie, cette perte d'énergie potentielle a pour conséquence d'augmenter l'énergie cinétique du système, et par suite la température. C'est bien en accord avec le caractère exothermique de la transformation.

On propose naturellement de définir la chaleur latente L_0 comme le gain d'énergie cinétique accompagnant la transformation de phase :

$$L_0 \propto \Delta E_c \tag{4.2.5}$$

Pour connaitre le facteur de proportionnalité, on propose de partir de l'équation de la chaleur. On fait l'hypothèse que la source de chaleur associée à la transformation est celle proposée par le modèle mésoscopique. De plus on néglige les sources thermoélastiques. Si la transformation de phase suit un processus adiabatique et que la transformation est complète, on a alors :

$$\int_{t_1}^{t_2} \rho C\dot{\theta}\,\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \rho L_0.\dot{x}\,\mathrm{d}t = \rho C\underbrace{\left[\theta\right]_{t_1}^{t_2}}_{\Delta\theta} = \rho L_0\underbrace{\left[x\right]_{t_1}^{t_2}}_{1} \tag{4.2.6}$$

Une estimation de la capacité thermique C est donnée par[24] :

$$C\sum_{i=1}^{N} m_i = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{D.N.k_B}{2}T + E_p\right) \approx \frac{D.N.k_B}{2} \tag{4.2.7}$$

Enfin, la définition de la température (éq.4.1.7) permet de réécrire la relation 4.2.6 :

$$L_0 = C\Delta\theta \approx \frac{DNk_B}{2\sum_{i=1}^{N} m_i}\frac{2}{D.K.k_B}\Delta E_c = \frac{\Delta E_c}{\sum_{i=1}^{N} m_i} \tag{4.2.8}$$

Signalons que la DM permet également d'estimer des constantes matériaux telles que les constante élastique C_{11}, le coefficient de dilatation thermique linéaire α ou encore coefficient de conduction k. Les constantes élastiques peuvent être estimées à partir de la réponse mécanique d'un essai de traction, tandis que le coefficient de dilatation α peut être estimé à partir d'un chargement thermique à contrainte constante : $\varepsilon(T) = \alpha.(T - T_0)$ [Mei 91]. Enfin la conductivité peut elle aussi être estimée par dynamique moléculaire. La méthode consiste à imposer un apport d'énergie cinétique ΔE_c de signe opposé dans deux zones d'épaisseur δ de l'échantillon, comme indiqué sur la figure 4.2.11. Les conditions aux limites périodiques ont pour conséquence de générer deux flux de température J_Z reliés à la conductivité par la loi de Fourier. Pour plus de détails se référer à [Schelling 02].

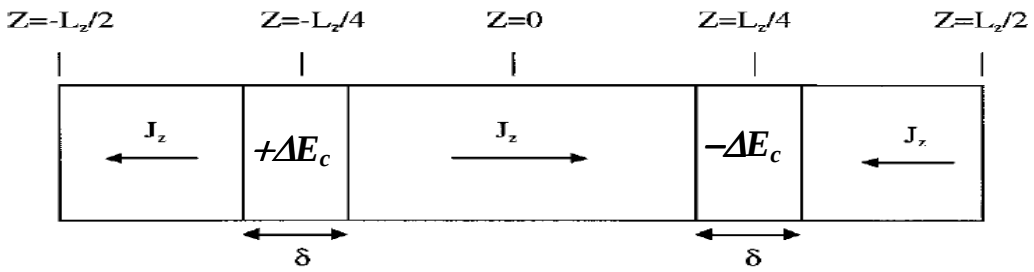


Fig.4.2.11 – *Création d'un flux de chaleur en vue d'estimer le coefficient de conductivité k [Schelling 02]*

[24] Cette expression correspond à la loi de Dulong et Petit. Une seconde possibilité serait d'estimer C en faisant varier la température tout en maintenant la boîte de périodicité fixe. On aurait alors $C\sum_{i=1}^{N} m_i = \Delta E / \Delta T$.

4.3 Simulation de la transformation martensitique par DM

La section précédente a confirmée la capacité de la DM pour décrire de nombreux aspects de la transformation martensitique. De plus, on a vu que la DM permettait de construire le potentiel énergie libre du système. Celui-ci est non convexe et ressemble au potentiel énergie libre construit à partir des propriétés de symétrie du cristal dans l'approche de type Landau (*cf.* Chapitre I). En conséquence, la DM semble être une approche pertinente pour vérifier si cette non convexité ne disparaît pas progressivement au fur et à mesure que la taille du système étudié croît ; et voir si la forme du potentiel ne tend pas vers celle établie au chapitre 2 via une analyse thermomécanique mésoscopique. Les outils de la dynamique moléculaire ayant été présentés, à la fois sur le plan de l'évolution du système que sur le plan de l'analyse mécanique et énergétique qui en sera faite, il reste à réaliser le code de calcul en lui-même.

Ce code se base sur la programmation orientée objet, et utilise le langage C++. Une série de tests ont permis, pas à pas, de valider l'implémentation de ce code. Il a ensuite été validé à travers certains résultats de la littérature. Notamment, la figure 4.2.8.a [Hildebrand 08] qui correspond à la dépendance de l'énergie potentielle aux paramètres de maille a pu être reconstruite. On a également pu générer la transformation de phase pour un système de 41 atomes, soit en se basant sur les paramètres indiqués dans [Kastner 03] pour la transformation T-induite, soit sur ceux reportés dans [Kastner 06] pour la transformation σ-induite. Dans les deux cas, les simulations réalisées s'accordent avec les résultats reportés dans ces deux articles.

Après cette étape d'implémentation et de validation du code de DM, on va présenter les paramètres du modèle. La première simulation réalisée permettra d'étudier le comportement général du matériau simulé et mettra en évidence l'apparition d'une transformation de phase. L'augmentation de la taille de l'échantillon sera explorée par la suite. Elle permettra notamment de noter l'apparition d'une microstructure qui rend complexe l'étude de l'évolution de l'énergie libre.

4.3.1 Etude des réponses d'un modèle DM d'AMF

4.3.1.1 Présentation des paramètres du modèle

Pour des raisons numériques évidentes, l'ensemble des valeurs du système sont adimensionnalisées par les constantes répertoriées dans le tableau 4.3.1. L'incrément temporel *dt* est également rappelé, son choix ayant été discuté à la section 4.1.1.1.

$dt = d\tilde{t}/\tau_0$	τ_0 (s)	ε_0 (J)	(eV)	σ_0 (m)	(Å)	μ_0 (kg)	(u)
0.01	$3.6053.10^{-13}$	$3.99224.10^{-20}$	0.2495	$2.5.10^{-10}$	2.5	$8.3027.10^{-26}$	50

Tab.4.3.1 – *Paramètres d'a-dimensionnement et incrément temporel*

Le modèle atomique retenu est un alliage équiatomique cubique centré, du type NiTi. Pour simplifier le problème, on se limite au cas bidimensionnel, comme d'autres auteurs l'ont fait auparavant (*cf.* tab.4.2.7). Cette projection dans le plan à l'avantage de réduire le nombre de variantes de martensite, annihilant les variantes hors plan. La maille se compose de deux types d'atome, notés A et B, répartis régulièrement comme l'illustre le schéma 4.3.1.

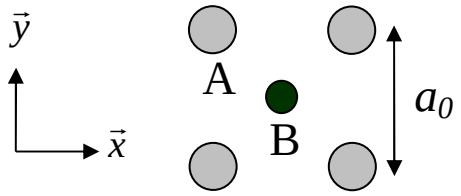


Fig.4.3.1 – *Réseau cubique face centrée bidimensionnel initial*

Si on choisit de se placer dans le plan contenant les atomes A, il faut y projeter les atomes B. La distance r_{ij}^{2D} entre les atomes A et B sera par conséquent différente de la distance réelle tridimensionnelle r_{ij}^{3D}. En pratique, cette projection ne modifie que le rapport r_{AB}^{LJ}/r_{ij} dans le calcul du potentiel de Lennard-Jones (*cf.* éq.4.1.3). On propose donc de définir un r_{AB}^{2D} tel que [Hildebrand 08] :

$$\frac{r_{AB}^{3D}}{r_{ij}^{3D}} = \frac{r_{AB}^{2D}}{r_{ij}^{2D}} \tag{4.3.1}$$

Les coefficients du potentiel d'interaction sont dérivés de ceux proposés par [Kastner 03] et ont été modifiés pour coller au mieux aux constantes matériaux (constante élastique, chaleur latente …). Les paramètres modifiés sont reportés dans le tableau 4.3.2. Ce tableau contient également les masses des atomes, (A représentant l'atome de nickel, et B celui du titane) [Handbook 03].

r_{AA}^{LJ}/σ_0	r_{AB}^{2D}/σ_0	r_{BB}^{LJ}/σ_0	$e_{AA}^{LJ}/\varepsilon_0$	$e_{AB}^{LJ}/\varepsilon_0$	$e_{BB}^{LJ}/\varepsilon_0$	m_A/μ_0	m_B/μ_0
0.865	0.595	0.9	1	0.29	1.14	1.1739	0.9573

Tab.4.3.2 – *Coefficients du potentiel de Lennard-Jones et masse des atomes*

Le premier échantillon qui va être utilisé possède une géométrie carrée, représentée sur la figure 4.3.2 et dont les dimensions sont les suivantes :

D	N	a_0/σ_0	h_{11}/σ_0	h_{22}/σ_0	T_0 (K)
2	200	~0.977	9.77	9.77	300

Tab.4.3.3 – *Caractéristiques de l'essai*

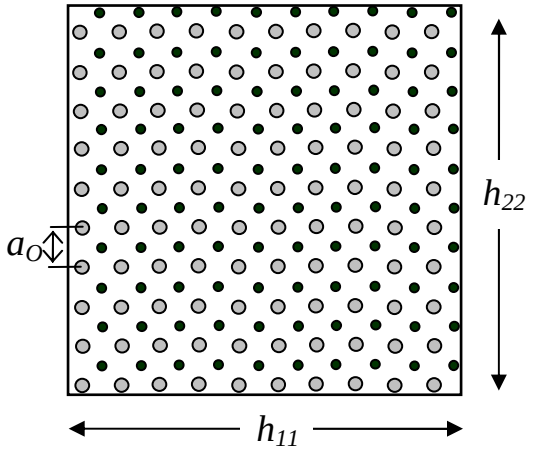


Fig.4.3.2 – *Géométrie de l'échantillon*

Enfin, les paramètres servant à définir l'approximation du potentiel (*cf.* section 4.1.1.2), la sollicitation (*cf.* section 4.1.3) et l'analyse des résultats (*cf.* section 4.1.2) sont regroupés dans le tableau suivant :

Approximation du potentiel				**Sollicitation**		**Analyse**		
r_{cut}/σ_0	r_{tronc}/σ_0	δ_{tol}/σ_0	t_{frais}/dt	τ_T	$v_T \,.\, \tau_0/\sigma_0$	n_{eq}/dt	$r^{\omega}_{cut}/\sigma_0$	CL
3	2.5	0.5	200	0	$2.08.10^{-7}$	40000	8	périodiques

Tab.4.3.4 – *Paramètres liés à l'approximation du potentiel, à la sollicitation et à l'analyse des résultats*

Pour ce premier essai, le chargement est cyclique (2 charge, 1 décharge), à une vitesse v_T égale à 0.144 mm.s^{-1} (*cf.* tab.4.3.4) et selon la direction cristallographique [0 1 0]. Pour des raisons de temps de calcul, les vitesses adoptées par la suite seront plus importantes. On ne s'intéressera pas à cette problématique dans le cadre de ce manuscrit, mais il est évident que la vitesse de la sollicitation a une influence directe sur la transformation de phase. Enfin, les conditions aux limites sont périodiques tandis que les conditions d'échanges sont pour le moment adiabatiques ($\tau_T = 0$).

4.3.1.2 Réponse mécanique

La figure 4.3.3 représente la réponse mécanique au cours de cet essai. La charge initiale est représentée en pointillés, tandis que la décharge et la seconde charge sont en trait plein. La réponse a été découpée en quatre phases de comportement délimitées par les points (A, B, C, D, E). La première phase A-B est linéaire avec une pente de 400 GPa, correspondant à la constante élastique C_{11}. Cette constante est élevée, en comparaison avec la valeur de 111.2 GPa proposée pour le NiTi [Lai 00]. Un modèle avec une constante C_{11} plus proche de cette valeur a pu être établi, mais ce modèle a été délaissé car il présentait l'appariation d'une fissure peu après la transformation de phase. Une fissure se définit en DM comme une cavité séparant des atomes d'une distance, de l'ordre du rayon de coupure r_{cut}, et telle que leurs interactions mutuelles soient négligeables. Peu à peu la linéarité de la réponse mécanique de cette première phase est perdue (phase B-C). En effet, le potentiel de Lennard-Jones peut être approximé par une fonction quadratique seulement autour de l'équilibre. Au-delà d'un certain seuil, la non linéarité du potentiel de Lennard Jones réapparait.

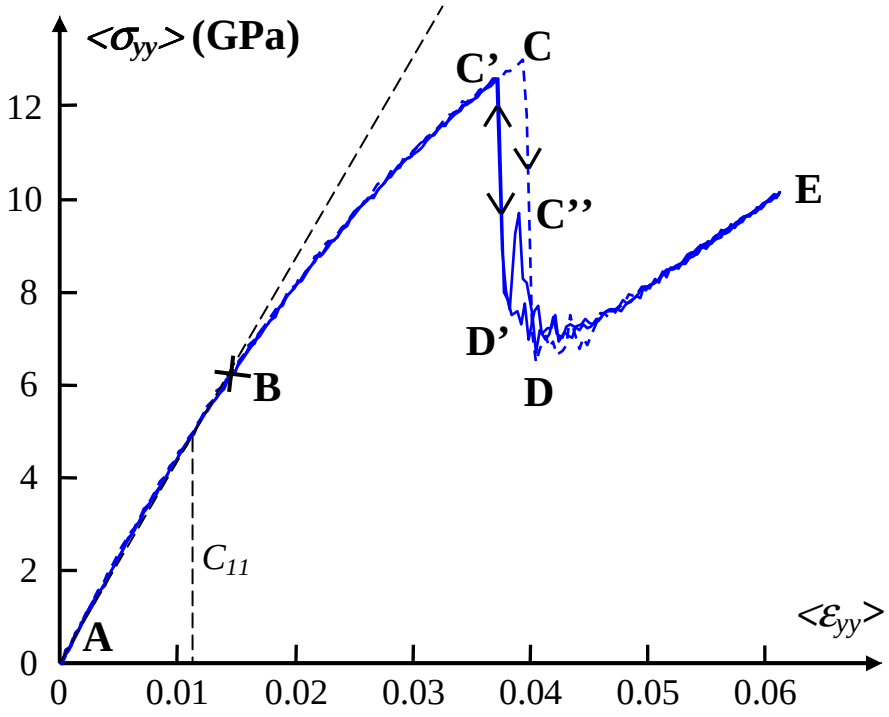


***Fig.4.3.3** – Réponse mécanique*

Le point de C se caractérise par une brusque chute de contrainte. Puis, la phase D-E présente un comportement à nouveau linéaire, de pente égale à 188 GPa, soit environ la moitié de la pente initiale. Lors de la décharge le comportement est quasiment réversible, à l'exception de la remontée brusque en contrainte qui se produit en D', pour une déformation légèrement plus petite qu'à la charge (D). Un phénomène d'hystérésis apparait. Il a été vérifié

que ce phénomène est d'autant plus grand que la sollicitation est rapide, ou que le système est grand. Lors de la seconde charge, cette hystérésis est moins claire, le parcours est plus chaotique (A-B-C'-D'-C''-D-E) avec une remontée temporaire au point C''. L'hystérésis semble donc, à cette échelle, être liée à une instabilité, c'est-à-dire au passage brutale d'une phase à l'autre.

La configuration des atomes permet d'identifier la chute de contrainte C-D à la transformation de phase. En effet, avant C la phase est purement austénitique (*cf.* fig.4.3.4.a) tandis qu'après C elle est martensitique (*cf.* fig.4.3.3.b). En regardant de plus près, la figure 4.3.4.b permet de distinguer la coexistence de deux variantes (encadré sur la figure 4.3.4.b). Plus tard dans la charge, en E par exemple, ce mélange disparait au profit d'une seule des deux variantes.

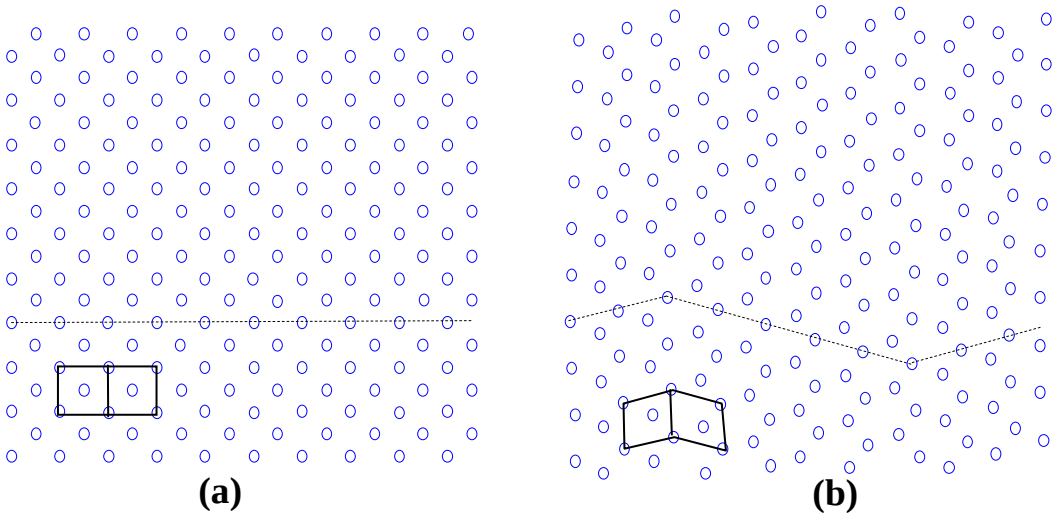


Fig.4.3.4 – *Configuration des atomes (a) avant C (b) après C*

4.3.1.3 Transformation de phase martensitique

La figure 4.3.5 correspond à la réponse de l'échantillon dans l'espace contrainte température. La phase A-C correspond à un fort refroidissement thermoélastique. Ensuite, la transformation de phase, C-D, se caractérise par une élévation brusque de la température. Cet échauffement s'explique du fait de la réorganisation microstructurale (*cf.* fig.4.3.4) s'accompagne d'une chute d'énergie potentielle. Or la conservation de l'énergie impose la redistribution de cette énergie sous la forme d'énergie cinétique, et donc de température. Après la transformation, la partie D-E ressemble à un refroidissement thermoélastique. Ce refroidissement, tout comme celui de la phase A-C, sont très important. Des paramètres ont pu être trouvés pour permettre d'avoir un refroidissement plus conforme à la réalité, mais comme il l'a été dit plus haut, ces paramètres ont été délaissés car une fissure apparaissait rapidement

après la transformation. Le comportement lors de la décharge et de la seconde charge sont en tout point semblables à celui de la première charge, avec pour seule différence un décalage de quelques degrés.

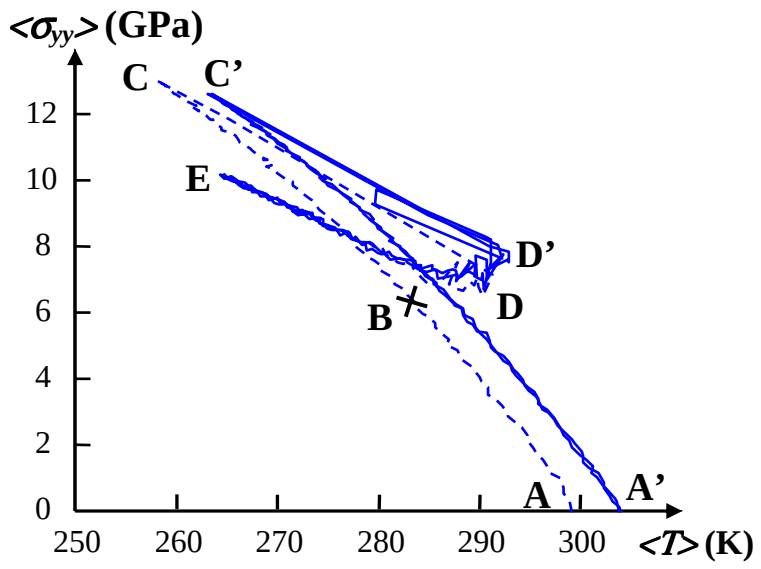


Fig.4.3.5 – *Réponse dans l'espace contrainte température*

Ayant connaissance de la variation de température qui accompagne la transformation, et donc la variation d'énergie cinétique, on peut estimer la chaleur latente L_0 selon l'expression 4.2.8. Elle vaut ici environ 5500 J.kg^{-1}, ce qui est de l'ordre de grandeur des mesures macroscopiques de chaleur latente pour les AMF.

4.3.1.4 Energie libre

Afin de représenter l'énergie libre F, on réalise un essai isotherme à une vitesse de v_T de 1.3 mm.s^{-1}. Le maintien de la température constante est rendu possible par l'utilisation du thermostat de Berendsen, avec une température extérieure T_{ext} constante, homogène, et un paramètre τ_T important, et qui correspond à de fortes fuites thermiques. En choisissant arbitrairement l'énergie libre nulle au départ, on obtient la figure 4.3.6.

La forme de l'énergie libre est non-linéaire, avec un point de rebroussement au moment de la transformation. Ce point est relié à la chute de contrainte (ici autour d'une déformation de 0.022). Le potentiel énergie libre n'est donc pas convexe. Si on se réfère à l'évolution de l'énergie libre en fonction de la température (fig.4.2.3 ou fig.4.2.4) on constate que la température de l'essai est élevée par rapport à la température de transformation. C'est ceci qui explique la stabilité de la phase austénitique au début du présent essai.

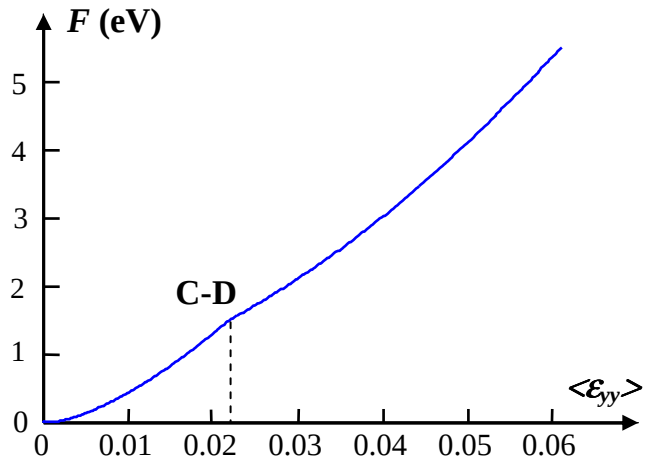


Fig.4.3.6 – *Energie libre pour l'essai isotherme*

Intéressons nous maintenant à l'énergie interne *U* calculée à partir de l'expression 4.1.27 pour le cas de l'essai anisotherme présenté plus haut. Cette énergie interne est représentée sur la figure 4.3.7, elle est très semblable à l'énergie libre de l'essai isotherme, et présente elle aussi une non convexité. En effet les variations d'énergie libre au cours d'une transformation isotherme est égales aux variations d'énergie interne lors d'une transformation adiabatique et réversible. Par conséquent, on réalisera indifféremment par la suite des essais isotherme et anisotherme, en étudiant la convexité respectivement de l'énergie interne *U* et de l'énergie libre *F*.

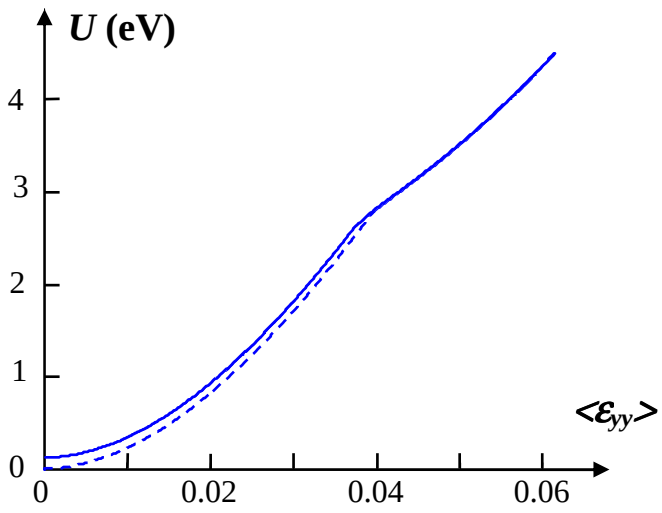


Fig.4.3.7 – *Energie interne de l'essai anisotherme*

4.3.2 Influence de la taille de l'échantillon

4.3.2.1 Conditions aux limites périodiques

On poursuit l'étude du modèle proposé ci-dessus, toujours avec un échantillon carré et des conditions aux limites périodiques, mais pour des nombres d'atomes plus élevé :

(i) N = 800 atomes ; non isotherme ; $v_T = 3.5$ mm.s^{-1}

(ii) N = 1800 atomes; isotherme ; $v_T = 52$ mm.s^{-1} ; $\varepsilon_0 = 6.86.10^{-20}$ J ; $\sigma_0 = 3.277.10^{-10}$ m.

Dans le premier cas *(i)*, la réponse mécanique (fig.4.3.8.a) présente une hystérésis étendue, avec une augmentation en contrainte relativement progressive pour des déformations comprises entre 0.015 et 0.01. L'énergie interne correspondante est représentée sur la figure 4.3.8.b. Elle est très semblable à celle présentée sur la figure 4.3.7, avec une augmentation sensible du niveau d'énergie de l'inflexion (point *A*), 4eV ici contre 3eV avant. Lors de la décharge, le point d'inflexion est déplacé pour une déformation de 0.015 (point *B*), ce qui correspond à l'augmentation de contrainte. Si l'essai avait été mené à son terme, l'énergie interne après la décharge aurait sans doute était supérieure à l'énergie interne initiale, et cela d'une manière plus importante que dans le cas précédent (fig.4.3.7). Ceci est à corréler à l'importance de l'hystérésis de cet essai.

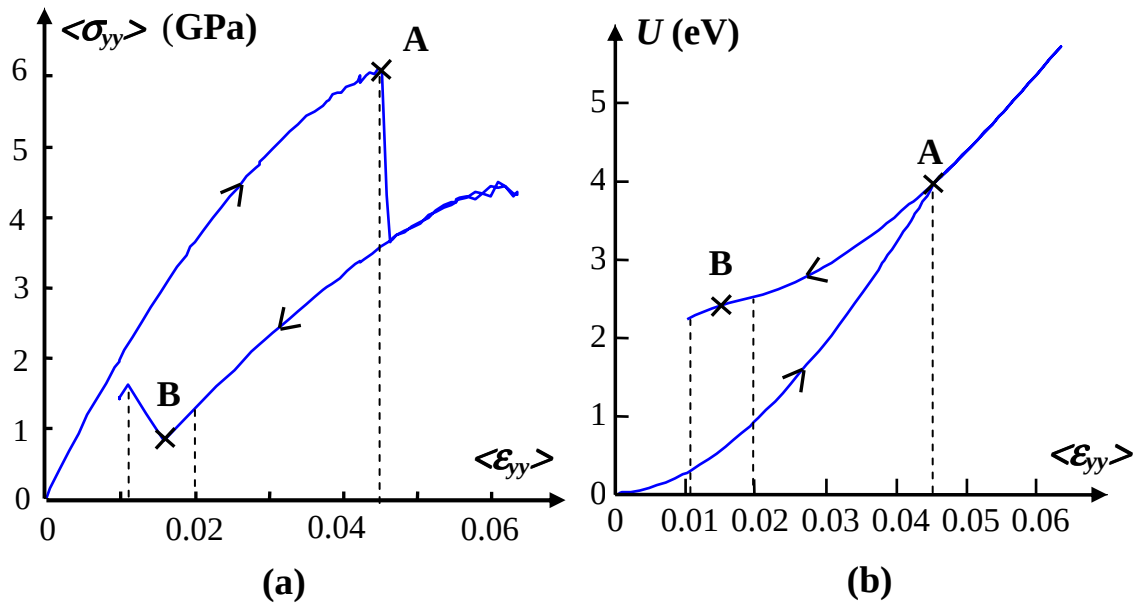


***Fig.4.3.8** – Essais (i) : (a) réponse mécanique et (b) énergie libre*

Pour comprendre les différences avec l'essai précédent, il faut s'intéressé à la configuration des atomes. En effet, après la transformation l'échantillon présente un mélange de variantes de martensite M_1 et M_2 avec un noyau d'austénite persistant, comme l'illustre par exemple la figure 4.3.9 qui correspond à l'état de ce mélange juste avant la transformation inverse (déformation de 0.015 au point B).

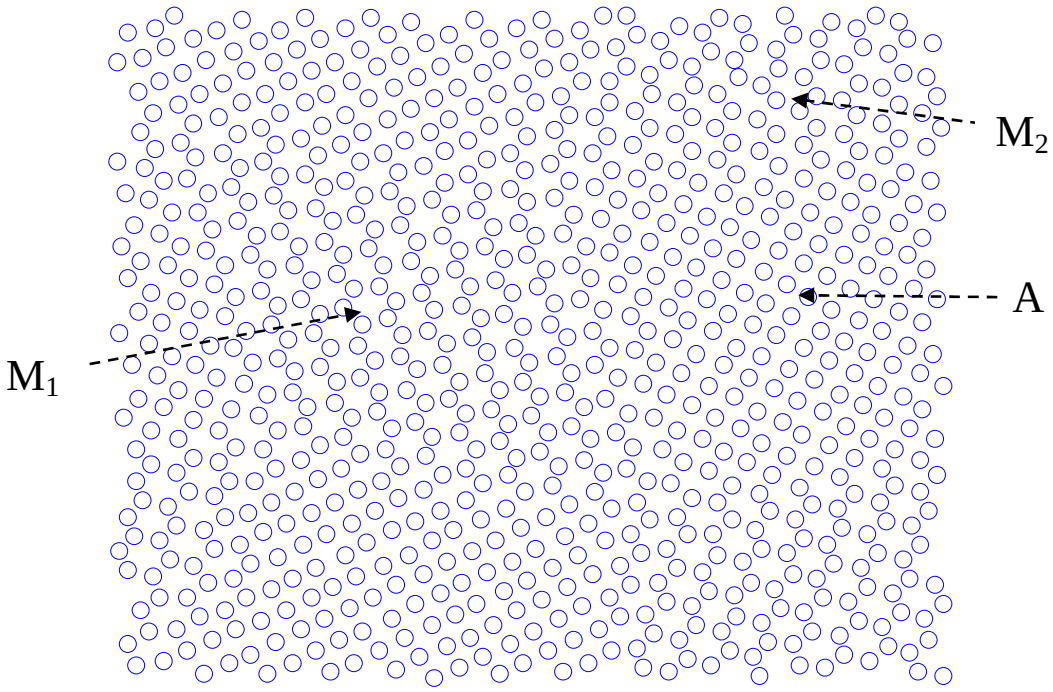


Fig.4.3.9 – *Essais (i) mélange de phase austénite et martensite avant la transformation inverse*

Au cours du second essai *(ii)* on observe un phénomène apparenté à l'essai précédent. En effet, bien qu'après la transformation il n'y ait qu'un mélange de variante de martensite sans austénite semblable à la figure 4.3.4.b, une inclusion d'austénite apparait lors de la décharge, semblable à la figure 4.3.8, sans que la transformation inverse soit complète. L'énergie libre représentée sur la figure 4.3.10 est semblable à l'énergie interne de l'essai *(i)* sans seconde inflexion. Les unités sont très différentes car les constantes ε_0 et σ_0 ont été modifiées entre temps. Il est remarquable que le minimum de l'énergie libre lors de la décharge soit déplacée et égale à 0.005, ce qui correspond à la déformation pour laquelle la contrainte est nulle. Cet essai semble donc présenter un effet mémoire dont la microstructure à contrainte nulle est un mélange de variantes de martensites et d'austénite.

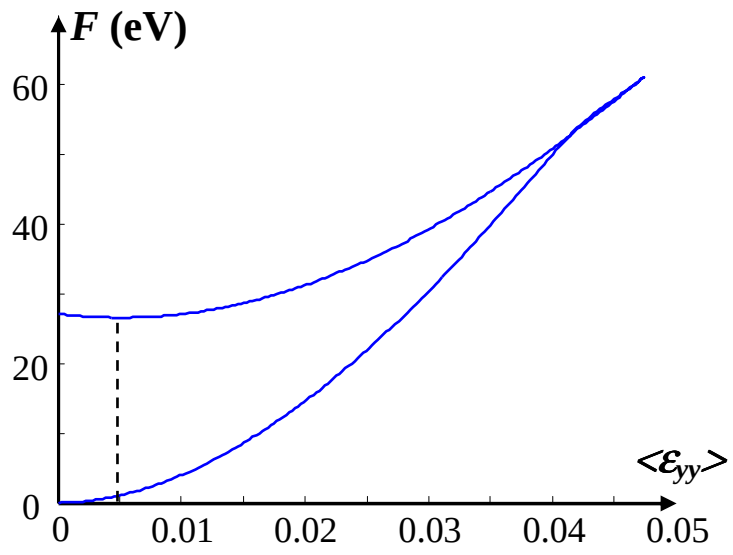


Fig.4.3.10 – *Energie libre et apparition d'un « effet mémoire »*

4.3.2.2 Conditions aux limites mixtes

Comme on le voit dans les exemples précédents, l'augmentation de la taille de l'échantillon pose rapidement des problèmes liés à la coexistence de variantes et à l'apparition d'une microstructure complexe. Cependant on note une première tendance avec l'augmentation de l'énergie du point d'inflexion. Pour continuer l'étude de l'influence de la taille sur le comportement, on propose d'utiliser des conditions aux limites mixtes. Ces conditions présentent l'avantages de laisser les cotés non sollicités de l'échantillon libres de contrainte. Ceci est particulièrement important car dans le cas des conditions aux limites périodiques, la transformation s'accompagne de contrainte dans la direction perpendiculaire à l'axe de traction du même ordre de grandeur que les contraintes dans l'axe de traction. Gardons cependant en mémoire que les conditions aux limites mixtes présentent la particularité de posséder une énergie de surface sur les bords libres. Or on a vu dans la revue bibliographique (*cf.* section 4.2.2.3) que cette énergie de surface favorise la nucléation. Deux grandes tendances ont été identifiées et sont à distinguer :

(i) si la hauteur est inférieure ou égale à la largeur, alors la nucléation de la martensite se fait de manière homogène sur les bords libres de l'échantillon

(ii) si la hauteur est supérieure à la largeur, alors la nucléation est localisée sur une partie du bord libre.

Pour illustrer le premier cas, on a choisi un essai dont la vitesse v_T est de 52 mm.s^{-1} pour une géométrie carré, composée de N = 5000 atomes. La réponse mécanique pour cet

essai est reportée sur la figure 4.3.11.a. La chute de contrainte va jusqu'à une valeur négative, et remonte très lentement après une déformation de 0.05. La nucléation apparait rapidement dès le début de la chute en contrainte. Par exemple, la configuration des atomes au point A est reportée sur la figure 4.3.11.b. Au centre la phase est encore austénitique, tandis que les bords libres sont totalement transformés en martensite. Ensuite la martensite se propage vers le centre de l'éprouvette (comme indiqué par les flèches sur la figure 4.3.11.b) durant le chargement A-B-C.

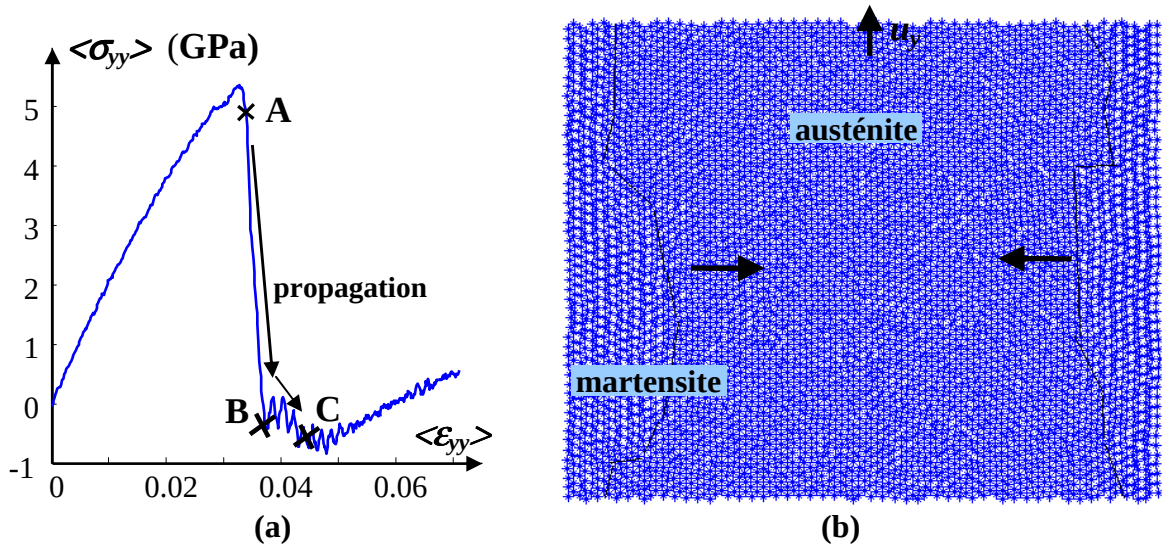
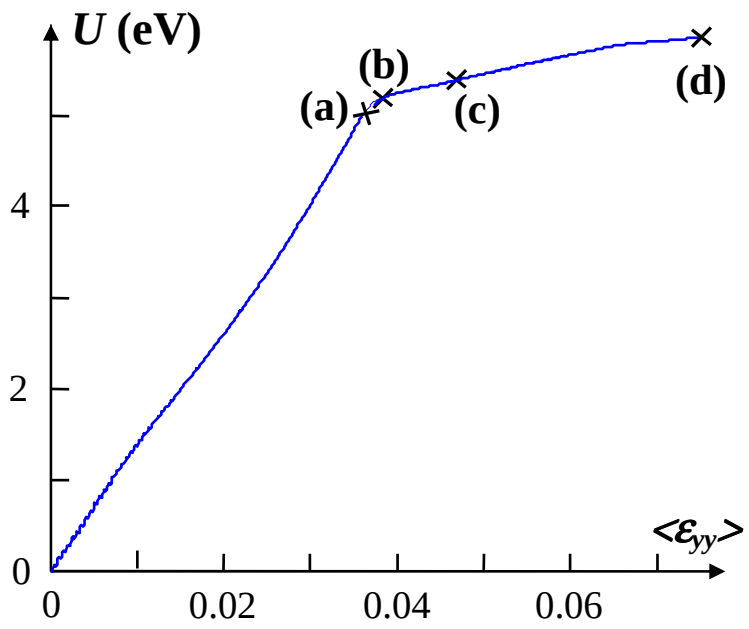


Fig.4.3.11 – *(a) Réponse mécanique pour des conditions aux limites mixtes*
(b) Nucléation de la martensite sur les surfaces libres

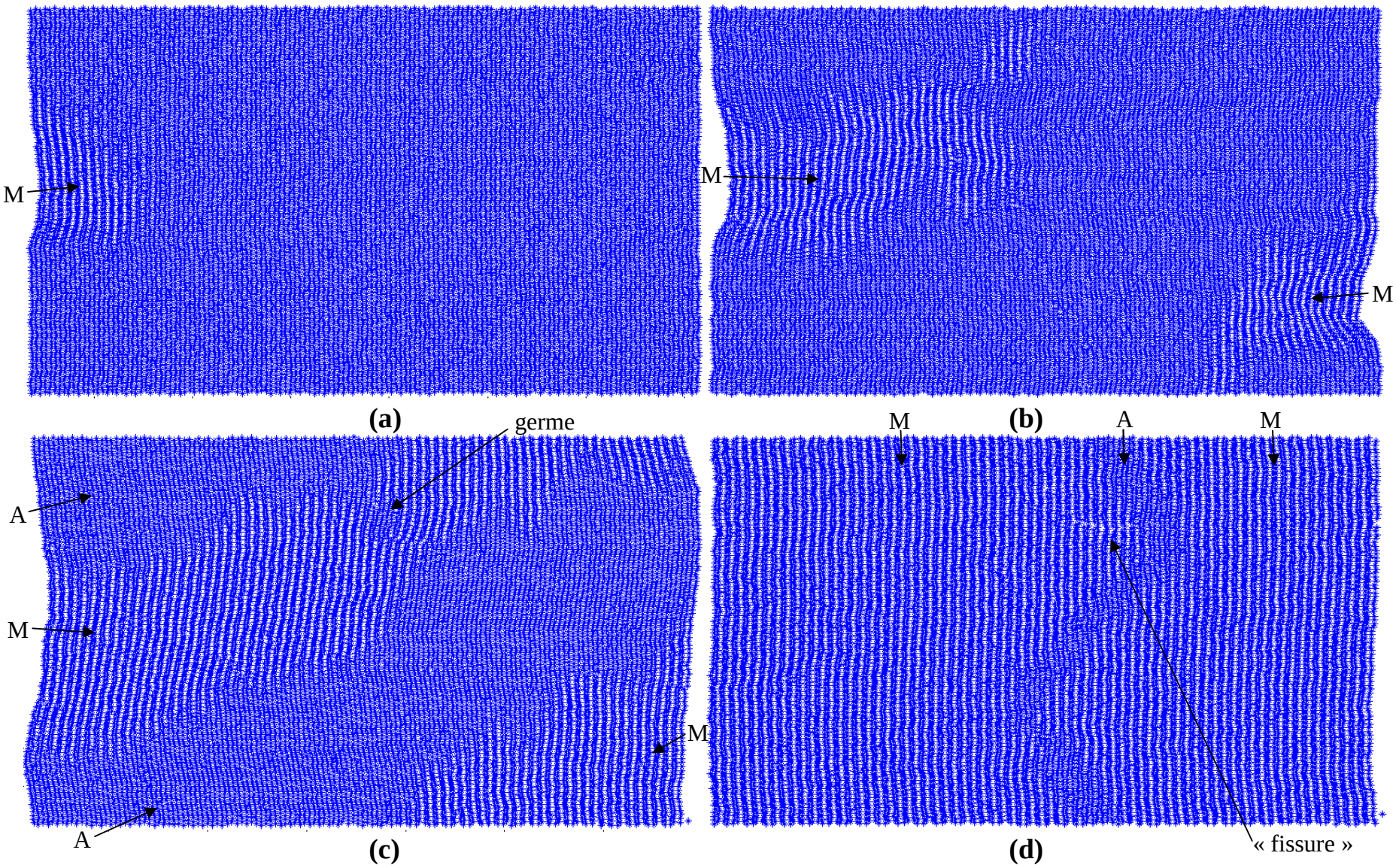
Dans le second cas, l'essai est réalisé à la même vitesse mais pour un échantillon de 70 atomes de coté et 100 atomes de hauteur, soit 14000 atomes au total. La réponse mécanique n'a pas été reportée car elle est semblable au cas précédent, avec pour seule différence une phase de propagation B-C plus étendue. La dynamique de la transformation est représentée sur la figure 4.3.12. L'austénite est indiquée par un A, et la martensite par un M. On observe que lors de la nucléation (a), une apparition de la martensite sur un seul des bords libres. Puis au cours du chargement, elle se propage (b) à partir de ce point de nucléation, mais apparaît également sur l'autre bord libre. Plus loin dans la propagation (c) l'échantillon se scinde en un bloc austénitique et un bloc martensitique. Il faut bien se rappeler ici que les conditions aux limites en haut et en bas sont périodiques, et que par conséquent le bas de l'échantillon est en continuité avec le haut. La bande de martensite ainsi formée est inclinée. Au terme de la nucléation (d) il persiste un noyau d'austénite. On peut observer au cours de la propagation (b-c) le germe de ce noyau d'austénite. Il semble également que le maintien de ce germe a eu pour conséquence de créer une « fissure » indiquée sur la figure (d).

L'énergie interne au cours de cet essai est représentée sur la figure 4.3.13. Les différentes étapes (a, b, c, d) sont également indiquées sur cette figure. On constate que la nucléation (a) apparait avant le point d'inflexion, puis que l'appariation d'une nucléation sur le second bord libre est rapide (b) en comparaison de la propagation (b-c-d). La forme de l'énergie libre présente pendant la propagation une pente douce. On peut donc dire que, dans le cas de conditions aux limites mixtes, l'appariation d'une microstructure intensifie la non convexité de l'énergie interne (ou l'énergie libre dans le cas précédent).



***4.3.13** – Energie interne pour des conditions aux limites mixtes*

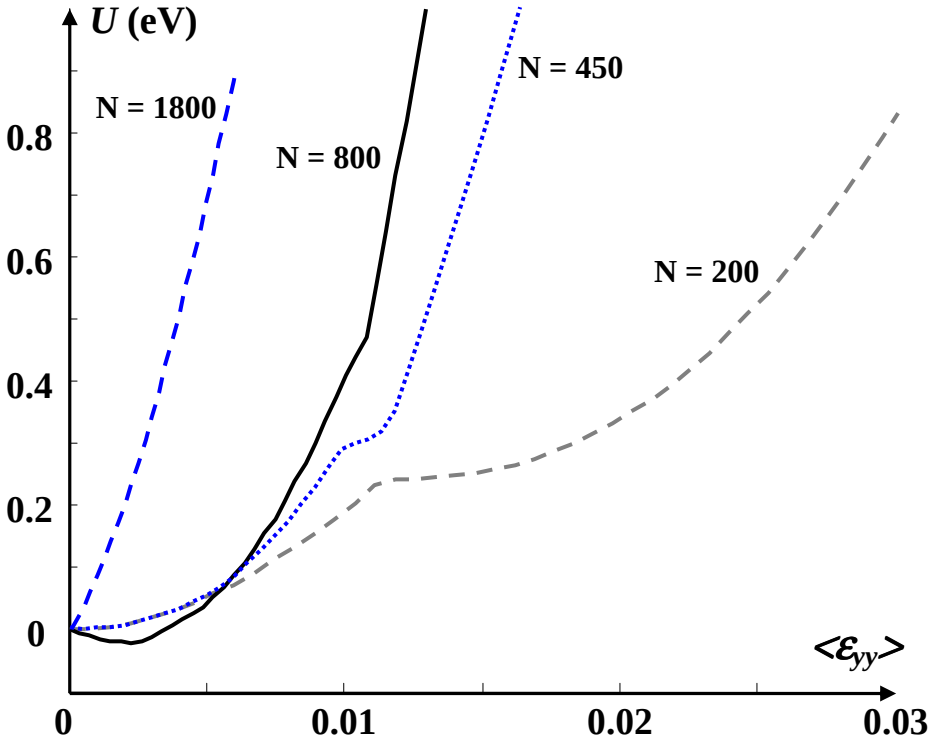
L'étude de l'énergie libre en fonction de la taille du système pose donc un problème du fait de l'appariation de cette microstructure. En effet la matière s'organise sous la forme d'un mélange à la fois d'austénite et de variantes de martensite, mélange qui est plus stable que l'austénite seule, et pour laquelle le potentiel ne présent plus de non convexité (*cf.* cas de la fig.4.3.10). Mais c'est peut être justement cette liberté permise par la coexistence de plusieurs phase qui rend possible la « convexification » de l'énergie libre à l'échelle mésoscopique.



4.3.12 – *Nucléation et propagation de la martensite dans le cas (ii) (a) nucléation (b-c) propagation (d) état final*

4.3.2.3 Conditions aux limites périodiques avec un second puits visible

On recommence l'étude avec des conditions aux limites périodiques afin d'approfondir la tendance observée entre les essais correspondants aux figures 4.3.6 et 4.3.7.b. Dans ce but le paramètre $e_{AB}^{LJ}/\varepsilon_0$ a été ramené à 0.2, ce qui a pour conséquence de diminuer l'énergie nécessaire à la transformation. L'essai a été réalisé à une vitesse de v_T = 1.25 mm.s^{-1} sur des échantillons carrés de 200, 450, 800 et 1800 atomes. On retrouve sur la figure 4.3.14 la tendance indiquée plus haut : l'énergie du point de rebroussement augmente avec la taille de l'échantillon. De plus il semble que l'intensité de la non convexité diminue avec la dimension.



4.3.14 – *Energie interne en fonction de la taille de l'échantillon*

Les limites du codes de DM développé dans le cadre de cette thèse en terme de temps de calcul, restreint à la fois la durée des essais mais aussi le nombre d'atomes considéré, ce qui s'est avéré handicapant pour la poursuite de cette étude. Il aurait été peut-être plus judicieux de se tourner vers un code plus abouti et plus performant, avec par exemple la possibilité de réaliser des calculs parallèles, fonction présente dans le logiciel [Lammps].

Malgré les limites des outils numériques mis en place, on a toutefois pu observer que le potentiel avait tendance à se convexifier avec l'augmentation de la dimension. Cependant le

lien existant entre cette convexification et la coexistence de plusieurs variantes de martensite n'est pas encore clair. Cette première contribution ne permet donc pas de conclure sur le caractère stabilisant et régularisant du changement d'échelle à la fois sur le potentiel, mais également sur les phénomènes thermomécaniques moyens accompagnant la transition de phase (avec par exemple la chute brutale de contrainte que l'on observe lors des simulations de dynamique moléculaire, mais qui n'existent pas à l'échelle mésoscopique). Des essais complémentaires avec des échantillons de plus grande taille sont évidemment nécessaires.

Outre ces aspects stabilisants liés à la dimension de l'échantillon, nous avons également pu observer la formation de microstructure σ-induite. Ce résultat est novateur au vu de la littérature qui ne s'intéresse, à notre connaissance, qu'aux microstructures accompagnant une transformation T-induite [Kadau 01b], [Kastner 09]. Nous avons en particulier, réalisé un essai qui génère une bande de transformation que l'on peut rapprocher des fronts de transformation observés expérimentalement au niveau mésoscopique .

Conclusions générales et perspectives

Les principales difficultés rencontrées dans la modélisation des alliages à mémoire de forme proviennent d'une part de la multiplicité des échelles physiques qui peuvent intervenir dans la description de la transformation de phase et d'autre part du caractère multiphysique (ici thermomécanique) de cette transformation.

Le travail associé au chapitre II de cette thèse a consisté à se doter d'un dispositif expérimental pour observer qualitativement et quantitativement la transformation de phase au travers de ses manifestations mécaniques, thermiques et énergétiques et ce, à des échelles mésoscopique et macroscopique définies par la résolution des optiques des caméras visible et infrarouge utilisées. L'étude expérimentale qui a suivi a confirmé le rôle majeur joué par les couplages thermomécaniques. Ce rôle a notamment permis de jeter un nouvel éclairage sur la compréhension des effets comportementaux dépendant du temps et dans les modes de propagation des fronts de changement de phase. D'autre part, l'analyse thermomécanique développée a permis de démontrer que l'existence d'un comportement hystérétique n'est pas conditionnée par l'existence d'irréversibilités intrinsèques mais pouvait aussi s'expliquer via des mécanismes de couplage, bien entendu dans un cadre anisotherme. Enfin, la construction de bilans d'énergie a permis de confirmer la faiblesse des effets dissipatifs intrinsèques devant les chaleurs latentes de changement de phase.

Ces observations expérimentales ont ensuite servi de base, au chapitre III, à la proposition d'une loi de comportement originale des AMF monocristallins. Tout en détaillant ce modèle, nous l'avons positionné par rapport aux autres travaux de la littérature. Ce modèle rentre dans le cadre des matériaux standard généralisés. Il possède une énergie libre convexe par rapport aux déformations et un potentiel de dissipation réduit à la dissipation thermique, ce qui va dans le sens des observations expérimentales qui ont démontré la faiblesse des énergies dissipées. La largeur du domaine de transition a été prise étroite (bien plus étroite que celle identifiée par le fournisseur d'AMF) voire réduite à une ligne. Ces deux choix, dissipation intrinsèque nulle et domaine de transition très étroit, ont été fait dans le but de faire ressortir sans ambiguïté le rôle des couplages sur le comportement.

Le modèle a permis de retrouver les chemins thermomécaniques complexes suivis par la matière lors de cycles charge-décharge, et d'expliquer les phénomènes temporels observés (relaxation, fluage, effet de la vitesse de la sollicitation, influence des coefficients d'échanges), sans jamais, on le rappelle, faire intervenir de dissipation intrinsèque. Autre

point important, les essais numériques ont permis de retrouver le phénomène de localisation et plus exactement la propagation de fronts de changement de phase. Cette localisation s'accompagne de fortes hétérogénéités à la fois sur le plan mécanique et thermique, mais également de fronts de changement de phase qui ont pu être caractérisés précisément au niveau expérimental, et retrouvés sur le plan numérique.

La dernière partie du travail de thèse représente une première contribution personnelle à la modélisation de la transformation de phase à l'échelle atomique. L'objectif de ce chapitre par rapport aux travaux de la littérature qui adoptent une approche similaire a été de plonger une description du mouvement des atomes purement mécanique dans un cadre thermomécanique réversible. Cette transposition a permis de définir le potentiel thermodynamique du système à partir de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle. Les simulations par dynamique moléculaire (DM) ont permis de montrer le caractère non convexe de l'énergie libre associée à un petit nombre d'atomes. Cette énergie libre possède une forme semblable à celle proposée par les modèles construits à partir d'arguments de cristallographie (approche de Landau). Une étude paramétrique a enfin montré que cette non convexité avait tendance à se réduire peu à peu avec l'augmentation du nombre d'atomes constituant le système thermodynamique (effet d'homogénéisation).

Au cours des essais de DM, toute la richesse de la microstructure des AMF est apparue avec la présence de mélange de phases et/ou la coexistence de plusieurs variantes de martensite. L'étude de la microstructure des AMF soumise à contrainte par la DM est inédite à notre connaissance. Elle nous a permis d'observer l'existence de phase de mélange austénite-martensite plus stable que les phases purement austénitique ou martensitique, et que l'on a associée, sous toute réserve, à un phénomène d'effet mémoire.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses et plus ou moins éloignées de nos objectifs initiaux. Tout d'abord au niveau expérimental on a signalé que la définition du domaine de transformation restait délicate. En effet, la réponse thermique n'est pas une caractéristique intrinsèque du matériau mais mêle le matériau et la structure qu'il constitue. On a vu, par ailleurs, que la définition de la transformation à partir de l'hystérésis pouvait être, elle aussi, sujette à discussion, dès qu'on considère l'essai comme anisotherme.

Toujours à propos du diagramme de transformation, on a vu sur des essais dynamiques que la majorité de la transformation se produisant à la charge et à la décharge, sur un même domaine de transformation dont l'étendue thermique est très réduite en comparaison des domaines proposés par la littérature. Cependant, le tableau 3.1.1 soulève le problème d'une pente trop importante, aussi bien vis-à-vis de la littérature que du modèle retenu dans cette thèse. De plus elle semble varier avec la vitesse de chargement (*cf.* fig.2.3.18). On peut donc supposer que le domaine ainsi identifié n'est qu'une restriction d'un domaine plus global, qui

ressemblerait à un diagramme plus traditionnel, par exemple celui présenté dans [Siredey 99]. Dès lors il serait intéressant de multiplier des essais de DSC à différentes échelles, et de réaliser des identifications à partir de mesure de champs pour des chemins thermomécaniques plus complexes ; par exemple en faisant varier la température ambiante, ou encore en regardant le chemin dans le domaine de transformation lors d'essais d'échauffement similaires à l'essai (**4-8**). De manière plus immédiate, un premier test envisageable consiste à comparer deux cycles, l'un à une vitesse de chargement constante, l'autre avec des vitesses de charge et de décharge très différentes.

On a également constaté sur les simulations que le front de changement de phase était défavorisé par un domaine de transformation important. Il semble donc que la description du domaine de transition par une ligne ou un domaine très fin soit la plus appropriée. La taille du domaine peut alors s'expliquer par un déplacement de la ligne de transition induite par un phénomène de dissipation. Ce déplacement est immédiat dans la généralisation de notre modèle au cas $X_{x_i} \neq 0$ (éq.3.1.20). Au niveau expérimental, ce mouvement du domaine de transformation a été observé, même si on préfère rester prudent sur ce point. En effet, la ligne de transformation définie localement par les extremums de la vitesse de déformation se déplace avec le front. Par exemple, sur la figure 2.3.17, la ligne de transition en trait plein correspond au point matériel situé en 5 mm tandis que la droite en pointillé correspond au point matériel situé en 19 mm. On voit que cette seconde ligne de transition s'est déplacée par rapport à la première. Or, lors de la charge (*resp.* décharge), ce second point voit le passage du front beaucoup plus tard (*resp.* plus tôt). Cette observation serait à confirmer, notamment après l'étude plus précise du diagramme de transformation proposée ci-dessus.

De manière plus éloignée, et toujours sur le plan expérimental, les réponses mécaniques des essais (**1-9**), (**4-10**) et (**4-15**) présentent un second « plateau » mécanique ($d\sigma/d\varepsilon$). L'analyse énergétique de l'essai (**4-15**) nous a permis d'observer l'existence, durant ce plateau, de la propagation d'une bande localisée dont les vitesses de déformation et les sources de chaleur sont très importantes et toutes deux positives. Lors de la décharge, les sources correspondant à ce plateau sont elles aussi positives, ce qui peut signifier qu'il y de forts phénomènes dissipatifs. Un bilan énergétique plus poussé serait nécessaire pour étudier plus précisément les sources de chaleur. De plus, le problème de savoir s'il s'agit d'un phénomène de réorientation de variantes couplées à de la plasticité, ou d'un second changement de phase solide-solide de type ordre-désordre, comme proposé à la figure 1.1.9.a pour un AMF de CuAlBe comme ici. Le travail reste à faire.

L'étude expérimentale pourrait également s'étoffer d'essais de type effet mémoire, pour caractériser localement et énergétiquement le phénomène de réorientation, phénomène abordé par exemple dans la thèse de [Balandraud 00]. On pourrait également s'intéresser aux

phénomènes de fatigue. Le bilan énergétique établi à la section 2.1.5 permettra d'éviter de confondre l'aire d'hystérésis avec l'énergie dissipée, comme on le trouve souvent fait sans justification dans la littérature. Une modeste (5 cycles) tendance d'évolution de l'énergie dissipée a été obtenue sur l'essai (**4-12**). Elle suit bien la tendance annoncée par la littérature [Gastien 03], [Nemat-Nasser 06]. L'aire d'hystérésis tout comme les sources de chaleur cumulées diminuent avec le nombre de cycles.

En ce qui concerne les simulations, il serait important de régler les problèmes de convergence qui nous ont obligés à choisir une vitesse de sollicitation, un coefficient d'échanges dans les mors h_2, et une température de transformation A différents de ceux identifiés dans les essais expérimentaux. Ceci permettrait de comparer quantitativement les simulations avec l'expérience, et de voir en particulier si l'indentification du domaine de transformation à une ligne est parfaitement appropriée.

Après avoir régler ces problèmes numériques, il serait également intéressant de voir si le front qui se crée aux extrémités des éprouvette peut être bloqué au profit d'un second front situé dans le corps de l'éprouvette. On a vu au cours des simulations que ce second front existe. Mais le front principal part toujours des mors, contrairement à ce qu'on observe expérimentalement. Une explication possible pourrait tirer son origine d'effets géométriques, ou bien encore de la contrainte imposée par les mors sur l'éprouvette. Cette contrainte (compression imposée par les mors) pourrait déplacer la ligne de transformation, voire induire la transformation d'une autre variante que celle activée lors de la traction, et ainsi défavoriser la transformation à proximité des mors. Il faudrait alors aborder la généralisation du présent modèle à un cas multivarié, et voir s'il permet de rendre compte d'un tel phénomène. On rappelle que la généralisation du modèle à un cas multivariant et/ou dissipatif et/ou polycristallin a déjà été abordé dans la thèse de [Balandraud 00].

En ce qui concerne la dynamique moléculaire, la première chose à améliorer est la performance du code de calcul. L'utilisation d'un code éprouvé, optimisé et permettant de faire du calcul parallèle serait salutaire, car les limitations en terme de nombre de particules et de temps d'essai desservent nos ambitions. Rendre le modèle plus réaliste (C, k, C_{11}, α…) en utilisant notamment un potentiel interatomique de type EAM issu de la littérature serait également plus que recommandé, de manière à pouvoir comparer l'énergie libre, le tenseur de transformation, *etc.*, à ceux de la littérature.

L'étude menée dans cette thèse pourrait alors être approfondie, notamment en augmentant significativement la taille du système, et en regardant l'effet de la température, voire l'effet d'un chargement multiaxial (on peut déjà observer une transformation en compression…), pouvant aller jusqu'à étudier l'évolution avec la taille du système du potentiel complet $\psi(\bar{\bar{\varepsilon}},T)$, construit à partir d'une multiplicité d'essais de DM.

On a enfin passé sous silence les effets du temps sur la réponse thermomécanique de l'échantillon et sur le potentiel énergétique. Cette approche se fonde sur l'hypothèse que pour un échantillon de petite dimension l'équilibre est « rapidement » atteint. En vérité, la limitation des moyens de calculs (efficacité du code) nous a obligé à accepter de travailler à des vitesses de sollicitation plus ou moins importantes. Sur de grands échantillons, ces effets temporels pourraient être étudiés grâce aux champs de déformation, température, contrainte, taux de martensite, énergie mécanique… qui ont été présentés dans cette thèse mais dont l'exploitation n'a pas été exposée par manque de résultats significatifs.

De manière plus générale, les perspectives par les calculs de ces champs sont vastes. L'énergie des interfaces austénite-martensite et entre variantes de martensite peut être mesurée [Kastner 09]. La microstructure générée par un chargement mécanique et son évolution est accessible ainsi que l'incidence du chargement sur les énergies d'interfaces. Enfin, sur un échantillon plus gros on pourrait modéliser des échanges aux bords plus réalistes, et réaliser des essais qui ne sont seraient plus ou adiabatique ou isotherme comme on l'a fait dans cette thèse. La mesure des champs nous permettrait alors de caractériser la transformation dans des conditions plus réalistes, permettant d'étudier la cinétique de transformation ainsi que l'énergie libre locale, et avoir un système thermomécanique non plus réduit à un élément de volume comme c'est le cas dans le chapitre IV de cette thèse.

Annexe A

Rappels de cristallographie

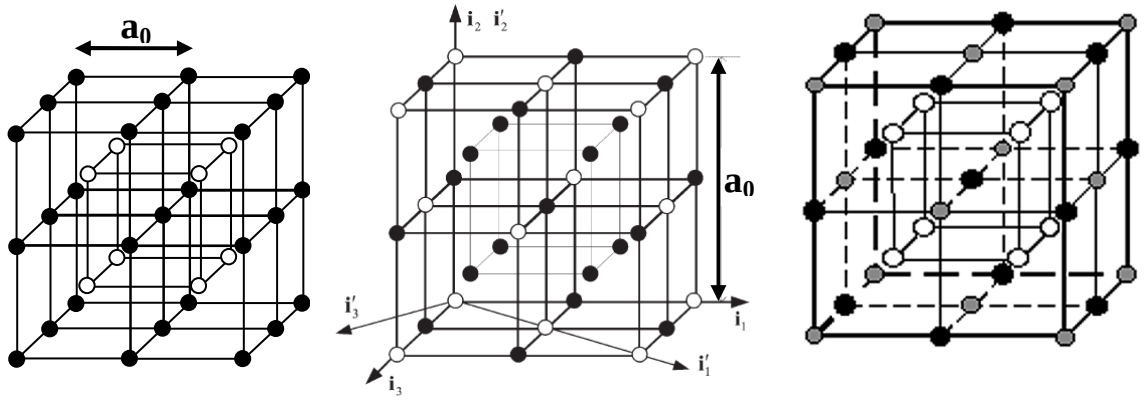
Un solide cristallin idéal est traduit géométriquement par un réseau cristallin, défini comme la reproduction périodique à l'infini d'un volume élémentaire, la maille, contenant une répartition d'atomes, le motif. La base de la maille permet de désigner un plan du cristal en spécifiant s'il coupe ou non l'un des axes de la base, c'est la méthode des indices de Miller. La géométrie de la maille définit le système cristallin (triclinique, monoclinique, orthorhombique, hexagonal, rhomboédrique, tétragonal, cubique). L'ensemble des isométries laissant le réseau cristallin invariant forme un groupe de symétrie appelé groupe d'espace. L'étude de l'ensemble des groupes d'espace relève de la théorie des groupes, et l'ordre du groupe correspond au nombre de ses éléments. Du fait de la pluralité historique des écoles cristallographiques, plusieurs nomenclatures des groupes d'espace coexistent, à savoir les symboles d'Hermann-Maugin, la notation Schoenflies, la nomenclature de Friedel, la nomenclature de Groth, la notation de Pearson. Le tableau A.1 illustre cet état de fait sur l'exemple du cristal monoatomique CFC.

Système cristallin :	cubique (C)	Groupe ponctuel :	Oh
Groupe espace :	225	Hermann-Maugin :	$Fm\overline{3}m$
Schoenflies :	I,C,Ri,Di,Ti,Cti,RiTi,DiTi,Mi,Cmi,RiMi,DiMi		
Friedel :	Holoédrie	Groth :	Hexakisoctaédrique
Pearson :	cF4		

Tab.A.1 – *Classification d'un cristal cubique faces centrée (CFC) monoatomique [CCMS 08]*

Cependant, la seule donnée du groupe d'espace ne suffit pas à décrire l'ordre chimique, c'est-à-dire l'arrangement des atomes (motif) sur le réseau cristallin. La notation de Strukturbericht[25] permet d'associer ces deux aspects. La figure A.1 représente trois mailles cubiques, avec les types d'atomes représentés par des niveaux de gris différents. Dans le cas (b) et (c) de la figure, la notation d'Hermann-Maugin $Fm\overline{3}m$ ne permet pas de faire la distinction entre ces cristaux et le cristal CFC monoatomique (tab.A.1), d'où la nécessité de la notation Strukturbericht.

[25] A : monoatomique, B : diatomique, C : biatomique A_2B, DO : rapport des compositions de 3-1, L : alliages



(a) $Pm\overline{3}m$ - B2 (b) $Fm\overline{3}m$ - DO_3 [Liew 03] (c) $Fm\overline{3}m$ - $L2_1$ [Satto 00]

Fig.A.1 – *Mailles cubiques selon différents ordres chimiques, accompagnées des notations d'Hermann-Maugin et de Strukturbericht*

Lors de la transformation de phase des alliages à mémoire de forme, des structures plus complexes vont apparaitre. Par exemple, la figure A.2 présente une coupe selon le plan de Miller [101] d'un cristal DO_3 et la compare à la coupe selon le plan [100] de ce même cristal après transformation, avec a, c et θ les paramètres décrivant cette nouvelle géométrie. Les plans d'empilement, notés par des lettres, présente une périodicité de 18 plans. De plus, la symétrie du cristal est orthorhombique avec une légère distorsion [Gonzalez 02]. Ces deux indications sont condensées par la notation de Ramsdell en M18R. De manière générale, la notation de Ramsdell [Parthé 72] se présente sous la forme d'un nombre, indiquant la périodicité, par exemple, des plans compacts, et d'une lettre, indiquant le système cristallin de la structure, et permet de différencier les polytypes (différenciation unidirectionnelle).

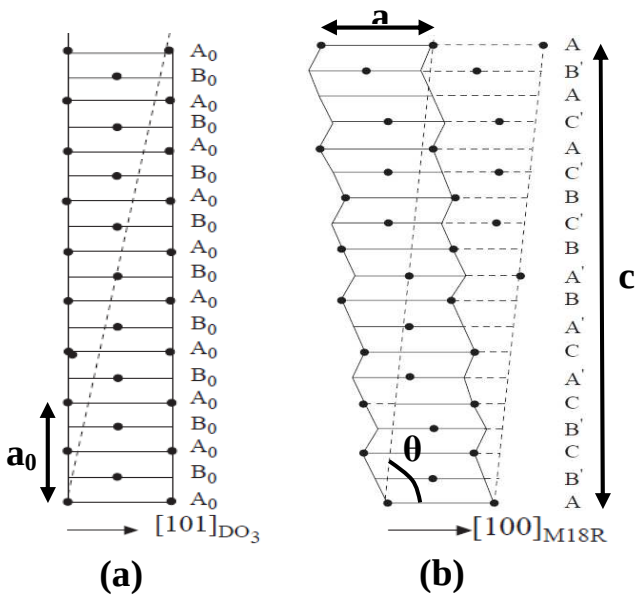


Fig.A.2 – *Comparaison du réseau DO_3 (a) avec 18R (b) [Akmak 98]*

Bibliographie

Abeyaratne R. Kim S.J., « Cyclic effects on shape-memory alloys, a one-dimensional continuum model », *Int. J. Solids Structures*, Vol.34, No.25, 3273-3289, 1997

Abeyaratne R., Bhattacharya K., Knowles J.K., *Strain-energy functions with multiple local minima: modelling phase transformations using finite thermoelasticity, Nonlinear elasticity: Theory and applications*, ef. Fu Y, Ogden R.W., Cambridge Univ. Press, 433-490, 2001

Abromeit C. Lazarev N., Schäublin R., Gotthardt R., « Atomic-scale simulation of martensitic phase transformation in NiAl », *Materials Sicence and Engineering A*, 481-82, 205-208, 2008

Ackland Base de données, 2003, http://homepages.ed.ac.uk/graeme/

Ackland G.J. Jones A.P., Noble-Eddy R., « Molecular dynamics simulations of the martensitic phase transition process », *Materials Sc. And Engineering A*, 481-482, 11-17, 2008

AFFNOR Projet A 51-080, 1990

Ahluwalia R. Lookman T., Saxena A., « Dynamic strain loading of cubic to tetragonal martensites », *Acta Materialia*, 54, 2109-2120, 2006

Akmak S. Artun E., « Theoretical analysis of the crystallography for DO_3->M18R martensitic transformation », *Tr. J. of Physics*, 22, 139-149, 1998

Albers .R.C. Ahluwalia R., Lookman T., Saxena A., « Modeling solid-solid phase transformations : from single crystal to polycristal behaviour », *Computational and Applied Mathematics*, Vol. 23, N.2-3, 345-361, 2004

Allen M.P. Tildesley D.J., *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon press Oxford, 412p., 1987.

Al-Matar A.Kh. Rockstraw D.A, « A generating equation for mixing rules and two new mixing rules for interatomic potential energy parameters », *J. Comput. Chem.*, 25, 660-668, 2004

An L. Huang W.M., « Transformation characteristics of shape memory alloys in a thermal cycle », *Materials Science and Engineering A*, vol.420, No.1-2, 220-227, 2006

Anand L. Gurtin M.E., « Thermal effects in the superelasticity of crystalline shape-memory materials », *J. of the Mech. And Physics of Solids*, 51, 1015-1058, 2003

Anciaux G. *Simulation multi-échelles des solides par une approche couplée dynamique moléculaire/éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance*, Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2007

Andersen H.C. « Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature », *J. Chem. Phys*., 72, 2384, 1980

Atmel documentation technique (ATMEL) http://www.alacron.com/CAMERA/machine-vision-cameras/ATMEL/doc5319.pdf

Auricchio F. Lubliner J., « A uniaxial model for shape-memory alloys », *Int. J. Solids Structures*, Vol.34, Nà.27, 3601-3618, 1997

Auricchio F. Petrini L., « A three-dimensional model describing stress-temperature induced solid phase transformations: thermomechanical coupling and hybrid composite applications », *Int. J. for Numerical Methods and Engineering*, 61, 716-737, 2004

Azadi B. Rajapakse R.K.N.D., Maijer D.M., « Multi-dimensional constitutive modelinf of SMA during unstable pseudoelastic behaviour », *International Journal of Solids and Structures*, 44, 6473-6490, 2007

Baeta-Neves A.P., Savi M.A., Pacheco P.M.C.L., « On the Fremond's constitutive model for shape memory alloys », *Mechanics Research Communications*, 31, 677-688; 2004

Balandraud X. *Changement de phase et changement d'échelle dans les alliages à mémoire de forme*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2000

Balandraud X., Chrysochoos A., Leclercq S., Peyroux R., « Effet du couplage thermomécanique sur la propagation d'un front de changement de phase », *C.R. Acad. Sci. Paris*, t.329, Série IIb, 621-626, 2001

Balandraud X. Zanzotto G., « Stressed microstructures in thermally induced M9R-M18R martensites », *J. of the Mech. and Physics of Solids*, 55, 194-224, 2007

Balian R. *Du microscopique au macroscopique*, cours de physique statistique de l'école polytechnique, tome2, 319p., 1982

Ball J. James R., « Fine phase mixtures as minimizers of energy », *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 100, 13-52, 1987

Balo S.N. Ceylan M., Aksoy M., « Effect of deformation on the microstructure of a Cu-Al-Be shape memory alloy », *Materials Sc. and Engineering, A*311, 151-156, 2001

Balo S.N. Ceylan M., « Effect of Be content on some characteristics of Cu–Al–Be shape memory alloys », *Journal of Materials Processing Technology*, 124, 200–208, 2002

Baron M.-P. *Etude du comportement des interfaces austénite/martensite de deux alliages à effet mémoire de forme : le CuZnAl et le CuAlBe*, Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, 1998

Bernard P.-E. *Parallélisation et multiprogrammation pour une application irrégulière de dynamique moléculaire opérationnelle*, Thèse de Doctorat, INPG, 1997

Berendsen H.J.C Postma.J.P.M, van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R., « Molecular dynamics with coupling to an external bath », *J. Chem. Phys.* 81, 3684-3690, 1984

Berthel B. *Mesure thermographiques de champs de dissipation accompagant la fatigue à grand nombre de cycle des aciers*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2007

Besseghini S., Stortiero F., Carcano G., Villa E., Mancini L., Tromba G., Zanini F., Montanari F., Airoldi G., « Characterisation of phase evolution under load by means of phase contrast imaging using synchrotron radiation », *Materials Science and Engineering A*, 378, 125-129, 2004

Bhattacharya K., James R.D., Swart P.J., « Relaxation in shape-memory alloys-Part I. Mecahnical model », *Acta mater.*, Vol.45, No.11, 4547-4560, 1997

Bhattacharya K., Dolzmann G., « Relaxed constitutive relation for phase transforming materials », *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, 48, 1893-1517, 2000

Blanc X. Le Bris C., Lions P.-L., « Convergence de modèle moléculaires vers des modèles de mécanique des milieux continus », *C.R. Acad. Sci. Paris*, t.332, Série I, 949-956, 2001

Blaschko O. Dmitriev V., Krexner G., Toledano P., « Theory of the martensitic phase transformations in lithium and sodium », *Phys. Review B*, Vol.59, Num.14, 1999

Boccara N. *Les principes de la thermodynamique classique*, Presse Universitaire de France, 137p.,1968

Bonfanti G. Framond M;, Luterotti F., « Existence and uniqueness results to a phase transition model based on microscopic accelerations and movements », *Nonlinear Analysis: Real World Application*, 5, 123-140, 2004

Bornert M. Brémand F., Doumalin P., Dupré J.-C., Fazzini M., Grédiac M., Hild F., Mistou S., Molimard J., Orteu J.-J., Robert L., Surrel Y., Vacher P., Wattrisse B., « Assessment of Digital Image Correlation Measurement Errors: Methodology and Results », *Experimental Mechanics*, 2008

Bosako S.I. Buchelnikov V.D., Takagi T., « The investigations of phase transitions in Ni-Mn-Ga external magnetic field », *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 272-276, 2102-2103, 2004

Boussinot G. Finel A., Le Bouar, « Phase-filed modeling of bimodal mircrostructures in nickel-based superalloys », *Acta Materialia*, 57, 921-931, 2009

Brinson L.C. Schmidt I., Lammering R., « Micro and Macromechanical investigations of CuAlNi single crystal and CuAlMnZn polycrystalline shape memory alloys », *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, Vol.13, 761-772 , 2002

Bubner N. Mackin G., Rogers R.C., « Rate dependence of hysteresis in one-dimensional phase transitions », *Computational Materials Science*, 18, 245-254, 2000

Callen H. *Thermodynamics and an introduction to thermostatics*, John Wiley & Sons, 512p., 1985

CCMS *CCMS Databases on Crystal Lattice Structures and Tight-Binding parameters*, 2008
http://cst-www.nrl.navy.mil/

Chambon S. Crouzil A., « Dense matching using correlation: new measures that are robust near occlusions », *Proceedings of British machine vision conference* (BMVC'2003) East Anglia, Norwich, UK, 143-152, 2003

Chang B.Ch Shaw J.A., Iadicola M.A., « Thermodynamics of shape memory alloy wire: modelling, experiments, and application », *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, Vol.18, No.1-2, 83-118, 2006

Charmm http://www.charmm.org/

Cherkaoui M. Berveiller M., Lemoine X., « Coupling between pasticity and martenstic phase transformation : overal behaviour of polycristalline TRIP steels », *International Journal of Plasticity*, 16, 1215-1241, 2000

Chernenko V.A., Pons J., Cesari E., Ishikawa, « Stress-temperature phase diagram of ferromagnetic Ni-Mn-Ga shape memory alloy », *Acta Materialia*, Vol.53, n°19, 5071-5077, 2005

Chipot Ch. Kollman P.A., Pearlman D.A., « Alternative approaches to potential of mean force calculations: free energy perturbation versus thermodynamic integration. Case study of some representative nonpolar interactions », *J of Computational Chemistry*, Vol.17, no.9, p1112-1131, 1996

Choi Y.K. *Réalisation et caractérisation de composites hybrides verre/epoxy/Ni-Ti adaptatifs*, Thèse de Doctorat, Ecole centrale de Lyon, 2002

Chrysochoos A., Louche H., « Analys thermographique des mécanismes de localisation dans les aciers doux », C.R.Acad. Sci. Paris, t.326, Série II b, 345-352, 1998

Chrysochoos A., Licht Ch., Peyroux R., « Une modélisation thermomécanique unidimensionnelle de la propagation d'un front de changement de phase dans un monocristal d'AMF », *C.R.Mécanique*, 331, 25-32, 2003

Chrysochoos A, Wattrisse B., Muracciole J-.M., El Kaïm Y., « Fields of stored energy associated with localized necking of steel », *J. of Mech. of Materials and Structures*, Vol.4, n°2, 245-262, 2009

Cingolani E. Stalmans R., Van Humbeeck J., Ahlers M., « Influence of thermal treatments on the long range order and the two way shape memory effect induced by stabilization in Cu-Al-Be single crystals », *Materials Science and Engineering A*, 268, 109-115, 1999

CI systems http://www.polytec.fr/ci-eo/eo/blackbodies.html

Clausius R. « On a Mechanical Theorem Applicable to Heat », *Philosophical Magazine, Ser. 4*, vol. 40, p.122–127, 1870

Cleri F. Rosato V., « Tight-binding potentials for transition metals and alloys », *Physical Review B*, Vol.48, Num.1, 1993

Coleman B.D., Noll W., « The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity », *Arch. Rational Mech. Anal.*, 13, 167-170, 1963

Collins S. http://www.dur.ac.uk/n.r.cameron/Grouppages.htm, group meeting technical talk, 2006

Colombo S. Cannizzo C., Gariboldi F., Airoldi G., « Electrical resistance and deformation during the stress-assisted two-way memory effect in $Ni_{45}Ti_{50}Cu_5$ alloy », *Journal of Alloys and Compounds*, Vol.422, n°1-2, 313-320, 2006

Cui J. Shield T.W., James R.D., « Phase transformation and magnetic anisotropy of an iron-palladium ferromagnetic shape-memory alloy », *Acta Materialia*, 52, 35-47, 2004

Cuzol A. *Suivi de champs denses de vitesses d'écoulements fluides par filtrage stochastique*, Journées Méthodes Particulaires en Mécanique des Fluides, 2007 http://www.math.univ-toulouse.fr/~baehr/JMPMF/

Daroczi L. Beke D.L., Lexcellent C., Mertinger V., « Effect of hydrostatic pressure on the martensitic transformation in CuZnAl(Mn) shape memory alloys », Scripta *mater.*, 43, 691-697, 2000

Darve E. Pohorille A., « Calculating free energies using average force », *J. of chemical phys.*, 115, 20, 2001

Daw M.S. Baskes M.I., « Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals », *Phsycal Review B*, Vol.29, No.12, 1984

De Mathlelin M. *Optimisation et programmation mathématique*, cours Master ISTI, ENSPS, 2008 http://eavr.u-strasbg.fr/wiki/index.php/Optimisation

Deutch T. *Modélisation des multicouches métalliques Au(001) /Ni Ag(001) /Ni et Au(001) /Co*, Thèse de Doctorat, INPG, Grenoble, 1995

Devroye L. *Non-uniform random variate generation*, Springer 1986 http://cg.scs.carleton.ca/~luc/rnbookindex.html

Diu.B Guthmann C., Lederer D., Roulet B., *Elément de physique statisitique*, Ed. Hermann, 1996

Dolzmann G. *Variationnal methods for crystalline microstructure: analysis and computation*, Springer-Verlag, 212p., 2003

Dove M.T. « Theory of displacive phase transitions in minerals », *American Mineralogist*, Vol.82, 213-244, 1997

Duerig T. Pelton A., Stöckel D., « An overview of nitinol medical applications », *Material Science and Engineering A*, 273-275, 149-160, 1999

Duffour E. *Interaction plasma-isolant. Applications au lanceur électrothermique et à l'interaction SF_6-polyéthylène*, Thèse de Doctorat, Université Blaise Pascal, 2000

Eaton-Evans J., Dulieu-Barton J.M., Little E., Brown I.A., « Experimental studies of NiTi self-expanding stent designs », *Journal of ASTM International*, 3, 9, 2006

Entemeyer D. Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M., « Strain rate sensitivity in superelasticity », *Int. J. of Plasticity*, 16, 1269-1288, 2000

Faciu C. Mihailescu-Suliciu M., « On modelling phase propagation in SAMs by a Maxwellian thermo-viscoelastic approach », *International Journal of Solids and Structures*, 39, 3811-3830, 2002

Faciu C. Molinari A., « On the longitudinal impact of two shape transformation bars. Elastic versus a rate-type approach. Part II: the rate-type case », *International Journal of Solids and Structure*, 43, 523-550, 2006

Falk F. « Model free energy, mechanics, and thermodynamics of shape memory alloys », *Acta Metallurgia*, Vol.28, 1773-1780, 1980

Falk F. Konopka P., « Three-dimensional Landau theory describing the martensitic phase transformation of shape-memory alloys », *J.Phys.: Condens. Matter*, 2, 61-77, 1990

Fang D.N. Lu W., Yan W.Y., Inoue T., Hwang K.C., « Stress-strain relation of CuAlNi SMA single crystal under biaxial loading-constitutive model and experiments », *Acta mater.*, Vol.47, No.1, 269-280, 1999

Favier D. Louche H., Schlosser P., Orgéas L., Vacher P., Debove L., « Homogeneous and heterogeneous deformation mechanisms in an austenitic polycrystalline Ti-50.8 at.% Ni thin under tension. Investigation via temperature and strain fields measurements », *Acta Materialia*, 55, 5310-5322, 2007

Finel A. Le Bouar Y., a publier, *présenté lors du colloque MECAMAT* 2009.

Finnis M.W. Sinclair J.E., *Philos. Mag. A*, 50, 45, 1984

Fraile-Rodriguez A., Ruiz-Larrea I, Lopez-Echarri A., San Juan J., « AC calorimetric study oh the thermoelastic martensitic transformation in Cu-Al-Ni alloys », *Script Materialia*, 54, 1199-1203, 2006

Frémond M. *Non-Smooth Thermomechanics*, Ed. Springer, 2002

Fu W.T. Visser D., Knight K.S., IJdo D.J.W., « Temperature-induced phase transitions in $BaTbO_3$ », *J. of solid State Chemistery*, 177, 1667-1671, 2004

Gadaj .S.P Nowacki W.K., Pieczyska E.A., « Temperature evolution in deformed shape memory alloy », *Infrared Physics & Technology*, 43, 151-155, 2002

Gall K. Sehitoglu H., « The role of texture in tension-compression asymmetry in polycrystalline NiTi », *Int. J. of Plasticity*, 15, 69-92, 1999

Gao X.J. Brinson L.C., « SMA single crystal experiments and michromechanical modeling for complex thermomechanical loading, Smart Structures and Materials: Active Materials: Behavior and Mechanics », *Proc. SPIE*, Vol.3992, 516-523, 2000b

Gao X.J. Brinson L.C., « A simplified multivariant SMA model based on invariant plane nature of martensitic transformation », *J. of Intelligent Material Systems and Structures*, 13, 795-810, 2002

Gao Ch. *Spin structure of antiferromagnetic thin films investigated with spin-polarized scanning tunneling microscopy*, Thèse de Doctorat, Université Martin-Luther de Halle-Wittenberg, 2006

Garbry B. Lexcellent Ch., No V.H., Miyazaki S., « Thermodynamical modelling of the recovery strains of sputter-deposited shape memory alloys Ti-Ni and Ti-Ni-Cu thin films », *Thin Solid Films*, 372, 118-133, 2000

Gastien R. Corbellani C.E., Alvarez Villar H.N., Sade M., Lovey F.C., « Pseudoelastic cycling in Cu-14.3Al-4.1Nu (wt.%) single crystals », *Materials Science and Engineering*, A 349, 191-196, 2003

Gaussorgues G. *La thermographie infrarouge*, Ed.Techniques et Documentation, Lavoisier, Paris.1989

Gauthier J.-Y. *Modélisation des Alliages à Mémoires de Forme Magnétiques pour la conversion d'énergie dans les actionneurs et leur commande*, Thèse de Doctorat, Université de Franche-Comté, 2007

Gautier E. Patoor E., « Experimental observations for shape memory alloys and transformation induced plasticity phenomena », *Mechanics of Solids with Phase Changes-CISM International Centre for Mechanical Science*, Courses and Lectures, Vol.7, p69-103, Springer, Berlin, 1997

Geneste G. « Local free energy in the parelectric phase of barium titanate », *Physical Review B*, 79, 144104, 2009

Germain P. *Cours de mécanique des milieux continus*, Masson, Paris, 1973

Germain P. Nguyen Q.S, Suquet P., « Continuum thermodynamics », *J.Appl.Mech*. 50, pp. 101-1020. 1983

Gonzalez C.H., *Etude des comportements électro-thermomécaniques et de la stabilisation martensitique d'alliages monocristallins à mémoire de forme base cuivre*, Thèse de Doctorat, INSA Lyon, 2002

Goldak J. Lloyd L.T., Barrett C.S., « Lattice parameters, thermal expansions, and Grüneisen coefficients of Zirconium, 4.2 to 1130°K », *Physical Review*, 144, 2, 1966

Grujicic M. Dang P., « Computer simulation of martensitic transformation in Fe-Ni face-centred cubic alloys », *Materials Sc. and Engineering A* 201, 194-204, 1995

Grujicic M. Dang P., « Atomic-scale analysis of martensitic transformation in titanium alloyed with vanadium Part II: molecular dynamics simulations », *Materials Sc. and Engineering A* 205, 153-165, 1996

Grujicic M. Lai S.G., Gumbsch, « Atomisitc simulation study of the effect of martensitic transformation volume change on crack-tip material evolution and fracture toughness », *Materials Sc. and Engineering A* 231, 151-162, 1997

Gu Y.T. « A coupled meshfree technique/molecular dynamics method for multiscale stress and deformation analysis in computational mechanics », *communication congrès ACAM* 2007

Gullet P.M. Horstemeyer M.F., « Baskes M.I., Fang H., A deformation gradient tensor and strain tensors for atomistic simulations », *Modelling and Siulation in Materials Science and Engineering*, 16, 17p., 2008

Guo Y.F. Wang Y.Sh., Wu W.P., Zhao D.L., « Atomisitc simulation of martensitic phase transformation at the crack tip in B2 NiAl », *Acta Materialia*, 55, 3891-3897, 2007

Halicioglu T. Pound G.M., *Phys. Stat. Sol. A* 30, 619, 1975

Hall G.J. Govindjee S., Sittner P., Novak V., « Simulation of cubic to monoclinic-II transformations in a single crystal Cu-Al-Ni tube », *International Journal of Plasticity*, Vol.23, 1, 161-182, 2007

Hall G.J. Govindjee S., « Application of a partially relaxed shape memory free energy function to estimate the phase diagram and predict global microstructure evolution », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50, 501-530, 2002

Halphen B. Nguyen Q.S, « Sur les matériaux standard généralisés », *J. de Mécanique*, 14: pp. 39-63. 1975

Handbook of chemistry and physics, 84th edition, CRC press, 2475p., 2003

Hansmann .U.H.E Okamoto Y, Eisenmenger F., « Molecular dynamics, Langevin and hybrid Monte Carlo simulations in a multicanonical ensemble », *Chemical Physics Letters*, 259, 321-330, 1996

Hare J. *Mécanique analytique*, 2007 http://www.phys.ens.fr/~hare/MecAnalLagrange2007.pdf

Hayoun M. *La méthode de Monte Carlo*, École "Simulation Numérique en Matière Condensée", 2002

Heitz D. Héas P., Navaza V., Carlier J., Mémin E., *Collaboration corrélation – méthode variationnelle pour une estimation robuste du flot optique*, 18éme Congrès Français de Mécanique, Grenoble 2007

Héritier M. *Cours de Mécanique statistique et transition de phases*, DEA de physique des solides, 1998 http://www.lps.u-psud.fr/spip.php?rubrique352&lang=fr

Hernandez E. « Cell dynamics based on the metric tensor as extended variable for isothermal-isobaric molecular dynamics simulations », *Computational Materials Science*, 27, 212-218, 2003

Hildebrand F.E., Abeyaratne R., « An atomistic investigation of the kinetics of detwinning », *J. of Mech. and Physics of Solids*, 56, 4, 1296-1319, 2008

Hirsinger L. Lexcellent Ch., « Modelling detwinning of martensite platelets under magnetic and (or) stress actions on Ni-Mn-Ga alloys », *J. of Magnetism and Magnetic Materials*, 254-255, 275-277, 2003

Honerkamp J. *Statistical Physics*, Springer, 2002

Honorat V., Moreau S., Muracciole J.-M., Wattrisse B., Chrysochoos A., « Calorimetric analysis of polymer behaviour using a pixel calibration of an IRFPA camera », *J. of QIRT*, Vol. 2, n°2, p.153-172, 2005

Honorat V. *Analyse thermomécanique par mesure de champs des élastomères*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2006

Hoover W.G. « Nosé-Hoover nonequilibrium dynamics and statistical mechanics », *Molecular Simulation*, Vol.33, No. 1-2, 13-19, 2007

Hormann K. Zimmer J., « On Landau theory and symmetric energy landscape for phase transitions », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.55, 7, 1385-1409, 2007

Hosada H. Hanada S., Inoue K., Fukui T., Mishima Y., Suzuki T., « Martensite transformation temperatures and mechanical properties of ternary NiTi alloys with offstoichiometric compositions », *Intermetallics*, 6, 291-301, 1998

Huang M.Sh. Brinson L.C., « A multivariant model for single crystal shape memory alloy behaviour », *J. Mech. Phys. Solids*., 46, 8, 1379-1409, 1998

Izyumov Y.A. Syromyatnikov V.N., *Phase transition and crystal symmetry*, Ed. Kluwer, 1984

James R.D. Hane K.F., « Martensitic transformations and shape-memory materials », *Acta Mater*., 48, 197-222, 2000

Janke L. Czaderki C., Motavalli M., Ruth J., « Application of shape memory alloys in civil engineering structures – Overview, limits and new ideas », *Materials and Structures*, 38, 578-592, 2005

Johnson R.A. *Philos. Mag. A*, 63, 865, 1991

Johnson R.A. Oh D.J., *J. Mater. Res.*, 4, 1195, 1989

Jou D. Casas-Vasquez J., Lebon G., « Extended irreversible thermodynamics revisited (1988-1998) », *Rep. Prog. Phys.* **62** 1035–1142, 1999

Kakeshita T. Fukuda T., Saburi T., « Time-dependent nature and origin of displacive transformation », *Science and Technology of Advenced Materials*, 1, 63-72, 2000

Kadau K. *Molekulardynamik-Simulationen von strukturellen Phasenumwandlungen un Festkörpern, Nanoparikeln und ultradünnen Filmen*, Thèse de Doctorat, Université Gerhard-Mercator de Duisburg, 2001a

Kadau K. Entel P., « Atomisitic investigation of the thermodynamical stability and martensitic nucleation of $Fe_{80}Ni_{20}$ nanoparticules », *Phase Transitions* 75, 59 2002

Kadau K. Entel P., Gemann T.C., Londhal P.S., Holian B.L., « Large-scale molecular-dynamics study of the nucleation process of martensite in Fe-Ni alloys », *J. Phys. IV France*, 11, 2001b

Kadau K. Germann T.C., Lomdahl P.S., Albers R.C., Wark J.S., Higginbotham A., Holian B.L., « Shock waves in polycrystalline Iron », *Physical review letters*, 98, 135701, 2007

Kaouache B. *Analyse multiéchelles de la transformation martensitique induit par contrainte dans les alliages à mémoire de forme. Corrélation contrainte-microstructure*, Thèse de Doctorat, ENSAM, 2006

Kastner O. « Molecular-dynamics of a 2D model of the shape memory effect, Part I: model and simulations », *Continuum Mech. Thermodyn.*, 15, 487-502, 2003

Kastner O. « Molecular-dynamics of a 2D model of the shape memory effect, Part II: thermodynamics of a small system », *Continuum Mech. Thermodyn.*, 18, 1-2, 63-81, 2006

Kastner O. Ackland G.J., « Mesoscale kinetics produces martensitic microstructure », *J. of the Mech. And Physics Solids*, 57, 109-121, 2009

Kazanc S. Tatar C., « Investigation of the effect of pressure on some physical parameters and thermoelastic phase transformation of NiAl alloy », *Int. J. of Solids and Structures*, 45, 3282-3289, 2008

Kelly P.M. Rose L.R.F., « The martensitic transformation in ceramics – its role in transformation toughening », *Progress in Materials Sc.* 47, 463-557, 2002

Khachaturyan A.G. Zhang.W, Jin .Y.M, « Phase field microelasticity modelling of heterogeneous nucleation and growth in martensitic alloys », *Acta Materialia*, Vol.55, 2, 565-574, 2006a

Khachaturyan A.G. Wang.Y, « Multi-scale field approach to martensitic transformations », *Science and Engineering A*, 438-440, 55-63, 2006b

Kohl M. Krevet B., Just E., « SMA microgripper system », *Sensors and Actuators A*, 97-98, 646-652, 2002

Kolafa J. « Gear formalism of the always stable predictor-corrector method for molecular dynamics of polarizable molecules », *The J. of Chemical Phys*. 122, 164105, 2005

Kumeta T. Enomoto M., « Influence of alloying elements on the lattice misfit between β'Ni_2AlTi andβNiTi phases », *Scripta mater.*, 44, 481-486, 2001

Künzi H.U. *Alliages à mémoire de forme et pseudo élastiques*, 2004
http://sti.epfl.ch/webdav/site/sti/shared/smx/import/migration/TPII_AlliagesMemoireLMM.pdf

Kuo H.H Wang W.H., Hsu Y.F., « Microstructural characterization of precipitates in Cu–10 wt.%Al–0.8 wt.%Be shape-memory alloy », *Materials Science and Engineering A* 430, 292-300, 2006

Kuo H.H. Wang W.H., Hsu Y.F., « Microstructural characterization of precipitates in Cu-10 wt.% Al-0.8 wt.% Be shape-memory alloy », *Materials Science and Engineering A*, 430, 292-300, 2006

Kuribayashi K., Tsuchiya K., You Zh, Tomus D., Unemoto M., Ito T., Sasaki M., « self-deployable origami stent grafts as a biomedical application of Ni-rich TiNi shape memory alloy foil », *Materials Science and Engineering A*, 419, 131-137, 2006

Kuznetsov A.R., Gornostyrec Yu.N.n Katnelson M.I., Trefilov A.V., « Affect of the dislocations on the kinematics of a martensitic transition MD simulation of

bcc-hcp transformation in Zr », *Materials Sc. And Engineering A* 309-310, 168-172, 2001

Lagoudas D.C., Entchev P.B., Papov P., Patoor E., Brinson L.C., Gao X.J., « Shape memory alloys, Part II: Modeling of polycrystals », *Mechanics of Materials*, 38, 430-462, 2006

Lagrée P-Y *Cours de Transferts thermiques et massiques dans les fluides*, ENSTA, 2009 http://www.lmm.jussieu.fr/~lagree/COURS/ENSTA/coursENSTA.html

Lai W.S. Liu B.X., « Lattice stability of some Ni-Ti alloy phases versus their chemical composition and disordering », *J. Phys.: Condensed Matter* 12, No 5, L53-L60, 2000

Lammps http://lammps.sandia.gov/

Leclercq S. *Analyse thermomécanique de la transformation martensitique dans les alliages à mémoire de forme, par mesures acoustiques, microscopie optique et thermographie infrarouge*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2001

Legoff M. *L'instrumentation en paléomagnétisme et en magnétisme des roches*, 2007 http://www.ipgp.fr/~legoff/Download-PPT/Expose_Maxime_Mars2007.ppt

Legoll F. *Problèmes multi-échelles dans les solides cristallins : quelques exemples*, 2006 http://leleu.ujf-grenoble.fr/CONGRES/CHANT/legoll.pdf

Legoll F. *Méthodes moléculaires et multi-échelles pour la simulation numérique des matériaux*, Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2004

Lexcellent C. Goo B.C., Sun Q.P., Bernardini J., « Characterization, thermomechanical behaviour and micromechanical-base constitutive model of shape-memory Cu-Zn-Al single crystals », *Acta Materialia*, 44, 9, 3773-3780, 1996

Lexcellent C. Vivet A., Bouvet C., Calloch S., Blanc P., « Experiemtnal and numercal determination of the initial surface of phase transformation under biaxial loading in some polycrystalline shape-memory alloys », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50, 2717-2735, 2002

Lexcellent Ch., Blanc P., « Phase transformation yield surface determination for some shape memory alloys », *Acta Materialia*, 52, 2317–2324, 2004

Li Y.H. Liu S.W., Jiang H.Ch., Wang Y., Deng Z.Y., Li Y.H., Wang Ch.Zh., « Analysis of the internal friction spectrum of TiNiCu alloy », *Journal of Alloys and Compounds*, Vol.430, n°1-2, 149-152, 2007

Li J.H. Dai X.D., Liang S.H., Tai K.P., Kong Y., Liu B.X., « Interatomic potentials of the binary transition metal systems and some applications in materials physics », *Physics Reports*, 455, 1–134, 2008

Liang Y.Ch. Kato H., Taya M., « Model calculation of 3D-phase transformation diagrm of ferromagnetic shape memory alloys », *Mechanics of Materials*, 38, 564-570, 2006

Liew K.M. Zhu J.J., « description of deformation in shape memory alloys from DO3 austenite to 18R martensite by group theory », *Acta Materialia*, 51, 2443-2456, 2003

Lim T.J. McDowell D.L., « Cyclic thermomecanical behaviour of a polycrystalline pseudoelastic shape memory alloy », *J. of the Mech. And Physics of Solids*, 50, 651-676, 2002

Lions J.-L. Dautrey R., *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques, tome 8. Evolution : semi groupe, variationnel*, Masson, 1985

Liu B.X. Li J.H., Dai X.D., Liang S.H., Tai K.P., Kong Y., « Interatomic potentials of the binary transition metal systems and some applications in materials physics », *Physics report*, 455, 1-134, 2008

Liu J.Y. Lu H., Chen J.M., Zhang Zh.L., « Finite element simulation of martensitic transition based on thermo-mecanical model », *Materials Science and Engineering A*, 448, 204-209, 2007

Liu .Y Liu Y., Van Humbeeck J., « Lüders-like deformation associated with martensite reorientation in NiTi », *Scripta Materialia*, Vol.39, No.8, 1047-1055, 1998

Liu W.K. Karpov E.G., Zhang S., Park H.S., « An introduction to computational nanomechanics and materials », *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*., 193, 1529-1578, 2004

Löbel M.T. *Caractérisation thermomécanique d'alliages à mémoire de forme de type NiTi et CuZnAl domaine de transition et cinétique de changement de phase*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 1995

Lopez-Cuellar E., Guénin G., Morin M., « Study of the stress-assisted two-way memory effect of a Ti-Ni-Cu alloy using resistivity and thermoelectric power techniques, *Materials Science and Engineering A*, 358, 350-355, 2003

Louche H. *Analyse par thermographie infrarouge des effets dissipatifs de la localisation dans des aciers*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 1999

Lovey F.C. Torra V., « Shape memory in Cu-based alloys: phenomenological behaviour at the mesoscale level and interaction of martensitic transformation with structural defects in Cu-Zn-Al », *Progress in Materials Science*, 44, 189-289, 1999

Lu H. Cary P., « Deformation measurements by digital image correlation: implementation of a second-order displacement gradient », *Exp. Mech.*, 40, 3, 393-400, 2000

Luskin M. *The stability and numerical analysis of martensitic microstructure*, in ENUMATH 97, H. Bock, F. Brezzi, R. Glowinski, G. Kanschat, Y. Kuznetsov, J. Periaux and R. Rannacher, editors, 54-69, 1998

Mackin G.S. *On an order-parameter model of solid-solid phase transitions*, Thèse de Doctorat, Faculty of Virginia Polytechnic Institute Faculté, 1997

McLachlan Atela P., « The accuracy of symplectic integrators », *Nonlinearity*, vol. 5, n°2, 541-562, 1992

Mei J. Davenport J.W., Fernando G.W., « Analytic embedded-atom potentiels for fcc metals: Application to liquid and solid copper », *Phy. Review B*, Vol.43, N°6, 1991

Melnik R.V.N., Roberts A.J., Thomas K.A., « Phase transitions in shape memory allouys with hyperbolic heat conduction and differential-algebraic models », *Computaional Mechanics*, 29, 16-26, 2002

Monovasilis Th., Kalogiratou Z., Simos T.E., « Families of third and fourth algebraic order trigonometrically fitted symplectic methods for the numerical integration of Hamiltonian systems », *Computer Physics Communications* 177, 757–763, 2007

Moreau F. Tidu A., Barbe Ph., Eberhardt A., Heizmann J.J., « Study of CuAlBe Shape Memory Alloy by X-Ray Diffraction », *J. de physique IV Colloque C2, supplément au Journal de Physique III*, 5, 1995

Moreau F. Tidu A., Eberhardt A., Bolle B., Heizmann J.J., « Orthorhombic lattice deformation of CuAlBe shape-memory single crystals under cyclic strain », *J. of Applied Crystallography*, 34, 722-729, 2001

Moumni Z. Zaki W., Zamfir S., « An extension of the ZM model for shape memory alloys accounting for platic deformation », *Mechanics of Materials, in press*, 2009

Müller Ch. Bruhns O.T., « A thermodynamic finite-strain model for pseudoelastic shape memory alloys », *Int. J. of Plasticity*, 22, 1658-1682, 2006

Müller I. Seelecke S., « Thermodynamic aspects of shape memory alloys », *Mathematical and Computing Modelling*, 34, 1307-1355, 2001

Murakami Y. Ohba T., Morii K., Aoki Sh., Otsuka K., « Crystallography of induced-B2-ζ'_2 (trigonal) martensitic transformation in Au-49.5 at.%Cd alloy », *Acta Materialia*, Vol. 55, n°9, 3203-3211, 2007

Nemat-Nasser S., Guo W.G., « Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates temperatures », *Mechanics of Material*, 38, 463-474, 2006

Nimésis http://www.nimesis.com/plaquettes/fap_nimesis.pdf

Nishimura F. Watanabe N., Tanaka K., « Transformation lines in a Fe-based shape memory alloy under tensile and compressive stress states », *Materials Sc. And*

Nishitani S.R. Kawabe H., Aoki M., « First-principles calculations on bcc-hcp transition of titanium », *Materials Science and Engineering A*, 77-83, 2001

Novak V. Sittner P., Ignacova S., Cernoch T., « Transformation behaviour of prism shaped shape memory alloy single crystals », *Materials Science Engineering A*, 438-440, 755-762, 2006

Novak V. Sittner P., Zarubova N., « Anisotropy of transformation characterisics of Cu-base shape memory alloys », *Materials Science and Engineering A*, 234-236, 414-417, 1997

Omelyan I.P Mryglod I.M., Folk R., « Optimized Forest–Ruth- and Suzuki-like algorithms for integration of motion in many-body systems », *Computer Physics Communications* 146, 188–202, 2002

Orgéas L. Favier .D, « Stress-induced martensitic transformation of a NiTi alloy in isothermal shear, tension and compression », *Acta mater.*, Vol.46, n°15, 5579-5591, 1998

Orriols A. *Algorithmes de dynamique moléculaire. Implémentation et validation*, DEA de mathématiques, ENSTA – Polytechnique – Paris 6, 2003

Otsuka K. Ren X., « Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys », *Progress in Materials Sc.*, 50, 511-678, 2005

Otsuka K. Murakami Y., Ohba T., Morii K., Aoki Sh., « Crystallography of stress-induced B2-ζ'_2 (trigonal) martensitic transformation in Au-49.5at%Cd alloy », *Acta Materialia*, 55, 9, 3203-3211, 2007

Ozgen S. Adiguzel O., « Molecular dynamics simulation of diffusionless phase transformation in a quenched NiAl alloy model », *J. of Physics and Chemistry of Solids*, 64, 459-464, 2003

Ozgen S. Adiguzel O., « Investigation of the thermoelastic phase transformation in a NiAl alloy by molecular dynamics simulation», *J. of Physics and Chemistry of Solids*, 65, 861-865, 2004

Paiva A. Savi M.A., Braga A.M.B., Pacheco P.M.C.L., « A constitutive model for shape memory alloys considering tensile-compressice asymmetry and plasticity », *International Journal of Solids and Structures*, 42, 3439-3457, 2005

Pajani D. « Thermographie - principes et mesure », *Technique de l'ingénieur*, RC3, R2740, 16p, 2001

Panoskaltsis V.P., Bahuguna S., Soldatos D., « On the thermomechanical modelling of shape memory alloys », *Int. J. of Non-Linear Mech.*, 39, 709-722, 2004

Parrinello M. Rahman A., « Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method », *J. Appl. Phys.*, 52, 12, 1981

Parthé E. Coing-Boyart J., *Cristallochimie des structures tétraédriques*, Ed. Gordon & Breach, 1972

Pasianot R. Savino E.J., « Embedded-atom-method interatomic potentials for hcp metals », *Phy. Rev. B*, Vol.45, No.22, 1992

Patoor E. Berveiller M., *Les alliages à mémoire de forme*, Paris, Edition Hermès, 1990

Patoor E. Lagoudas D.C., Entchev P.B., Brinson L.C., Gao X.J., « Shape memory alloys, Part I: General properties and modelling of single crystals », *Mechanics of Materials*, 38, 391-429, 2006

Pattabi M. Ramakrishna K., Mahesh K.K., « Effect of thermal cycling on the shape memory transformation behaviour of NiTi alloy: Powder X-ray diffraction study », *Materials Science and Engineering A*, 33-38, 2007

Peigney M. « A time-integration scheme for thermomechanical evolutions of shape-memory alloys », *C.R.Mecanique*, 334, 266-271, 2006

Peyroux R. Chrysochoos A., Lich Ch., Löbel M., « Thermomechanical coupligs and pseudoelasticity of shape memory alloys », *Int. J. of Engineerin Science*, 36, 4, 489-509, 1998

Pham H. *Analyse thermomécanique du comportement d'un alliage à mémoire de forme de type Cu-Zn-Al*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 1994

Popov P. Lagoudas D.C., « A 3-D constitutive model for shape memory alloys incorporating pseudoelasticity and detwinning of self-accommodated martensite », *International Journal of Plasticity*, 23, 1679-1720, 2007

Portier R. Hÿtch M.J., Vermaut Ph., Malarria J., « Study of atomistic displacement fields in shape memory alloys by high-resolution electron microscopy », *Materials Sc. Engineering A*273-275, 266-270, 1999

Pöschel T. T.Schwager, *Computational Granular Dynamics Models and Algorithms*, Springer, 2005

Qian L.M. Sun.Q.P., Xiao X.D., « Role of phase transition in the unusual microwear behaviour of superelastic NiTi shape memory alloy », *Wear*, Vol.206, n°4-5, 509-522, 2006

Rakotomalala R. *Tests de normalité*, Université Lumière Lyon 2, 2008 http://eric.univ-lyon2.fr/~ricco/cours/cours/Test_Normalite.pdf

Raniecki B. Lexcellent Ch., « Thermodynamics in isotropic pseudoelasticity in shape memory alloys », *Eur. J. Mech. A/Solids*, 17, 2, 185-205, 1998

Raviart P.-A. Thomas J.-M., *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Masson, Paris, 1993

Reed R.P. Schramm R.E., « Lattice Parameters of martensite and austenite in Fe-Ni alloys », *J. Appl. Phys*., 40, 3453, 1969

Ren X. Miura N., Taniwaki K., Otsuka K., Suzuki T., Tanaka K., Chumlyakov Y.I., Asai M., « Understanding the martensitic transformations in TiNi-based alloys by elastic constants measurement », *Materials Science and Engineering A*, 273-275, 190-194, 1999

Richefeu V. *Approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints*, Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2, 2005

Rifkin J.A. Li B., Zhang X.M., Clapp P.C., « Molecular dynamics simulations of the effects of defects on martensite nucleation », *J. of Applied Physics*, 95, 4, 2004

Rougée P. *Mécanique des grandes transformations*, Coll. Math et application, Vol.25, Ed. Springer, 1997

Rubin D. « A simple autocorrelation algorithm for determining grain size from digital images of sediment », *J. Sediment Red* 74, 1, 160-165, 2004

Rubini S. Ballone P., « Quasiharmonic and molecular-dynamics study of the martensitic transformation in Ni-Al alloys », *Physical review B*, 48, 1, 1993

Ruda M. Farkas D., Abriaa J., « Embedded-atom intereatomic potentiels for hydrogen in metals and intermetallic alloys », *Phy. Rev. B*, Vol.54, No.14, 1996

Ruehle V. « Pressure coupling / barostat », Journal Club, 2008 http://www.mpip-mainz.mpg.de/~andrienk/journal_club/

Ruehle V. « Berendsen and Nose-Hoover thermostats », Journal Club , 2007 http://www.mpip-mainz.mpg.de/~andrienk/journal_club/

Safak K.K. Adams G.G., « Modeling and simulation of an articficial muscle and its application to biomimetic robot posture control », *Robotics and Autonomous Systems*, 41, 225-243, 2002

Sari U. Aksoy I., « Electron microscopy study of 2H and 18R martensites in Cu-11.92 wt% Al-3.78 wt% Ni shape memory alloy », *Journal of Alloys and Compounds*, 417, 138-142, 2006

Sato T. Saitoh K., Shinke N., « Atomistic modelling of reversible phase transformation in Ni-Ti alloys: A molecular dynamics study », *Materials Sc. And Engineering A* 481-482, 250-253, 2007

Satto C. Jansen J., Lexcellent C., Schryvers D., « Structure refinement of L21 Cu-Zn-Al austenite, using dynamical electron diffraction data », *Solid State Communication*, 116, 273-277, 2000

Schelling P.K., Phillpot S.R., Keblinski P., « Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity », *Phy. Review B*, Vol.65, 144306, 2002

Schiller E.H. *Heat engine driven by shape memory alloys: prototyping and design*, Thesis de Master, Faculty of Virginia Polytechnic Institute, 2002

Schlosser P. *Influence of thermal and mechanical aspects and of their coupling on the homogenous or localized behaviour of NiTi alloys*, Thèse de Doctorat, Université JF, 2008

Shaw J.A. Kyriakides S., « Thermomechanical aspects of NiTi », *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.43, No.8, 1243-1281, 1995

Shield T.W. « Orientation dependence of the pseudoelastic behaviour of single crystals of Cu-Al-Ni in tension », *J. Mech. Phys. Solids*, Vol.43, No.6, 869-895, 1995

Shimono M. Suzuki T., Ren X., Otsuka K., Onodera H., « Study of martensitic transformation by use of Monte-Carlo method and molecular dynamics », *Materials Sc. and Engineering A*, 438-40, 95-98, 2006

Schurhammer R., *Simulations par dynamique moléculaire de la solvation et du comportement interfaciel d'espèces hydrophobes. Application à l'hypothèse TATB et à l'extraction liquide/liquide de cations par le CO2 supercritique*, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur Lyon, 2001

Siredey N. Patoor E., Berveiller M., Eberhardt A., « Constitutive equations for polycrystalline thermoelastic shape memory alloys. Part I. Intergranular interactions and behaviour of the grain », *Int. J. of Solids and Structures*, 36, 4289-4315, 1999

Skeel R.D. « Integration schemes for molecular dynamics and related applications », In M. Ainsworth and J. Levesley and M. Marletta editors, *The Graduate Student's Guide to Numerical Analysis, SSCM*, pages 119-176, Springer-Verlag, 1999

Smith G.F. Rivlin R.S., « The strain energy function for anisotropic elastic materials », *Trans. Am. Math. Soc.*, 88, 175-193, 1958

Song G. Ma N., Li H.N., « Appliacation of shape memory alloys in civil structures », *Engineering Structures*, 28, 1266-1274, 2006

Souza .I Martins J.L, « Metric tensor as the dynamical variable for variable-cell-shape molecular dynamics », *physical review B*, vol.55, Num.14, 1997

Sprekels J. Zheng S., « Maximal attractor for the system of a Landau-Ginzburg theory for structural phase transitions in shape memory alloys », *Physica D*, 121, 252-262, 1998

Stainier L. Dubois F., Peyroux R., MATILIB, « une bibliothèque portable de modèles constitutifs pour la mécanique non-linéaire des solides : concepts et implémentation », *6ème Colloque National en Calcul des Structures, GeM*, Vol.3, 25-32, Giens, 2003

Stainier L. *Approche variationnelle en thermomécanique des solides*, notes de cours donné à Montpellier, 2006

Sun Q.P. *Macroscopic domain evolution in NiTi microtube under stress*, CD, HKUST, Université de Hong Kong, Publishing Technology Center, 2005

Sun Q.P. Zhong Zh., « An inclusion theory for the propagation of martensite band in NiTi shape memory alloy wires under tension », *Int. J. of Plasticity*, 16, 1169-1187, 2000

Taine J. Petit J.-P., *Transferts thermiques : Introduction aux sciences des transferts*, Ed. DUNOD, 2003

Tan G. Liu Y., Sittner P., Saunders M., « Lüders-like deformation associated with stress-induced martensitic transformation in NiTi », *Scripta Materialia*, 50, 193-198, 2004

Thionnet A. Martin Ch., Barrada S., *Mécanique et comportement des milieux continues, tome 2 : Application et théorie des invariants*, Ellipses, 2003

Toledano P. Toledano J-C., *The Landau theory of phase transitions*, Ed. World Scientific, 1987

Toledano P. Dmitriev V., *Reconstructive phase transitions*, Ed. World Scientific, 1996

Triconnet K. Derrien K., Hild F., Baptiste D., « Parameter choice for optimized digital image correlation », *Optics and Lasers in engineering*, 47 , 728-737, 2009

Trinite V. *Etude théorique des phases titane*, Thèse de Doctorat, école polytechnique, 2006

Tuckerman M.E Yarne D.A, Samuelson Sh.O., Hughes A.L., Martyna G.J., « Exploiting multiple levels of parallelism in Molecular Dynamics based calculations via modern techniques and software paradigms on distributed memory computers », *Computer Physics Communications* 128, 333–376, 2000

Turteltaub.S Suiker.A.S.J, « Transformation-induced plasticity in ferrous alloys », *Int. J. of Solids and Structures*, 43, 4509-4545, 2006

Uchil J. Mahesh K.K., Ganesh Kumara K., « Dilatometric study of martensitic transformation in NiTiCu and NiTi shape memory alloys », *Journal of Materials Science*, 36, 5823-5827, 2001

Van Humbeeck J., « Non-medical applications of shape memory alloys », *Material Science and Engineering A*, 273-275, 134-148, 1999a

Van Humbeeck J., Liu Y., Xie Z., Delaey L., « Some results on the detwininning process in NiTi shape memory alloys », *Scripta Materialia*, 41, 12, 1273-1281, 1999b

Van Humbeeck J.V., « Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys », *Journal of Alloys and Compounds*, 355, 58-64, 2003

Varga L.K. Kovacs G., Takacs J., « Modeling the overlapping, simultaneous magnetization processes in ultrasoft nanocrystalline alloys », *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320, 26-29, 2008

Vascon R. *Cascades de déplacements atomiques dans le fer-α simulation par dynamique moléculaire*, Rapport CEA-R-5755, 1997

Vedentam Sr. Abeyaratne R., « A Helmoltz free-energy function for a Cu-Al-Ni shape memory alloy », *Int. J. of Non-linear Mech.*, 40, 177-193, 2005

Vigneron S. *Analyse cinématique et énergétique couplées du comportement en fatigue d'un superalliage de titane*, Mémoire de DEA, Université Montpellier 2, 2005

Viot P. *Simulation numérique en physique statistique*, cours de DEA, 2008 http://www.lptl.jussieu.fr/users/viot/coursPViot.html

Wang L.X. Melnik R.V.N., « Simulation of phase combinations in shape memory alloys patches by hybrid optimization methods », *Seventh IMAC International Conference on Iterative Method in Scientific Computing*, 5-8, 2005

Wang Y. Khachaturyan A.G., « Three-dimensional filed model and computer modelinfgof martensitic transformations », *Acta mater.*, Vol.45, No.2, 759-773, 1997

Wang Z.G. Zu X.T., Yu H.J., He X., Peng C., Huo Y., « Temperature memory effect in CuAlNi single crystalline and CuZnAl polycrystalline shape memory alloys », *Thermochimica Acta*, 448; 69-72, 2006

Wattrisse B. Chrysochoos A., Muracciole J-M., Némoz-Gaillard M., « Analysis of strain localization during tensile tests by digital image correlation », *Exp. Mech.*, 41, 1, 29-39, 2001a

Wattrisse B. Chrysochoos A., Muracciole J-M., Némoz-Gaillard M., « Kinematic manifestations of localization phenomena in steels by digital image correlation », *Eur. J. of Mech.*, A – Solids 20, 189-211, 2001b

Wechsler M.S., Lieberman M.S., Read T.A., « On the theory of the formation of martensite », *Transactions AIME*, 1503-1515, 1953

White A. « Intermolecular potentiels of mixed systems: testing the Lorentz-Berthelot mixing rules with Ab-Initio calculations », *DSTO*-TN-0302, 2000

Yang D.Z. Zhu M., Kuo K.H., « On the crystal structure and substructure of martensites formed in a CuZnAl alloy », *Proceedings of the International Conference on Martensitic Transformation*, The Japan Institute of Metals, 828-831, 1986

Yang Q. Stainier L., Ortiz M., « A variationnal formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids », *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.54, 2, 401-424, 2006

Zaki W. Moumni Z., « Modélisation thermomécanique des alliages à mémoire de forme : généralisation de la loi Moumni-Son », *J. Phys. IV France*, 124, 237-242, 2005

Zaki W. *Comportement thermo-mécanique des matériaux à mémoire de forme, modélisation macroscopique, chargement cyclique et fatigue*, Thèse de Doctorat, Ecole polytechnique, 2006

Zanzotto G. « The Cauchy-Born hypothesis, nonlinear elasticity and mechanical twinning in crystals », *Acta Crystallogr. A*, 52, 839-849, 1996

Zanzotto G. Soligo D., Pitteri M., « Non-generic concentrations for shape-memory alloys; the case of CuZnAl », *Acta. Mater.*, 47, 9, 2741-2750, 1999

Zanzotto G. Pitteri M., *Continiuum models for phase transitions and twinning in crystals*, Ed. Chapman & Hall, 385p., 2003

Zhang J.X. Zheng Y.F., Luo Y.C., Zhao L.C., « Substructure and boundary strucutre of deformed 18R martesite in a Cu-Zn-Al alloy », *Acta mater.*, Vol.47, No.12, 3497-3506, 1999

Zhang X.Y. Sun Q.S., Yu Sh.W., « A non-invariant plane model for the interface in CuAlNi single crystal shape memory alloys », *J. of the Mech. and Physics of Solids*, 48, 2163-2182, 2000a

Zhu J.J. Liew K.M., « Description of deformation in shape memory alloys from DO_3 austenite to 18R martensite by group theory », *Acta Materialia*, 51, 2443-2456, 2003

Résumé :
Cette étude est consacrée à l'analyse thermomécanique de la transformation martensitique prenant place dans les Alliages à Mémoire de Forme (AMF). Cette analyse est effectuée à différentes échelles et s'appuie sur des champs de mesures thermomécaniques, des simulations numériques 3D par éléments finis et des simulations utilisant la dynamique moléculaire. L'étude est restreinte au comportement pseudoélastique d'un monocristal de CuAlBe, soumis à des chargements de traction. Les observations par imagerie cinématique et énergétique couplées rendent possible la caractérisation précise et locale du front de changement de phase qui apparait lors d'une sollicitation mécanique d'une éprouvette d'AMF. L'analyse énergétique qui en est faite, permet d'interpréter la transformation de phase comme liée à un couplage thermomécanique fort, et de négliger la dissipation intrinsèque. Conformément à ces résultats, un modèle thermomécanique monovariant est proposé qui rend compte du phénomène d'hystérésis et des effets du temps observés expérimentalement. Le front de changement de phase est ensuite généré numériquement puis comparé à l'expérience et à la littérature. Dans un second temps, un modèle d'AMF idéal est proposé à l'échelle cristalline. La dynamique moléculaire permet de construire l'énergie libre associée à un ensemble d'atomes et de réaliser des expériences numériques. L'évolution du comportement avec la dimension de l'échantillon est étudiée numériquement puis discutée. Une tendance à la convexification du potentiel énergétique est observée, ainsi que l'apparition d'une microstructure complexe.

Mot-clés :
Alliages à mémoire de forme, Transformation martensitique, Couplage thermomécanique, Thermographie infrarouge, Corrélation d'images numériques, Traitement d'image, Dynamique moléculaire

MULTISCALE THERMOECANICAL ANALYSIS OF THE PHASE TRANSFORMATION IN MONOCRYSTALLINE SHAPE MEMORY ALLOYS

Abstract :
This study is devoted to thermomechanical analysis of the martensitic transformation of Shape Memory Alloys (SMA) with various scales and through tensile test, three-dimensional finite element simulations and molecular dynamics simulations. The study is restricted to the pseudoelastic behaviour of a CuAlBe single crystal. The observations by kinematic and energetical coupled imaging techniques allow us to characterize the front of phase change, which appears during a mechanical loading on a SMA sample. The energetic analysis of this experimentation enables us to interpret the phase transformation as a strong thermomechanical coupling, and to neglect the intrinsic dissipation. These hypotheses found the monovariant thermomechanical model and allow hysteretic phenomena and time effects without the intervention of irreversibility. Thus, the front of phase change is numerically generated and compared to experience and literature. In a second time, an ideal model of SMA is suggested at the crystalline scale. The use of molecular dynamics on this sample allows to apply a thermomechanical solicitation, and to build the associated energetic potential. The evolution of the sample behaviour according to its size is numerically studied then debated. A tendency to convexification of the energetic potential is noticed, as well as a complex microstructure development.

Key-words :
Shape memory alloys, Martensitic transformation, Thermomechanical couplings, Infrared thermography, Digital image correlation, Image processing, Molecular dynamic

Discipline : Mécanique et Génie Civil

LMGC – UMR 5508
Université MONTEPELLIER II
CC 048 Place Eugène Bataillon
34095 Montpellier Cedex 5