



HAL
open science

**Modélisation du comportement thermomécanique
d'alliages à mémoire de forme. Application au
dimensionnement de microsystèmes et extension en non
local**

Arnaud Duval

► **To cite this version:**

Arnaud Duval. Modélisation du comportement thermomécanique d'alliages à mémoire de forme. Application au dimensionnement de microsystèmes et extension en non local. Mécanique [physics.med-ph]. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 2009. Français. NNT : 2009NAN10132 . tel-01748289v2

HAL Id: tel-01748289

<https://theses.hal.science/tel-01748289v2>

Submitted on 6 Jan 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.

UNIVERSITÉ HENRI POINCARÉ, NANCY 1
LABORATOIRE D'ÉNERGÉTIQUE ET DE MÉCANIQUE THÉORIQUE ET
APPLIQUÉE

THÈSE

présentée en vue d'obtenir le grade de Docteur, spécialité
« Mécanique et Énergétique »

par

Arnaud Duval

MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE D'ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME. APPLICATION AU DIMENSIONNEMENT DE MICROSYSTÈMES ET EXTENSION EN NON LOCAL

Thèse soutenue le 8 décembre 2009 devant le jury composé de :

M. CHRISTIAN LEXCELLENT	Professeur, ENSMM Besançon	Président
M. GÉRARD RIO	Professeur, Université de Bretagne Sud	Rapporteur
M. ZIAD MOUMNI	Professeur, ENSTA ParisTech	Rapporteur
M. ÉTIENNE PATOOR	Professeur, Arts et Métiers ParisTech	Examineur
M. TARAK BEN ZINEB	Professeur, UHP, Nancy 1	Directeur
M. MOHAMED HABOUSSI	Maître de conférences HDR, INPL	Co-directeur

*« L'instabilité est nécessaire pour progresser. Si on reste sur place, on recule. »
(Michel Colucci)*

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier l'ensemble des membres du jury : Messieurs Ziad Moumni et Gérard Rio, qui ont accepté de rapporter mes travaux de thèse, Messieurs Christian LExcellent et Étienne Patoor, pour avoir bien voulu participer au jury.

Je remercie également Tarak Ben Zineb et Mohamed Haboussi pour la patience dont ils ont su faire preuve durant ces trois années et sans qui ce travail n'aurait pas pu voir le jour.

Un grand merci à mes collègues de bureau qui ont du supporter mes jeux de mots parfois capillotractés durant trois ans : Boris Piotrowski, Loïc Girod et Wajdi Zouari.

Je remercie également Yves Chemisky, avec qui j'ai pu échanger longuement sur la modélisation des AMF, ce qui nous a permis de bâtir les parties communes à nos thèses respectives.

Merci à toute l'équipe anciennement connue sous le nom de « MS » à l'ESSTIN (par ordre alphabétique des prénoms) : Alain Mikolazjak, Céline Bouby, Christian Ruby, Frédéric Thiébaud, Jean-Marie Génin, Patrice Bacher, Sébastien Naille, Valérie Berry-Kromer et Walid Khalil. Je tiens à saluer tout particulièrement Michel Gueury et Vincent Mollimard, qui ont su me donner goût à la mécanique, ainsi que Marie-Luce Boulet pour sa patience face à mon allergie à traiter les tâches administratives.

Merci également à l'équipe l'EMT qui, bien que chronophage, m'a permis de passer d'excellents moments et de concrétiser des idées très fumeuses (désolé pour ceux que j'ai pu oublier) : Gérard, Jean-Paul, Kévin, Emmanuel, Félix, Thibaud, Louis, Guillaume, Clément, Pierre-Emmanuel, Anthony, Dorian, Cédric, Julien, Dany, Jérôme, Maxime, Damien, et Florian.

Je conclurai en remerciant de tout cœur Lison, qui a bien voulu corriger les multiples fautes d'orthographe présentes dans ce mémoire (j'en profite pour rejeter la responsabilité sur elle s'il en reste) et qui commence à être très calée sur les AMF.

Bonne lecture.

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	vi
LISTE DES FIGURES	viii
INTRODUCTION	1
1 COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF ET MODÉLISATIONS EXISTANTES	3
1.1 GÉNÉRALITÉS	5
1.2 DESCRIPTION DU COMPORTEMENT	5
1.2.1 À l'échelle du réseau cristallin	5
1.2.2 À l'échelle du grain	5
1.3 COMPORTEMENTS MACROSCOPIQUES	7
1.3.1 Superélasticité	7
1.3.2 Effet mémoire de forme	9
1.3.3 Effet mémoire double sens ou double sens assisté	10
1.3.4 Autres comportements	11
1.3.5 Cas des chargements multiaxiaux et partiels	13
1.4 MÉCANISMES MICROSTRUCTURAUX PARTICULIERS	14
1.4.1 Accommodation inélastique des macles	14
1.4.2 Décalage des températures de transformation	17
1.5 MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF	17
1.5.1 Modèles micromécaniques	17
1.5.2 Modèles phénoménologiques	18
1.6 PARTICULARITÉS LIÉES AUX APPLICATIONS DE PETITE TAILLE	19
1.6.1 Effets de taille	20
1.6.2 Effets de localisation	22
1.6.3 Gestion des effets de localisation dans les modèles de plasticité	23
CONCLUSION	28
2 MODÉLISATION DU COMPORTEMENT MACROSCOPIQUE DES AMF À BASE NiTi	29
2.1 MÉCANISMES DE DÉFORMATION	31
2.2 ÉCRITURE D'UN POTENTIEL THERMODYNAMIQUE	31
2.3 CHOIX DES VARIABLES INTERNES	33
2.3.1 Déformation de transformation E^T	34
2.3.2 Déformation d'accommodation des macles	35
2.3.3 Variables internes retenues	36
2.4 DÉFINITION DU POTENTIEL THERMODYNAMIQUE	36
2.5 FORCES MOTRICES THERMODYNAMIQUES	39
2.6 EXPRESSION DE LA DISSIPATION	41
2.7 PRISE EN COMPTE DES CHARGEMENTS PARTIELS	43

2.8	MODÉLISATION DES LIMITATIONS PHYSIQUES	44
2.9	CONDITIONS D'ACTIVATION ET LOIS D'ÉVOLUTION	49
2.9.1	Transformation de phase	49
2.9.2	Orientation des variantes	49
2.9.3	Accommodation inélastique des macles	50
2.10	RÉCAPITULATIF DES DIFFÉRENTS CAS D'ACTIVATION	51
	CONCLUSION	51
3	IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE	53
3.1	RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DES ÉQUATIONS CONSTITUTIVES	55
3.1.1	Mise en équations	55
3.1.2	Gestion numérique des saturations	56
3.1.3	Expression des résidus de Newton-Raphson	57
3.2	IMPLÉMENTATION DU MODÈLE 3D DANS UN CODE DE CALCUL PAR ÉLÉMENTS FINIS	62
3.2.1	Prise en compte d'une loi de comportement non-linéaire dans une résolution par éléments finis	62
3.2.2	Calcul des modules tangents thermomécaniques de la loi de comportement	64
3.2.3	Prise en compte des rotations finies	66
3.3	IMPLÉMENTATION DES MODÈLES 2D CONTRAINTES PLANES ET AXISYMETRIQUE	67
3.3.1	Simplifications adoptées pour les modèles 2D	67
3.3.2	Notation de Voigt en 2D contraintes planes	69
3.3.3	Application : Problème de coques minces (cisaillement transverse)	73
3.4	VALIDATION DU MODÈLE ET DE SON IMPLÉMENTATION	75
3.4.1	Procédure d'identification des paramètres	76
3.4.2	Étude de sensibilité aux paramètres	82
3.4.3	Validation sur des cas de chargements complexes	87
3.4.4	Validation de l'hypothèse des contraintes planes	99
	CONCLUSION	105
4	PRISE EN COMPTE DES EFFETS SPÉCIFIQUES AUX APPLICATIONS DE PETITE TAILLE	109
4.1	DES EFFETS DE TAILLE À LA MODÉLISATION NON LOCALE	111
4.2	DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT FINI DE BARRE À APPROCHE NON LOCALE	112
4.2.1	Notion de non localité	112
4.2.2	Application de l'approche non locale pour un comportement superélastique	114
4.2.3	Forme faible de l'équilibre	115
4.2.4	Discrétisation spatiale	116
4.2.5	Calcul des matrices de rigidité	118
4.2.6	Résolution numérique	119
4.2.7	Simulations et résultats	120
4.3	DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT 2D CONTRAINTES PLANES À APPROCHE NON LOCALE	124
4.3.1	Motivations	124
4.3.2	Formulation de la non localité	124
4.3.3	Formulation intégrale faible	125
4.3.4	Discrétisation spatiale	126
4.3.5	Loi de comportement	129
	CONCLUSION	130
	PERSPECTIVES	130
5	APPLICATION AU CALCUL DE STRUCTURES	131

5.1	INTRODUCTION	133
5.2	TEST DE FLEXION SUR UNE LIME ENDODONTIQUE SUPERÉLASTIQUE	133
5.2.1	Description	133
5.2.2	Simulations et résultats	134
5.2.3	Perspectives	135
5.3	DIMENSIONNEMENT D'UNE MICROPOMPE	137
5.3.1	Principe	137
5.3.2	Simulation et résultats	137
5.3.3	Perspectives	138
5.4	ÉTUDE DES EFFETS DE LOCALISATION LORS D'UN ESSAI DE TRACTION SUR UNE PLAQUE TROUÉE	140
5.4.1	Description	140
5.4.2	Résultats et discussion	140
	CONCLUSION	141
	CONCLUSION GÉNÉRALE	145
A	ANNEXES	147
A.1	CHOIX D'UN SCHÉMA D'INTÉGRATION	149
A.1.1	Du continu vers l'incrémental	149
A.1.2	Intégration explicite	149
A.1.3	Intégration implicite	150
A.1.4	Intégration semi-implicite	150
A.1.5	Choix du schéma d'intégration pour le modèle AMF	150
A.2	CALCULS SPÉCIFIQUES AU MODÈLE 2D CONTRAINTES PLANES	151
A.2.1	Calcul des matrices de compliance et de souplesse	151
A.2.2	Expression de la déformation de transformation à saturation	153
A.2.3	Résidu d'écoulement et d'orientation avec notation vectorielle	153
A.3	PONDÉRATION NON-LOCALE PAR UNE FONCTION DE GREEN	154
	BIBLIOGRAPHIE	157
	NOTATIONS	165

LISTE DES FIGURES

1.1	Transformation de l'austénite en variantes de martensite.	6
1.2	Pseudo-diagramme de phase de la transformation martensitique.	6
1.3	Orientation des variantes de martensite par application d'une contrainte τ	7
1.4	Trajet de chargement mettant en évidence la superélasticité.	7
1.5	Applications exploitant l'effet superélastique	8
1.6	Trajet de chargement présentant un effet mémoire.	9
1.7	Applications de l'effet mémoire [Nim].	10
1.8	Applications de l'effet mémoire double sens assisté	11

1.9	Évolution de la réponse en déformation d'un actionneur TiNiCu activé thermiquement sous une contrainte constante de 154 MPa en fonction du nombre de cycles. a) cycles de déformation à saturation b) cycles à déformation partielle. ε^A et ε^M sont respectivement les déformations de l'austénite, de la martensite, accumulant de la plasticité, et ε^{act} est la déformation utile de l'actionneur. [Bertacchini et al. 2009].	11
1.10	Autres comportements des alliages à mémoire de forme.	12
1.11	Mise en évidence de la dissymétrie traction-compression pour différents types de comportements [Orgéas et Favier 1998]	13
1.12	Détermination expérimentale de la surface de transformation de phase pour un alliage CuAlBe [LExcellent et al. 2002]	14
1.13	Mise en évidence du phénomène de boucles internes lors d'un essai de traction-compression sur une barre de NiTi [Dolce et Cardone 2001b]	15
1.14	Évolution de la microstructure d'un Nickel-Titane soumis à un chargement mécanique : (1) État non déformé, (2) Accommodation inélastique des macles, (3) Réorientation de la martensite, (4) Réorientation des variantes de martensite et démaclage, (5) Démaclage, (6) Apparition de dislocations entraînant une déformation plastique [Liu et al. 1999].	16
1.15	Formation d'interfaces cohérentes suite à un chargement sur de la martensite formée auto-accommodée.	17
1.16	Principe de fonctionnement d'une micropompe dont le débattement est assuré par une membrane en AMF et un élément de rappel.	20
1.17	Perte de superélasticité dans des micropilliers de NiTi en fonction de leur diamètre [Frick et al. 2007].	20
1.18	Mise en évidence de l'effet mémoire double sens assisté sur des films minces de NiTi en fonction de leur épaisseur [Fu et al. 2006].	21
1.19	Composition atomique d'un film de NiTi d'épaisseur 48 nm déposé sur un substrat de silicium en fonction de son épaisseur [Fu et al. 2006]. La forte teneur en oxygène en surface est due à une oxydation.	22
1.20	Évolution de la taille d'hystérésis en contrainte pour un chargement superélastique en fonction de la taille de grain pour un échantillon de taille donnée [Sun et He 2008].	22
1.21	Modélisation d'un polycristal d'AMF à différentes échelles [Sun et He 2008].	23
1.22	Schématisation des réponses (a) locale contrainte-déformation et (b) globale force-allongement et la configuration de l'échantillon avant, pendant et après la transformation de phase austénite vers martensite [Churchill et al. 2009]. .	24
1.23	Essai de traction à une vitesse $\dot{\delta}/L = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. (a) Évolution de la contrainte, (b) diagramme de localisation de la déformation [Shaw et Kyriakides 1997]. .	24
1.24	Essai de traction à une vitesse $\dot{\delta}/L = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. (a) Évolution de la contrainte, (b) diagramme de localisation de la déformation [Shaw et Kyriakides 1997]. .	25
1.25	Barre soumise à une traction uniaxiale	25
1.26	Comportement d'une barre en traction avec adoucissement.	26
1.27	Effet du maillage sur les résultats numériques [Jirásek et Bažant 2002].	27
1.28	Convergence de la solution pour un modèle à approche non locales. Nel représente le nombre d'éléments [Jirásek et Bažant 2002].	28
2.1	Volume élémentaire représentatif d'un polycristal d'AMF.	31
2.2	Origines d'une déformation de transformation.	32

2.3	Décomposition du champ de contrainte hétérogène $\sigma(r)$ en quatre contributions : contrainte macroscopique $\sigma^I(r)$, saut de contrainte lié aux incompatibilités géométriques induites par l'activation de la transformation $\sigma^{II}(r)$, saut de contrainte liée aux incompatibilités d'apparition des variantes $\sigma^{III}(r)$ et saut de contrainte induit par la mobilité des interfaces intermacles $\sigma^{IV}(r)$.	37
2.4	Évolution des variables γ_f et F_f^{mem} lors d'un chargement superélastique présentant une boucle interne.	45
2.5	Surfaces de début et de fin de transformation pour le cas superélastique dans l'espace des contraintes.	48
2.6	Évolution des variables internes dans le cas d'une transformation austénite \rightarrow martensite lorsque l'orientation des variantes n'est pas activée.	50
3.1	Formulation « arrondie » des limites de saturation de la transformation martensitique : application à un chargement superélastique.	58
3.2	Allure des fonctions utilisées pour représenter numériquement les multiplicateurs de Lagrange.	58
3.3	Schéma de principe de la résolution des équations du modèle par la méthode de Newton-Raphson.	63
3.4	Discrétisation spatiale en éléments finis.	64
3.5	Schéma du principe de résolution par la méthode des éléments finis.	65
3.6	Exemple de simulation faisant intervenir des éléments de coque : vue en coupe d'une micropompe constituée de deux films minces d'AMF.	73
3.7	Description d'une plaque.	74
3.8	Identification des paramètres matériaux : pentes de transformation directe et inverse.	79
3.9	Identification des paramètres matériaux : paramètres liés à la modélisation des boucles internes.	80
3.10	Identification des paramètres matériaux : essai de traction sur de la martensite formée auto-accommodée.	80
3.11	Étude de l'influence du paramètre ϵ_{trac}^T .	84
3.12	Étude de l'influence du paramètre ϵ_{comp}^T .	85
3.13	Étude de l'influence du paramètre ϵ_{trac}^{TFA} .	86
3.14	Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à -20, -10 et 0 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux	88
3.15	Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à 10, 20 et 40 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux	89
3.16	Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à 60 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux	90
3.17	Simulation de chargements thermiques à contrainte constante et comparaison avec les résultats expérimentaux	92
3.18	Maillage utilisé pour la simulation des essais de traction-torsion de l'IP ASCR. Les éléments utilisés sont des hexaèdres (20 nœuds et 27 points d'intégration) et des prismes à base triangulaire (15 nœuds et 9 points d'intégration)	93
3.19	Cycles de traction-torsion à -40 °C	94
3.20	Cycles de traction-torsion à -20 °C	95
3.21	Cycles de traction-torsion à 0 °C	96
3.22	Cycles de traction-torsion à 50 °C	97
3.23	Prise en compte d'une contrainte interne afin de modéliser l'effet de texture du matériau [Hartl 2009].	98
3.24	Essais de retour contraint sur le plateau supérieur.	100

3.25	Essais de retour contraint sur le plateau inférieur.	101
3.26	Trajets de chargement carrés dans l'espace des déformations axiale et de cisaillement. Comparaison des résultats expérimentaux [Grabe et Bruhns 2009] et numérique pour les deux sens de parcours.	102
3.27	Trajets de chargement « papillon » dans l'espace des déformations axiale et de cisaillement. Comparaison des résultats expérimentaux [Grabe et Bruhns 2009] et numérique pour les deux sens de parcours.	103
3.28	Débattement d'une membrane sous pression. Comparaison entre les modèles 2D et 3D.	104
3.29	Débattement d'une membrane sous pression. Étude de l'influence de la rigidité de cisaillement transverse.	106
3.30	Modélisation par éléments finis du gonflement d'une membrane. Répartition de la fraction volumique de martensite.	107
4.1	Schématisation du problème en un domaine Ω de frontière Γ sur laquelle s'appliquent des conditions aux limites.	115
4.2	Passage d'un élément de structure à l'élément de référence.	119
4.3	Essais de traction sur une barre dont la zone centrale est affaiblie.	121
4.4	Réponse d'une barre affaiblie sollicitée en traction pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne ℓ	122
4.5	Distribution spatiale de la variable non locale \bar{f} au cours du chargement pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne ℓ	123
4.6	Influence du maillage sur la réponse force déplacement d'une poutre affaiblie.	123
4.7	Répartition spatiale de la quantité \bar{f} pour différentes densités de maillage à un état de chargement correspondant à une élongation globale de 2 %.	124
4.8	Passage d'un élément quadrangle de structure à un élément de référence par la transformation \mathcal{F}	127
5.1	Schéma de principe d'un traitement endodontique sur une molaire. De gauche à droite : dent dont la pulpe est infectée ou nécrosée, retrait de la partie supérieure de la dent, grattage de la surface intérieure du canal pulpaire à l'aide d'une lime en NiTi, obturation du canal [Kemp 2005].	133
5.2	Test de flexion des limes endodontiques selon la norme 3630-1.	134
5.3	Courbes de traction expérimentale et prédite par le modèle suite à l'identification des paramètres. Par soucis de confidentialité, les valeurs numériques ne sont pas indiquées.	135
5.4	Différentes finesses de maillage utilisées pour les simulations de flexion de lime endodontique.	136
5.5	Valeur de couple maximale obtenue expérimentalement et par simulation. La référence 100 est utilisée pour le résultat expérimental.	136
5.6	Répartition de la fraction volumique de martensite pour une lime fléchée à 45°	137
5.7	Vue en coupe d'une micropompe fluïdique faisant intervenir deux membranes en AMF antagonistes. (a) État au repos, (b) Mise en position base, (c) Mise en position haute.	137
5.8	Simulation d'une micropompe à membranes AMF antagonistes.	139
5.9	Simulation d'une micropompe : évolution du déplacement du piston et de la température de membranes antagonistes en fonction du temps.	139
5.10	Essai de traction sur une plaque trouée. Les pointillés représentent les axes de symétrie.	141

5.11	Mise en évidence d'un effet de taille sur la localisation de la transformation martensitique.	142
5.12	Réponse force-déplacement d'une plaque trouée lors d'un essai de traction pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne.	143

INTRODUCTION

LES matériaux usuels ont longtemps été utilisés pour leurs propriétés structurelles. Cependant, l'innovation technologique constante dans des domaines de pointe, tels que l'aéronautique, le biomédical, la production d'énergie ou encore l'automobile, ainsi que les progrès effectués au cours des cinquante dernières années dans le domaine de l'élaboration de matériaux à fort couplage multiphysique ont conduit à l'utilisation de matériaux, qui doivent désormais remplir une fonction.

Dans cette catégorie de matériaux dits *fonctionnels, adaptatifs* ou, par abus de langage, *intelligents*, les plus généralement utilisés sont ceux présentant un couplage électrique/mécanique (piézo-électrique), magnétique/mécanique (magnétostrictif), ou encore thermique/mécanique (alliages à mémoire de forme). Ils permettent notamment la conception de capteurs ou actionneurs qui ont pour avantage une grande simplicité, puisque c'est le matériau choisi qui remplit intrinsèquement la fonction attendue.

Leurs avantages sont de plus indéniables dès lors que la taille des applications tend à se réduire (microfluidique, microchirurgie, ...), et rend difficile l'utilisation de solutions classiques telles que les capteurs ou actionneurs mécaniques, hydrauliques ou électromagnétiques.

Pendant, l'utilisation de tels matériaux nécessite de connaître parfaitement leur comportement, et d'être capable de prédire leur réponse face à une stimulation extérieure. Il est donc important de mettre à disposition des ingénieurs des outils capables de dimensionner les structures adaptatives, couplés aux solutions usuelles de conception assistée par ordinateur.

Le présent travail concerne les alliages à mémoire de forme (AMF) particuliers que sont les Nickel-Titane. Ces derniers représentent la majeure partie des applications existantes. Dans le cas de films minces d'AMF utilisés au sein d'applications microfluidiques, une prise en compte des effets de taille et d'échelle est nécessaire. Une description du comportement du matériau *via* une approche non locale permet de prendre en compte ces effets.

Afin de décrire le comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme, il est nécessaire de comprendre et d'analyser les différents phénomènes impliqués à l'échelle de la microstructure. Différentes approches ont été utilisées par le milieu scientifique au cours de ces dernières années. Le point sur cette approche fait l'objet du *premier chapitre*.

Le *deuxième chapitre* décrit les étapes empruntées pour arriver au modèle proposé. Ces travaux ont fait l'objet d'une collaboration avec le LPMM de Metz. Les hypothèses simplificatrices, permettant une description à l'échelle macroscopique du matériau, sont précisées, et conduisent à la définition d'un jeu de variables internes décrivant l'état du milieu, puis les équations constitutives permettant de prédire l'évolution de ces variables sont posées.

Le *troisième chapitre* s'attache à la résolution des équations constitutives par une méthode numérique. Le modèle est ensuite implanté dans le code de calcul par éléments finis Abaqus. Un soin particulier a été porté sur la robustesse de cette implémentation face à tout type de simulation. Différentes bases de données expérimentales ont été confrontées aux prédictions proposées par le modèle. Ce travail permet notamment de définir les limites de validité de ce dernier.

Les matériaux adaptatifs se montrent particulièrement intéressants dans le cadre d'application de taille réduite. Cependant, ce changement d'échelle amène des variations dans le comportement des structures concernées, qui invalident les approches classiques par champ local. Le *quatrième chapitre* porte ainsi sur la modélisation non locale du comportement des alliages à mémoire de forme.

Le *cinquième chapitre* détaille des applications des AMF où l'utilisation des outils numériques développés permet d'optimiser les performances attendues.

COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF ET MODÉLISATIONS EXISTANTES

1

SOMMAIRE

1.1	GÉNÉRALITÉS	5
1.2	DESCRIPTION DU COMPORTEMENT	5
1.2.1	À l'échelle du réseau cristallin	5
1.2.2	À l'échelle du grain	5
1.3	COMPORTEMENTS MACROSCOPIQUES	7
1.3.1	Superélasticité	7
1.3.2	Effet mémoire de forme	9
1.3.3	Effet mémoire double sens ou double sens assisté	10
1.3.4	Autres comportements	11
1.3.5	Cas des chargements multiaxiaux et partiels	13
1.4	MÉCANISMES MICROSTRUCTURAUX PARTICULIERS	14
1.4.1	Accommodation inélastique des macles	14
1.4.2	Décalage des températures de transformation	17
1.5	MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF	17
1.5.1	Modèles micromécaniques	17
1.5.2	Modèles phénoménologiques	18
1.6	PARTICULARITÉS LIÉES AUX APPLICATIONS DE PETITE TAILLE	19
1.6.1	Effets de taille	20
1.6.2	Effets de localisation	22
1.6.3	Gestion des effets de localisation dans les modèles de plasticité	23
	CONCLUSION	28

AFIN de pouvoir proposer un modèle capable de prédire le comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme, il est impératif de connaître les origines microstructurelles de ce dernier. Les travaux scientifiques réalisés au cours des vingt dernières années se sont attachés à décrire et modéliser ce comportement à différentes échelles.

1.1 GÉNÉRALITÉS

La découverte des alliages présentant un effet mémoire de forme, qui a donné son nom à cette catégorie de matériaux métalliques, date de 1930. Ce n'est toutefois qu'en 1971 que la première application industrielle a vu le jour par le biais de manchons d'accouplement utilisés dans les avions de chasse F14 [Van Humbeeck 1999]. Si d'autres applications ont vu le jour dans les domaines biomédical, aéronautique ou domotique, l'essor de ces matériaux reste toutefois confidentiel. Patoor et Berveiller [Patoor et Berveiller 1994] justifient ceci par le fait que la connaissance et la maîtrise des alliages à mémoire de forme fait appel à une approche transversale comme cela peut être le cas pour les matériaux composites.

Cette catégorie de matériaux regroupe entre autre, des alliages à base nickel (NiTi) équiatomique, cuivre (CuAlBe) ou fer (FeMnSi) qui sont les plus couramment utilisés dans le cadre d'applications mais également les alliages à base d'or (AuCd). Tous ces alliages possèdent la particularité de présenter une phase mère dite austénitique pouvant, sous l'effet d'un chargement mécanique ou d'un changement de température, se transformer en une phase fille martensitique présentant un degré de symétrie plus faible. Cette transformation de phase est d'ordre 1, ce qui implique une réversibilité.

1.2 DESCRIPTION DU COMPORTEMENT

1.2.1 À l'échelle du réseau cristallin

À l'échelle de la microstructure, le comportement des alliages à mémoire de forme se traduit par la coexistence de deux phases distinctes : une phase mère austénitique présentant un réseau cubique, et une phase fille martensitique dont le réseau présente un degré de symétrie moins élevé (fig. 1.1). La transformation de phase est de type 1, c'est-à-dire qu'elle ne nécessite pas de diffusion atomique. Elle intervient seulement sur un déplacement des atomes à courte distance. Ce déplacement induit une déformation déviatorique du réseau cristallin. Il faut noter que la déformation obtenue ne présente pas un caractère plastique, et est de ce fait entièrement réversible.

Les mécanismes de déformation impliqués lors de cette transformation de phase ont été largement décrits par [Weschler et al. 1953] et [Bowles et Mackenzie 1954]. Ils se traduisent par une déformation de Bain entre la phase mère cubique austénitique et la phase fille martensitique présentant une symétrie moins élevée. Un plan invariant existe à l'interface des deux phases. Ce dernier implique une rotation du réseau cristallin, ainsi que la formation de macles afin d'assurer la coexistence des deux phases au niveau de ce plan. La figure 1.1 montre que la martensite ainsi formée peut se présenter sous différentes formes présentant la même structure cristallographique appelées *variantes*. Plusieurs de ces variantes peuvent ainsi se former à partir d'une même maille d'austénite.

1.2.2 À l'échelle du grain

La transformation de phase martensitique a lieu sous des conditions de chargement thermomécanique spécifiques. D'un point de vue thermique, la transformation de l'austénite en martensite commence à une température notée M_s (martensite *start*) pour se terminer à une température M_f (martensite *finish*). De la même manière, la transformation inverse de la martensite en austénite apparaît entre les températures notées A_s et A_f . Il faut noter que les températures de transformation directe et inverse ne coïncident pas, laissant ainsi apparaître une hystérésis de transformation. Cette dernière est caractéristique d'une dissipation

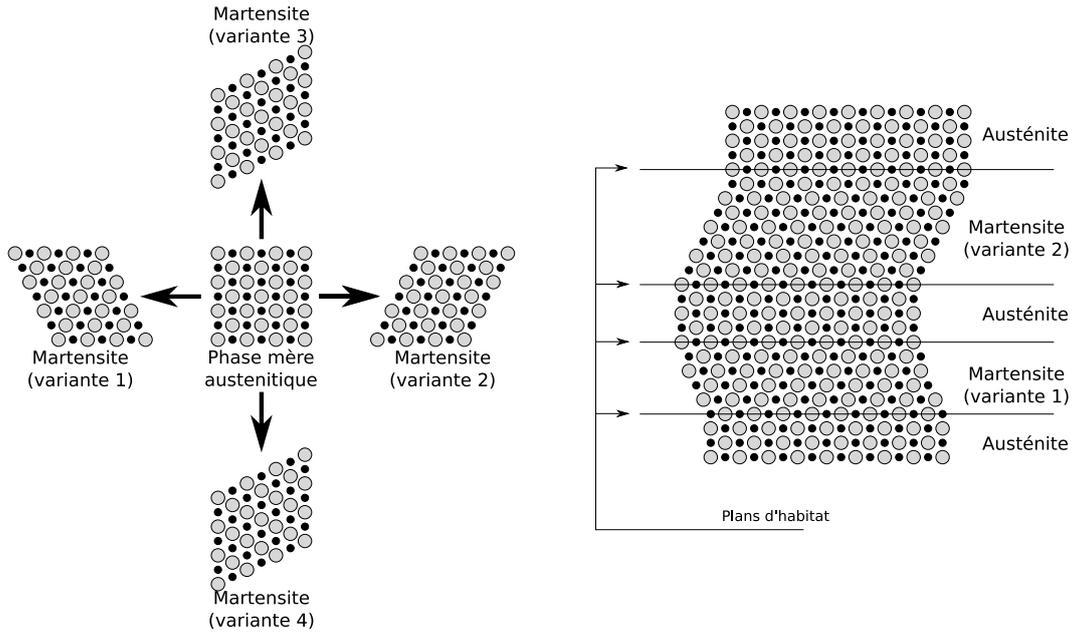


FIG. 1.1 – Transformation de l'austénite en variantes de martensite.

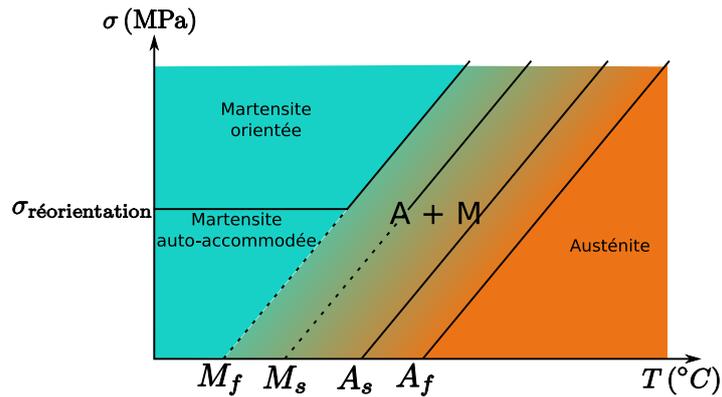


FIG. 1.2 – Pseudo-diagramme de phase de la transformation martensitique.

d'énergie. Sur le plan mécanique, l'application d'une contrainte peut également provoquer une transformation de phase. Il est ainsi possible de dresser un *pseudo-diagramme de phase* dans l'espace température-contrainte permettant de représenter les limites de transformation. Un tel diagramme est présenté dans la figure 1.2. En l'absence de contrainte, aucune variante de martensite n'est privilégiée. Ces dernières se forment donc de manière à minimiser l'énergie de déformation. Dans ce cas, les variantes se forment de façon *auto-accommodée* (fig. 1.3) et aucune déformation n'est visible à l'échelle macroscopique. En cas d'application d'une contrainte, les variantes privilégiées sont celles dont l'orientation correspond à la direction de la contrainte. Une contrainte minimale, dite *contrainte de réorientation* est nécessaire pour passer d'une martensite auto-accommodée à une martensite orientée.

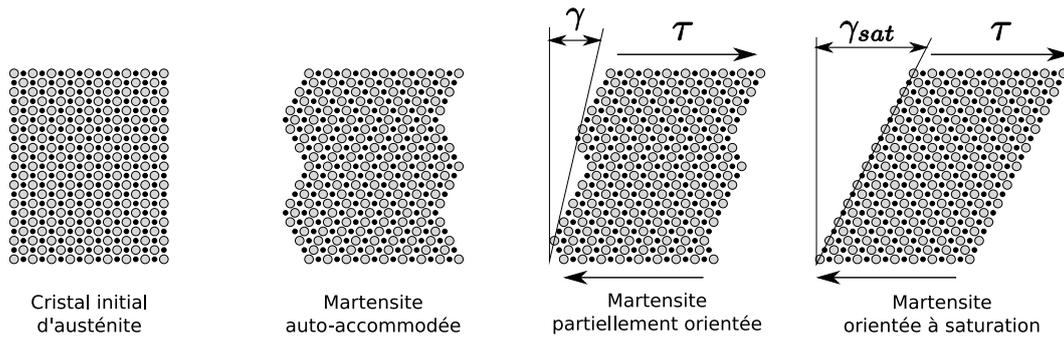
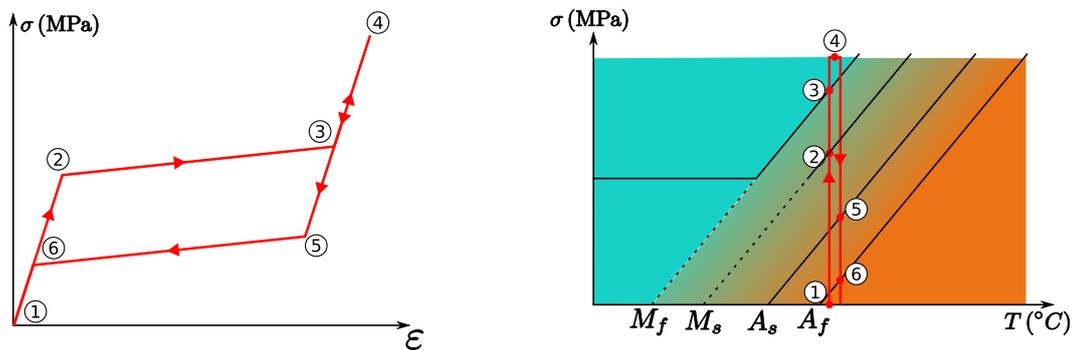
FIG. 1.3 – Orientation des variantes de martensite par application d'une contrainte τ 

FIG. 1.4 – Trajet de chargement mettant en évidence la superélasticité.

1.3 COMPORTEMENTS MACROSCOPIQUES

La déformation déviatorique due au cisaillement des variantes de martensite induit, à l'échelle macroscopique, une déformation dite *déformation de transformation*. Cette dernière permet de différencier, suivant les températures d'utilisation et la nature thermomécanique des chargements appliqués, différents effets caractéristiques des alliages à mémoire de forme.

1.3.1 Superélasticité

Description

L'effet superélastique est observable pour un AMF initialement austénitique ($T > A_f$). L'application d'une contrainte provoque la formation de variantes de martensite qui s'orientent, dès leur apparition, dans la direction de la contrainte. Le terme *superélastique* est dû au fait que la déformation obtenue peut être intégralement récupérée lorsque la contrainte est relâchée. En effet, la phase martensitique disparaît jusqu'à retrouver un matériau totalement austénitique. La figure 1.4 situe ce type de chargement dans l'espace contrainte-déformation ainsi que dans un pseudo-diagramme de phase.

Les principaux intérêts de ce type de comportement sont l'important niveau de déformation réversible pouvant être atteint (de l'ordre de 6 % pour un polycristal de NiTi), ainsi que le plateau durant lequel la transformation martensitique progresse. Ce dernier permet notamment de balayer un large éventail de déformations tout en restant à une contrainte quasi constante, ce qui rend ce type de comportement intéressant dans le cadre d'applications nécessitant un régulateur d'effort.

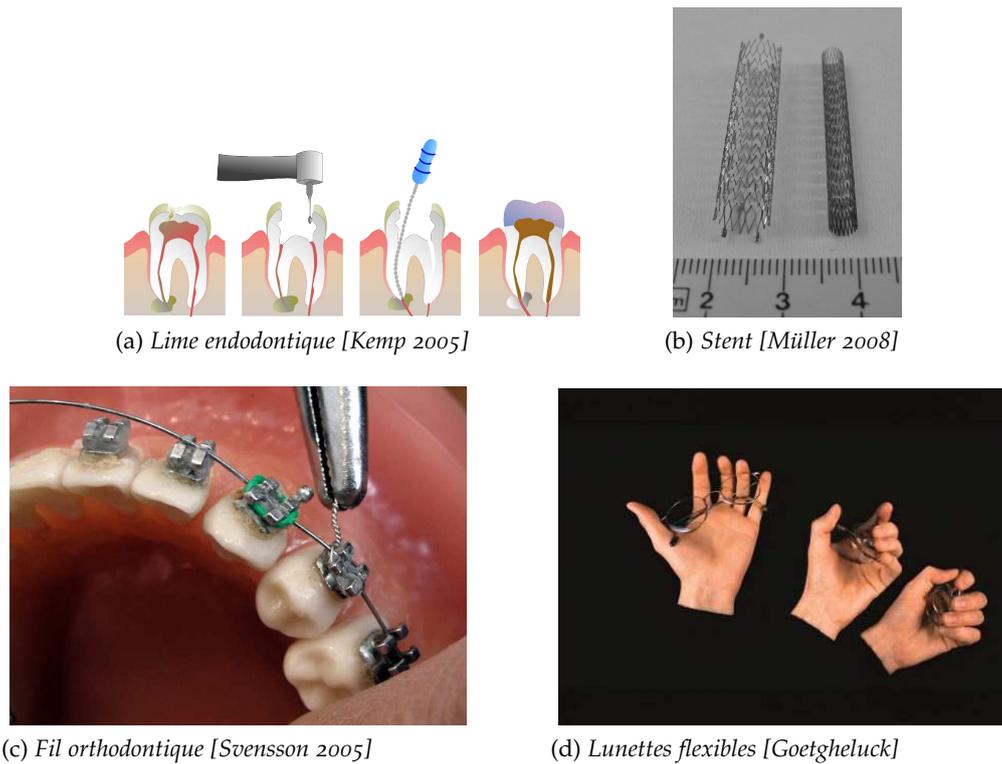


FIG. 1.5 – Applications exploitant l'effet superélastique

Applications

L'importante déformation réversible des AMF superélastiques est notamment utilisée dans les applications suivantes, qui regroupent essentiellement des produits à usage médical où la biocompatibilité du Nickel-Titane est un critère de choix, mais également des composants à usage plus courant :

- limes endodontiques (fig. 1.5a)
- stents (fig. 1.5b)
- appareils de chirurgie non invasive
- montures de lunettes flexibles (fig. 1.5d)
- baleines de soutien-gorge

De plus, l'utilisation de l'effet superélastique dans la zone du plateau de transformation permet l'utilisation d'AMF dans des produits nécessitant de réguler l'application d'un effort :

- fil d'appareil orthodontique (fig. 1.5c)
- pince chirurgicale à régulateur de force

Enfin, on peut noter la présence d'une hystérésis dans la courbe de traction-relâchement de l'effet superélastique, ce qui se traduit par une dissipation d'énergie sous forme de chaleur. De ce fait, il peut être utilisé au sein d'un amortisseur en tant qu'élément actif [Thiébaud 2007]. Les fréquences amorties sont de l'ordre de 1 Hz, ce qui rend les AMF adaptés à des utilisations anti-sismiques [Dolce et Cardone 2001a;b]. Une variation de température permet d'agir sur le coefficient d'amortissement.

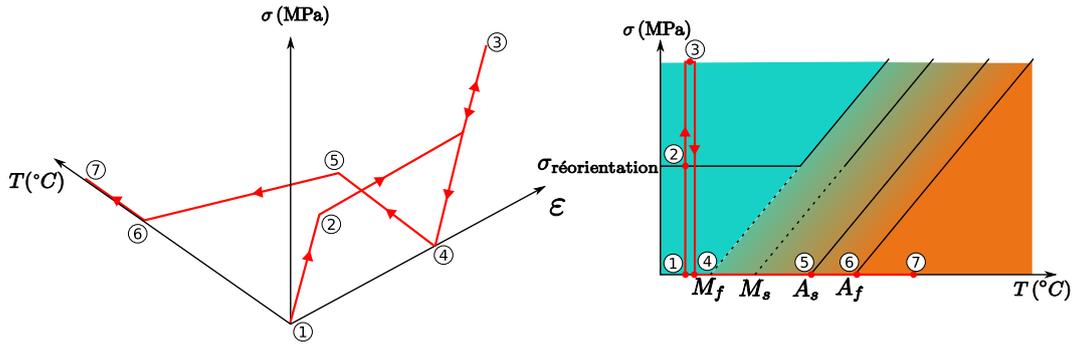


FIG. 1.6 – Trajet de chargement présentant un effet mémoire.

Limites d'utilisation

La principale limite du comportement superélastique concerne les chargements cycliques. En effet, l'accumulation de cycles de déformation jusqu'à une transformation martensitique totale ou partielle induit, d'une part la plastification du matériau qui entraîne une déformation rémanente non réversible, d'autre part le blocage de la transformation inverse de certaines variantes de martensite (celles-ci sont alors dites *stabilisées*) qui va réduire la déformation maximale réversible, et enfin un endommagement qui conduit à un nombre de cycles très limité (de l'ordre de 1000).

Pour pallier ces phénomènes, il est important de limiter le niveau maximal de déformation au cours de l'utilisation de l'application à 1 ou 2 %. Pour ce faire, le dimensionnement de la structure doit conduire à une optimisation de la géométrie pour essayer de répartir au maximum les niveaux de déformations.

1.3.2 Effet mémoire de forme

L'effet mémoire de forme s'observe dans un matériau initialement martensitique ($T < M_f$) présentant des variantes auto-accommodées. Lors d'un chargement mécanique, dès lors que le niveau de contrainte dépasse la contrainte critique de réorientation $\sigma_{reorientation}$ (fig. 1.6), les variantes s'orientent (dans la direction de la contrainte pour le cas d'un chargement proportionnel) jusqu'à atteindre la valeur maximale de cisaillement des variantes. Au-delà, on retrouve le comportement élastique de la martensite. Lors de la décharge, les variantes restent orientées et une déformation macroscopique rémanente est observée. Si un chauffage est ensuite effectué jusqu'à une température supérieure à A_f , la transformation de phase inverse, martensite vers austénite, se produit, ce qui permet de retrouver la structure cristalline de référence. À l'échelle macroscopique, ceci se traduit par un retour vers la forme initiale de la structure (la géométrie obtenue par le matériau austénitique est la même que celle présentant des variantes de martensite auto-accommodées). La figure 1.6 présente un tel chargement dans l'espace contrainte-déformation-température ainsi que dans le pseudo-diagramme de phase.

Une variante de l'effet mémoire consiste à bloquer la déformation rémanente au cours du chauffage. Ainsi, le retour vers une phase austénitique génère une contrainte élevée qui est notamment utilisée dans le cadre de dispositifs de serrage. On parle alors de *retour contraint*. C'est ce type de chargement qui est le plus couramment utilisé dans les applications exploitant l'effet mémoire des AMF :

- rupture de liaison sans explosif grâce à l'importante contrainte générée (fig. 1.7a)
- manchon d'accouplement de tubes en titane afin d'éviter le soudage (fig. 1.7b)

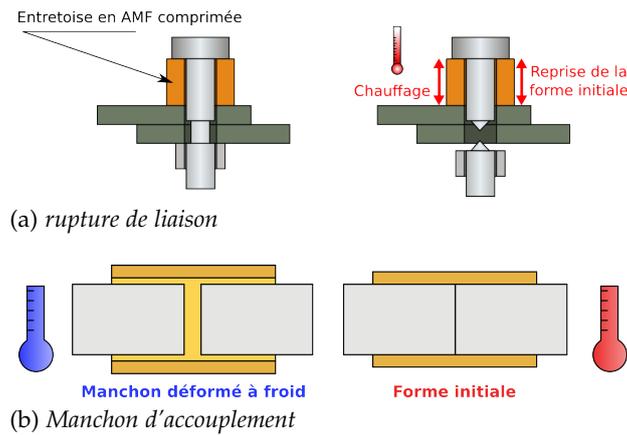


FIG. 1.7 – Applications de l'effet mémoire [Nim].

L'effet mémoire avec retour libre est utilisé dans des actionneurs simple effet. Le fait que les propriétés intrinsèques du matériau permettent de remplir la fonction demandée remplace avantageusement un dispositif mécanique complexe, plus particulièrement dans des applications de petite taille telles que :

- micro-pompe ;
- micro-valve ;
- contrôle de température.

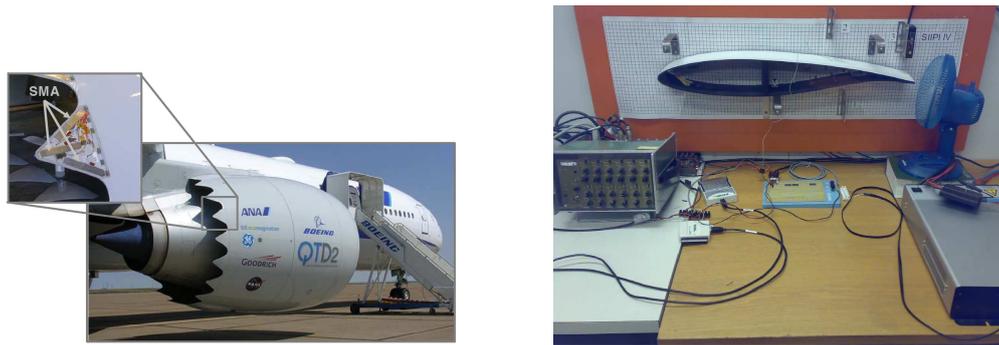
La plupart des applications étant à usage unique (serrage, rupture de liaison), le phénomène de cyclage n'apparaît pas et les phénomènes de fatigue peuvent ainsi être négligés. Ceci n'est pas le cas pour les actionneurs pour lesquels, une action extérieure pour provoquer l'orientation de la martensite est nécessaire. On parle alors d'*effet mémoire double sens* ou d'*effet mémoire double sens assisté*.

1.3.3 Effet mémoire double sens ou double sens assisté

En vue d'une application des AMF comme actionneur mécanique commandé par un changement de température, un point important à considérer est l'application de la contrainte qui va provoquer l'orientation des variantes de martensite. Deux effets permettent de pallier cette insuffisance et d'obtenir une forme chaude et une forme froide dont le passage de l'une à l'autre s'effectue uniquement par chauffage ou refroidissement.

L'effet mémoire double sens s'obtient par éducation du matériau. En effet, si le cycle mémoire simple sens est répété plusieurs fois, la dégradation des propriétés matérielles (baisse du niveau de déformation récupérable par chauffage) s'accompagne d'une chute de la contrainte nécessaire à l'orientation des variantes de martensite jusqu'à devenir négligeable. L'AMF peut ainsi se reconditionner seul lors du refroidissement. On est alors en présence de deux états stables entre lesquels on peut basculer par chauffage ou refroidissement. Il faut toutefois noter qu'il est impossible de générer un effort en bloquant le retour de la structure car ceci aurait pour effet d'annuler l'éducation en effaçant la forme froide en mémoire.

Pour pallier ces difficultés de mise en œuvre de l'effet mémoire double sens, la plupart des applications d'AMF comme actionneurs utilisent l'effet mémoire double sens assisté avec un élément de rappel qui peut être la structure elle-même ou un élément assimilable à un ressort. Le matériau travaille alors en effet mémoire simple, l'élément de rappel



(a) Réacteur d'avion à géométrie variable [Lagoudas 2008]

(b) Profil d'aile d'avion adaptatif [Ahola 2008]

FIG. 1.8 – Applications de l'effet mémoire double sens assisté

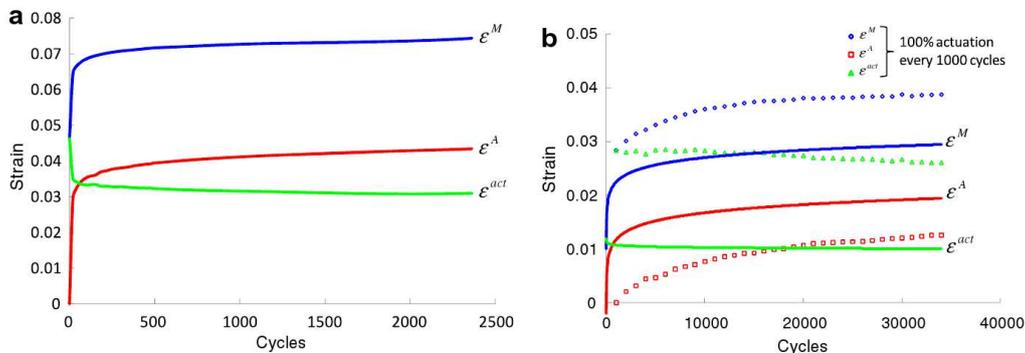


FIG. 1.9 – Évolution de la réponse en déformation d'un actionneur TiNiCu activé thermiquement sous une contrainte constante de 154 MPa en fonction du nombre de cycles. a) cycles de déformation à saturation b) cycles à déformation partielle. ϵ^A et ϵ^M sont respectivement les déformations de l'austénite, de la martensite, accumulant de la plasticité, et ϵ^{act} est la déformation utile de l'actionneur. [Bertacchini et al. 2009].

permettant uniquement de réorienter les variantes du matériau à l'état martensitique. Les principales applications de cet effet sont :

- actionneur formé d'un fil AMF noyé dans un polymère [Chemisky et al. 2009];
- réacteur d'avion à géométrie variable [Lagoudas 2008] (fig. 1.8a);
- profil d'aile d'avion à géométrie variable [Ahola 2008] (fig. 1.8b).

Si l'effet mémoire double sens assisté semble prometteur en terme d'applications, il faut toutefois garder à l'esprit l'aspect cyclage, omniprésent dans les actionneurs. Ce dernier entraîne une baisse de la déformation maximale obtenue entre la forme chaude et la forme froide (voir fig. 1.9) et peut entraîner une rupture par fatigue dans le cas d'un grand nombre de cycles.

1.3.4 Autres comportements

D'autres comportements sont observables au sein des AMF qui semblent pour le moment moins intéressants pour le concepteur, peuvent toutefois être utilisés au sein d'applications.

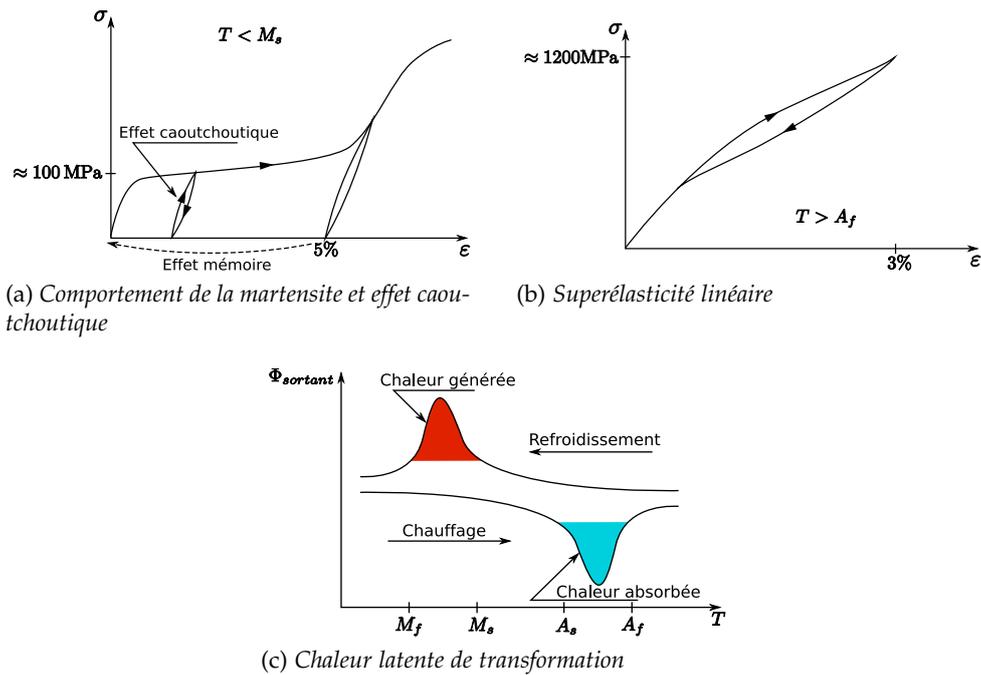


FIG. 1.10 – Autres comportements des alliages à mémoire de forme.

Comportement de la martensite

L'AMF sous forme martensitique présente une faible rigidité due à l'orientation des variantes sous basse contrainte. Le matériau est alors facilement malléable à la main ce qui le rend intéressant notamment pour des spatules utilisées en chirurgie. La forme initiale est retrouvée par chauffage (voir fig. 1.10a).

Effet caoutchoutique

La phase martensitique possède généralement un module apparent faible (de l'ordre de 35000 MPa) et une légère hystérésis entre la charge et la décharge. Ce comportement présente la particularité de ne pas se dégrader lors du cyclage. Il est alors possible d'utiliser le matériau dans un rôle d'amortisseur grâce au fait que l'hystérésis est présente dès les plus faibles niveaux de déformation (voir fig. 1.10a).

Un démonstrateur type de cet effet est une cloche qui, à chaud sous forme austénitique, produit un son, mais qui sous forme froide martensitique absorbe les vibrations et de fait ne génère aucun son.

Superélasticité linéaire

Certains traitements thermiques effectués lors de l'élaboration du matériau permettent de faire disparaître le saut de rigidité observé lors de la transformation de phase durant un chargement superélastique. Le comportement obtenu est alors quasiment linéaire, présente une faible hystérésis et permet d'atteindre des déformations de l'ordre de 3 % (voir fig. 1.10b). Il est de plus quasiment indépendant de la température. Cependant, pour obtenir ce type de comportement, il est nécessaire d'écrouir fortement le matériau lors du processus de mise en forme. Ceci limite donc fortement les géométries réalisables et par extension les applications permettant d'exploiter cet effet.

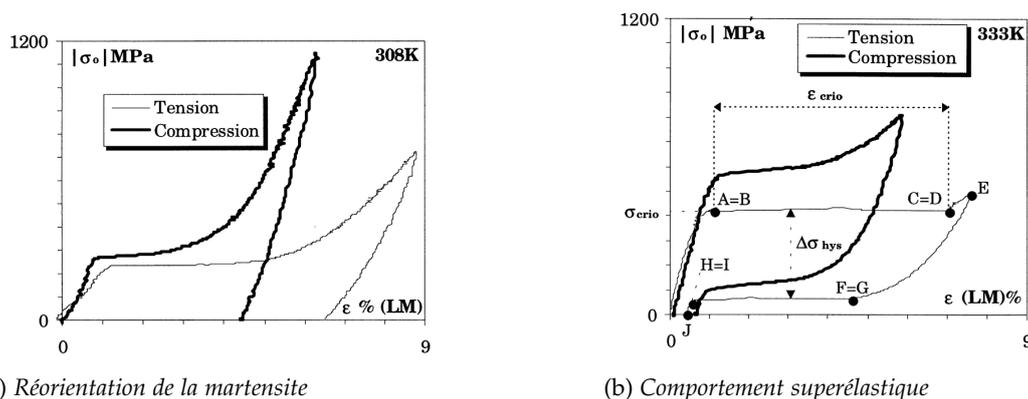


FIG. 1.11 – Mise en évidence de la dissymétrie traction-compression pour différents types de comportements [Orgéas et Favier 1998]

Résistivité et chaleur latente

D'autres particularités sont également observables comme le changement de résistivité électrique en fonction de l'état de chargement du matériau. Ceci qui permet de mesurer la quantité de martensite formée lors d'essais expérimentaux. On peut également citer la propriété d'absorber ou de restituer de la chaleur, le matériau ayant une tendance à conserver une température proche de celle d'équilibre de la transformation de phase : il fournit de la chaleur lorsqu'il est refroidi et au contraire, peut en absorber lorsqu'on le chauffe. La quantité massique de chaleur pouvant être absorbée ou restituée est de l'ordre de 28000 J/kg pour un alliage NiTi (voir fig. 1.10c).

1.3.5 Cas des chargements multiaxiaux et partiels

Dissymétrie traction-compression

Les chargements multiaxiaux sur des alliages à mémoire de forme font apparaître une dissymétrie traction-compression (fig. 1.11). Ainsi, le niveau de déformation pouvant être atteint lors d'une compression est inférieur à celui obtenu en traction (un rapport 3/4 est usuellement mesuré). Cette dissymétrie est également observable sur les contraintes de début de réorientation des variantes (pour le cas d'un chargement sur un matériau martensitique auto-accommodé) et de début de transformation de phase (pour un chargement superélastique) qui sont généralement plus élevées pour un chargement en compression. De façon plus générale, [L'excellent et al. 2002] ont effectué une série d'essais afin de représenter la limite du domaine élastique de l'austénite pour des chargements superélastiques multiaxiaux (voir fig. 1.12). Outre la dissymétrie traction-compression, ces essais mettent en évidence une surface de charge en forme de « poire ».

Patoor *et al.* [Patoor et al. 1995] ont pu, à l'aide de modèles micromécaniques décrivant la formation des variantes de martensite à l'échelle du réseau cristallin, montrer l'origine de cette dissymétrie. Elle est due à la perte de symétrie lors du passage de la phase mère austénitique à une phase fille orthorhombique, plusieurs variantes pouvant se former à partir d'une même maille d'austénite (24 variantes sont par exemple possibles pour les alliages NiTi). C'est ensuite le type de chargement qui va dicter les variantes susceptibles de se former. Ainsi, les variantes formées ne sont pas les mêmes pour un chargement en compression et un chargement en traction, ce qui implique, à l'échelle macroscopique, un niveau de déformation de transformation sensiblement différent pour les deux cas.

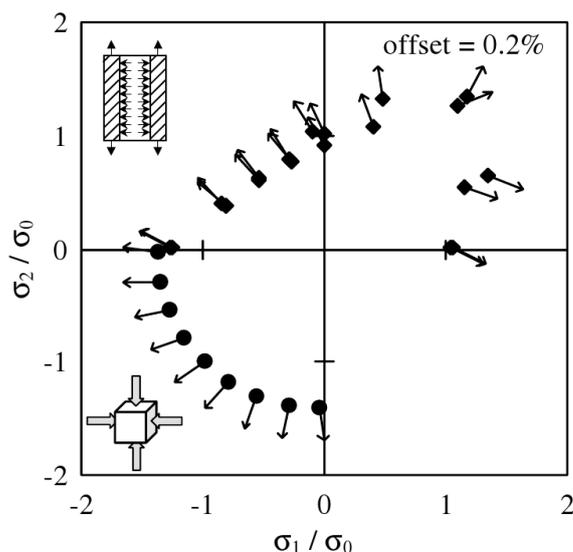


FIG. 1.12 – Détermination expérimentale de la surface de transformation de phase pour un alliage CuAlBe [Excellent et al. 2002]

Cas des chargements partiels

Les cas de chargement présentés jusqu'alors possèdent la particularité d'être menés jusqu'à un état de saturation (transformation de phase totale ou orientation des variantes de martensite jusqu'à leur valeur de cisaillement maximal). Ceci est rarement le cas pour des applications concrètes, notamment en raison de leur géométrie qui implique généralement un gradient de contrainte au sein du domaine considéré. Or, les AMF ont la particularité de présenter un phénomène de *boucles internes* lors des chargements partiels (fig. 1.13) qui fait que le comportement du matériau lors de ce type de chargement ne peut pas être prédit à partir de la seule connaissance de son comportement lors d'un chargement à saturation. Ce phénomène est particulièrement observable pour la transformation martensitique et quasiment absent lors du phénomène de réorientation des variantes. Il se traduit principalement par une variation de la contrainte nécessaire pour amorcer la transformation de phase inverse et un changement de module apparent. On peut toutefois noter que ce phénomène est fortement dépendant de l'avancement de la transformation de phase au moment du changement de trajet de chargement.

1.4 MÉCANISMES MICROSTRUCTURAUX PARTICULIERS

Ce travail concerne en particulier les alliages à mémoire de forme base Nickel Titane rencontrés dans la plupart des applications. Malgré le fait qu'ils soient si largement utilisés, les NiTi présentent certaines particularités qui ne sont pas nécessairement prises en compte lors de l'élaboration de modèles de comportement. Leur modélisation permettrait de proposer une prédiction de la réponse d'une structure en NiTi à un chargement thermomécanique plus réaliste.

1.4.1 Accommodation inélastique des macles

L'étude d'essais de traction sur un NiTi initialement martensitique met en évidence un module apparent plus faible que le module élastique de la martensite, et ce, avant que

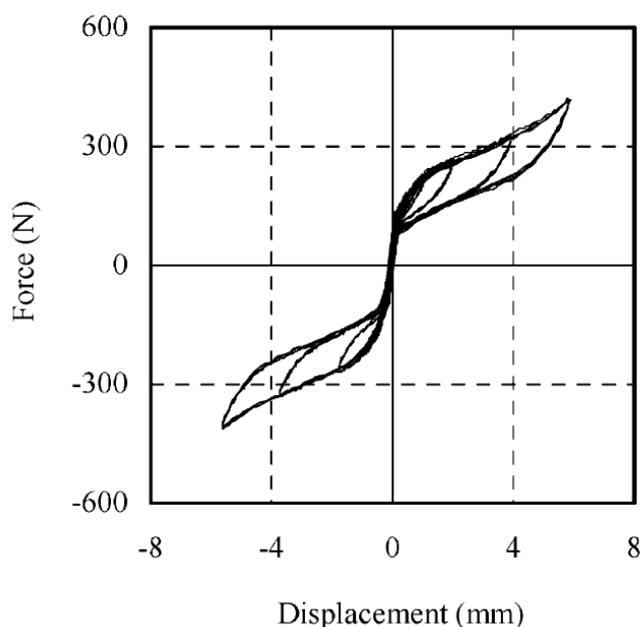


FIG. 1.13 – Mise en évidence du phénomène de boucles internes lors d'un essai de traction-compression sur une barre de NiTi [Dolce et Cardone 2001b]

ne démarre le processus de réorientation des variantes. [Liu et al. 1999] ont décomposé ce type de chargement en différents comportements à l'échelle de la microstructure (voir fig. 1.14). Ainsi, le premier stade de déformation de la martensite formée auto-accommodée correspond à un mécanisme d'accommodation de macles. Il est ensuite suivi par un plateau de contrainte où a lieu la réorientation des variantes de martensite. Une fois les variantes orientées à saturation, les mécanismes de déformation en jeu sont du démaillage suivi de la formation de dislocations entraînant une déformation plastique à l'échelle macroscopique.

La théorie de Weschler *et al.* [Weschler et al. 1953] décrit les mécanismes impliqués dans la transformation de phase martensitique. Pour former des variantes de martensite à plan d'habitat, cette théorie propose trois types de déformations à l'échelle du réseau cristallin : une déformation de Bain (cisaillement), une rotation du réseau et l'apparition de macles. Lorsque la martensite apparaît sous forme auto-accommodée, les variantes sont maclées et l'interface entre les variantes présente la particularité de ne pas être cohérente par rapport aux variantes situées de part et d'autre de celle-ci (fig. 1.15a) entraînant un contraste de déformation. Lorsqu'une contrainte est appliquée, les macles se réorganisent de façon à former une interface cohérente (fig. 1.15b).

Ce mécanisme permet de réduire l'énergie d'interface et favorise le déclenchement du mécanisme de réorientation des variantes. L'accommodation des macles se produit sous une faible contrainte. Dans le cas de martensite formée de façon orientée, des observations menées par [Tirry et Schryvers 2008] ont montré que la microstructure ne présente pas de macles, et ce, même après décharge du matériau. Il est donc important, dans un but de modélisation de ce phénomène, de considérer la forme sous laquelle la martensite a été formée, la martensite formée auto-accommodée fait apparaître des structures maclées, ce qui n'est pas le cas pour la martensite formée orientée.

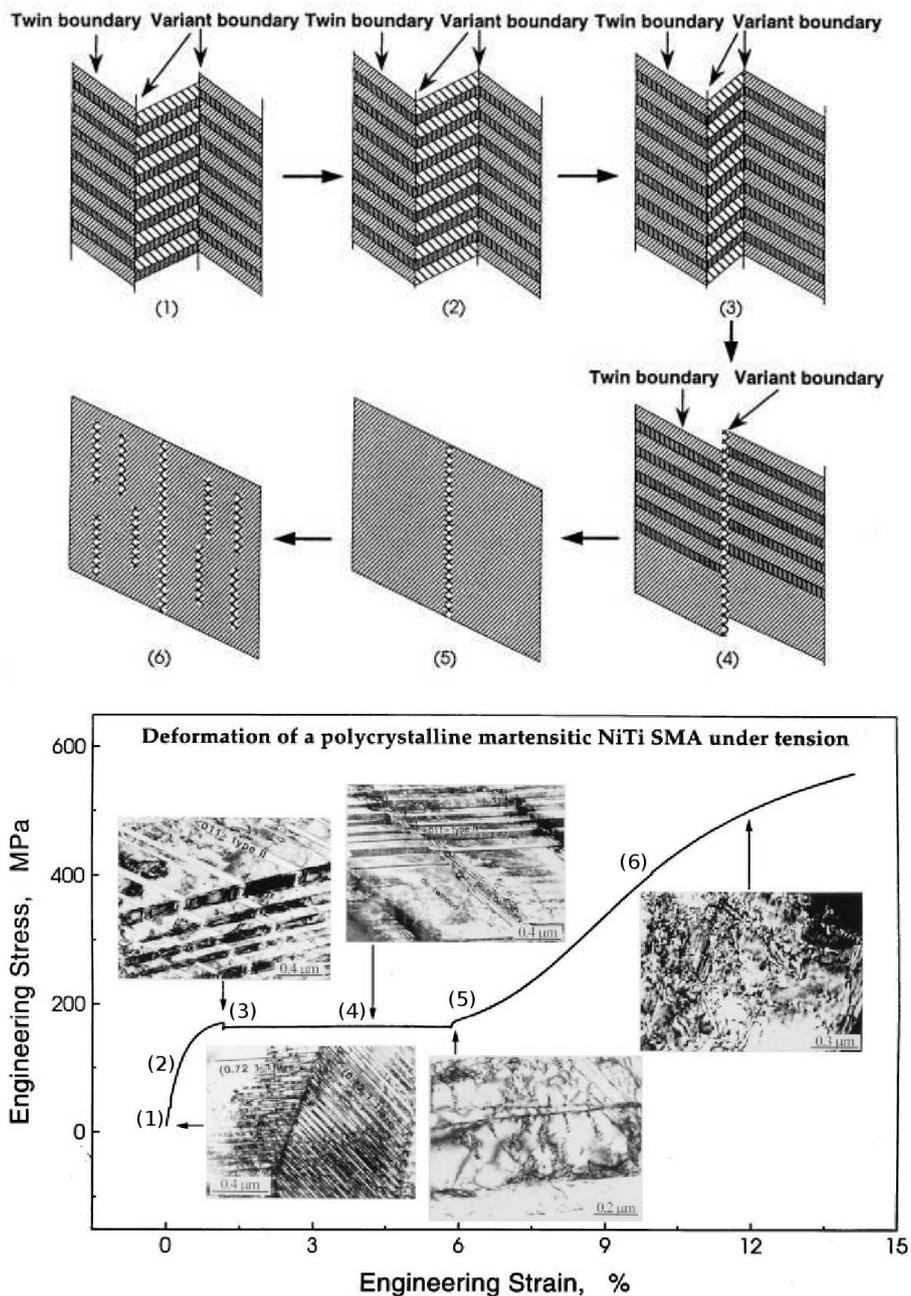
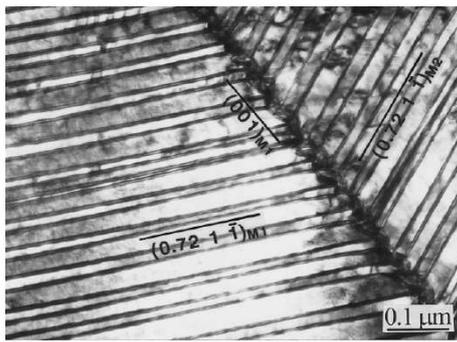
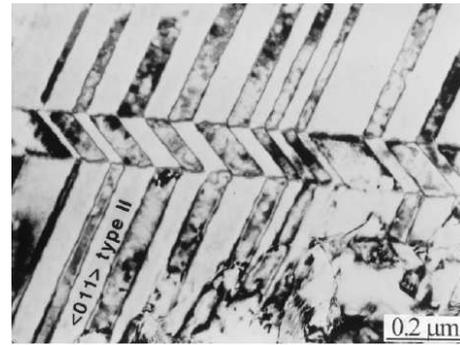


FIG. 1.14 – Évolution de la microstructure d'un Nickel-Titane soumis à un chargement mécanique : (1) État non déformé, (2) Accommodation inélastique des macles, (3) Réorientation de la martensite, (4) Réorientation des variantes de martensite et démaillage, (5) Démaillage, (6) Apparition de dislocations entraînant une déformation plastique [Liu et al. 1999].



(a) État auto-accommodé non déformé [Xie et al. 1998]



(b) État déformé à 2 % [Liu et al. 1999]

FIG. 1.15 – Formation d'interfaces cohérentes suite à un chargement sur de la martensite formée auto-accommodée.

1.4.2 Décalage des températures de transformation

Sur le plan de la description cristallographique, la martensite auto-accommodée et la martensite orientée sont totalement équivalentes et devraient donc présenter des températures de transformation de phase équivalentes. Cependant, certains auteurs comme [Popov et Lagoudas 2007, Liu et Favier 2000] ont pu remarquer, lors d'essais expérimentaux, une augmentation des températures de transformation inverse consécutivement à un chargement mécanique sur de la martensite, ayant eu pour effet de l'orienter. Deux explications à ce phénomène peuvent être trouvées dans la littérature :

1. [Piao et al. 1993] expliquent cette différence par une relaxation d'énergie élastique accumulée lors de la formation de variantes de martensite auto-accommodées. Ainsi, lorsqu'un chargement mécanique est appliqué afin d'orienter les variantes, les contraintes internes sont relâchées et l'énergie ainsi récupérée tend à faciliter la transformation inverse de la martensite en austénite et entraîne une hausse des températures de transformation inverse.
2. [Liu et Favier 2000] ont estimé que la quantité d'énergie élastique relâchée n'était pas suffisante pour expliquer le décalage de température observé et supposent l'existence d'un frottement interne lors de la transformation inverse à partir de martensite orientée.

1.5 MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DES AMF

Différentes équipes de recherche se sont attachées, au cours des trente dernières années, à proposer des modèles permettant de prédire le comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme. Les objectifs sont différents suivant les approches – compréhension des mécanismes physiques ou dimensionnement des structures adaptatives – et le panel des modèles existants est large. Ces derniers peuvent être classés en différentes catégories.

1.5.1 Modèles micromécaniques

Les modèles micromécaniques sont apparus durant les années 1990 [Patoor et al. 1995; 1996, Huang et Brinson 1998, Lu et Weng 1998, Gao et al. 2000, Huang et al. 2000, Siredey

et al. 1999, Entemeyer et al. 2000; 2001]. Ils sont basés sur une description de la transformation martensitique à l'échelle du réseau cristallin. De fait, ils sont régis par des équations permettant de prédire la transformation d'un cristal d'austénite en différentes variantes de martensite sous un chargement thermomécanique. Le comportement effectif du VER est obtenu par homogénéisation. Différentes techniques de transition d'échelle sont adoptées. On pourra citer en particulier la méthode auto-cohérente. Ces modèles ont permis notamment d'identifier l'origine de la dissymétrie traction-compression ou de déterminer les surfaces de charge de début et fin de transformation pour des cas de chargement multiaxiaux. Ils présentent un fort pouvoir prédictif et permettent de modéliser intrinsèquement la plupart des particularités de comportement observées dans les AMF.

Ces modèles font intervenir un jeu de variables internes représentant chacune la fraction volumique des différentes variantes de martensite pouvant être formées dans un cristal d'austénite (24 variantes sont possible pour un NiTi). Leur utilisation est toutefois limitée pour dimensionner des structures adaptatives *via* la méthode des éléments finis. En effet, leur description se faisant à l'échelle du monocristal, il est nécessaire, pour modéliser une structure, de connaître *a priori* sa texture (taille de grains, géométrie, orientation). Ainsi, pour décrire un *volume élémentaire représentatif* (VER) d'un AMF, un nombre de grains couramment admis est de 1000, nombre qu'il faut multiplier par le nombre de variantes pouvant être formées dans un grain. Le nombre total de variables permettant de décrire un VER est donc beaucoup trop important pour effectuer des calculs de structure avec un coût numérique raisonnable.

Les modèles micromécaniques sont donc à réserver à un usage d'étude des mécanismes de transformation de phase. Ils peuvent alimenter des modèles macroscopiques lorsque des essais expérimentaux ne sont pas possibles.

1.5.2 Modèles phénoménologiques

Les modèles phénoménologiques, pour décrire le comportement des AMF à l'échelle macroscopique, sont apparus au cours des années 80 [Tanaka 1986, Liang et Rogers 1990]. Les premiers modèles permettaient uniquement de modéliser le comportement superélastique dans le cas unidimensionnel. Les modèles se sont ensuite enrichis dans les années 90 avec la prise en compte de l'effet mémoire de forme basé sur la modélisation du pseudo-diagramme de phases [Brinson 1993, Raniecki et Lexcelent 1994] et des extensions au cas tridimensionnel [Liang et Rogers 1992, Boyd et Lagoudas 1994, Rio et al. 1995, Bo et Lagoudas 1999a]. Les années 2000 ont ensuite vu apparaître des modèles tridimensionnels implémentés dans des codes de calcul par éléments finis [Bouvet et al. 2004, Lagoudas et Entchev 2004, Peultier et al. 2006, Thiebaud et al. 2007, Zaki et Moumni 2007].

Les modèles existants diffèrent principalement par le type de variables internes employées pour décrire un VER d'AMF et par les spécificités de comportement prises en compte (dissymétrie traction-compression, boucles internes, cyclage, stabilisation de la martensite, couplage entre transformation de phase et plasticité). Il est possible de classer ces modèles macroscopiques suivant le type de variables internes retenues :

Les modèles de type Tanaka ou Lexcelent [Tanaka 1986, Raniecki et Lexcelent 1998] sont les premiers à avoir été développés pour la description des AMF. Dans ces derniers, le VER est décrit à l'aide d'une seule variable interne qui est la fraction volumique de martensite f . La déformation de transformation est alors considérée comme proportionnelle à la quantité de martensite et orientée dans la direction du déviateur des contraintes. La dissymétrie traction-compression est prise en compte par l'expression d'une *surface de transformation* selon une forme proposée par [Bouvet et al. 2004] définie dans l'espace des contraintes. Ce type de modèle n'est toutefois valable que dans

le cas de chargements proportionnels superélastiques. Des développements sont en cours pour étendre ce type de modèle à des chargements thermomécaniques plus complexes ¹.

Les modèles de type Brinson [Panico et Brinson 2007] différencient la fraction volumique de martensite en deux contributions : la martensite thermique f^T auto-accommodée et la martensite f^σ formée par la contrainte qui présente une déformation de transformation. Cette décomposition permet la description de l'effet mémoire. Le formalisme utilisé pour définir la direction d'orientation de la martensite permet de prendre en compte les chargements non proportionnels et multiaxiaux. Cependant, des comportements tels que la dissymétrie traction-compression ou les boucles internes ne sont pas pris en compte. Il est à noter qu'une variante de ce modèle permet de gérer la formation d'un volume de martensite stabilisée lors d'un cyclage [Panico et Brinson 2008].

Le modèle de Popov-Lagoudas [Popov et Lagoudas 2007] utilise le même type de description que le modèle de Brinson mais diffère par le fait que ce ne sont pas les fractions volumiques respectives qui sont utilisées comme variables internes, mais l'avancement des transformations entre les différentes structures cristallines possibles (austénite \leftrightarrow martensite auto-accommodée, austénite \leftrightarrow martensite orientée et martensite auto-accommodée \leftrightarrow martensite orientée). La cinétique de transformation de phase ainsi que le processus de réorientation permettent de rendre compte de façon précise de l'histoire du chargement. Cependant, la dissymétrie traction-compression ainsi que le phénomène de boucles internes ne sont pas pris en compte. Ils ont toutefois déjà été abordés au sein d'autres modèles développés par cette équipe [Bo et Lagoudas 1999b, Qidwai et Lagoudas 2000].

Les modèles de type Peultier [Peultier et al. 2008] décrivent le VER d'un alliage à mémoire de forme grâce à une décomposition multiplicative de la déformation de transformation en une variable scalaire f décrivant la fraction volumique de martensite et une variable tensorielle $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ qui représente la déformation de transformation moyenne observée au sein du volume de martensite. La dissymétrie traction-compression est prise en compte *via* une valeur de saturation de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ et les boucles internes sont modélisées à l'aide d'un « écouissage cinématique » et « isotrope » portant sur l'évolution de la fraction volumique de martensite. Enfin, l'expression d'une surface de charge en réorientation portant sur la variable tensorielle $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ permet la prise en compte des chargement multiaxiaux et non proportionnels. Cependant, la décomposition multiplicative de la déformation de transformation pose des problèmes de résolution au voisinage des températures de transformation pour de faibles contraintes où des bifurcations entre différents comportements sont observées. Enfin, ce modèle ayant été développé sans distinction du type d'alliage utilisé, les phénomènes constatés dans les NiTi tels que l'accommodation inélastique des macles ou la stabilisation de la martensite ne sont pas pris en compte.

Les modèles phénoménologiques, de par leur formulation à l'aide de variables internes définies de façon macroscopique, se montrent particulièrement adaptés à une implémentation dans des codes de calcul par éléments finis où le nombre plus réduit d'équations à résoudre assure des temps de calcul raisonnables. Cependant, leur richesse de description est moindre que celle des modèles microscopiques. De ce fait, des formulations particulières doivent être introduites afin de prendre en compte les particularités de comportement telles que la dissymétrie traction-compression ou le phénomène de boucles internes.

¹Thèse en cours, E. Gibeau, FEMTO Besançon, 2009

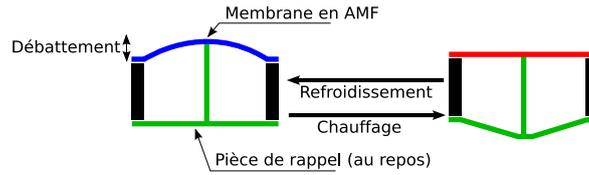


FIG. 1.16 – Principe de fonctionnement d'une micropompe dont le débattement est assuré par une membrane en AMF et un élément de rappel.

1.6 PARTICULARITÉS LIÉES AUX APPLICATIONS DE PETITE TAILLE

Dans le cadre du dimensionnement d'applications de taille fortement réduite de type micro-actionneur, certaines particularités de comportement peuvent apparaître et nécessitent une prise en compte dans le but d'une modélisation de leur comportement. On peut notamment citer les effets de taille et de localisation. Le présent travail ayant pour objectif la mise en place d'un outil de dimensionnement de micropompes mettant en œuvre des films minces d'AMF (voir figure 1.16), c'est essentiellement sur ces derniers que nous nous focaliserons.

1.6.1 Effets de taille

Les effets de taille peuvent être vus à différents niveaux. On peut ainsi distinguer la taille de la structure considérée ou encore la taille caractéristique de la microstructure du matériau qui la compose (typiquement la taille de grains). Différentes campagnes d'essais expérimentaux ont été menées afin de caractériser cet effet de taille.

Frick *et al.* [Frick et al. 2007] ont notamment étudié la perte de superélasticité dans des micropiliers de NiTi. Ces derniers sont taillés à partir de monocristaux par FIB² et présentent des diamètres allant de 2 μm à 400 nm. Ils ont été testés en compression par un nanoindenteur en superélasticité. Les différents essais ont fait ressortir que la déformation, pouvant être récupérée par superélasticité, diminue avec le diamètre des piliers (voir fig. 1.17) pour totalement disparaître pour les tailles les plus faibles. En revanche, il a été observé que la contrainte à partir de laquelle la transformation de phase a lieu reste la même quelle que soit la taille de l'échantillon testé. Enfin, les piliers étant monocristallins, une forte dépendance de leur comportement par rapport à leur orientation cristalline et à la direction du chargement a été observée. Ainsi, les sollicitations suivant l'orientation [210] mettent en évidence un comportement plus mauvais (contrainte de transformation et déformation réversible faibles) que selon la direction [111].

Fu *et al.* [Fu et al. 2006] ont réalisé des essais sur des films de $\text{Ni}_{50.2}\text{Ti}_{49.8}$ martensitiques à température ambiante déposés par pulvérisation sur des substrats de silicium. Par chauffage et refroidissement, une variation de cambrure des films minces est observée à cause des coefficients de dilatation différents du dépôt et du substrat. La contrainte, calculée à partir de la courbure du substrat est alors relevée en fonction de la température pour différentes épaisseurs de dépôt allant de 48 à 4110 nm (voir fig. 1.18a). Il apparaît que la courbe contrainte-température est linéaire pour les films le plus minces puis présente une hystérésis qui augmente avec l'épaisseur du film, caractéristique d'un effet mémoire de forme double sens assisté. Les auteurs ont ainsi étudié la valeur de la contrainte résiduelle (après dépôt du film) et de la contrainte d'actionnement en fonction de l'épaisseur du film considéré (voir fig. 1.18b). Il en ressort les points suivants :

²Focused Ion Beam

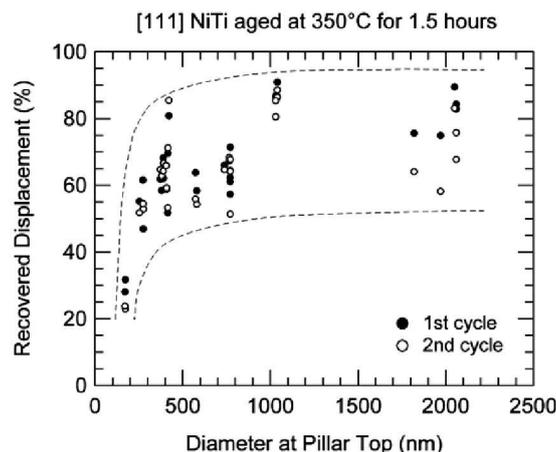


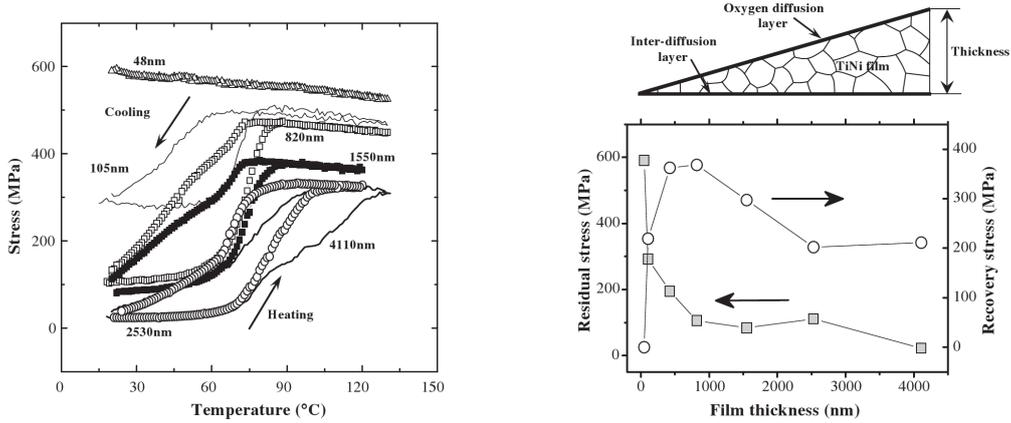
FIG. 1.17 – Perte de superélasticité dans des micropilliers de NiTi en fonction de leur diamètre [Frick et al. 2007].

- Pour l'épaisseur la plus faible (48 nm), l'effet mémoire de forme est totalement absent. Ceci est dû à une couche d'oxyde présentant une épaisseur d'environ 15 nm. Cette dernière, qui se forme en surface (la teneur en oxygène est élevée en surface, voir fig. 1.19), modifie la stoechiométrie de l'alliage, faisant ainsi disparaître son caractère mémoire de forme ;
- Les films d'épaisseur plus importante (de l'ordre de 100 nm) présentent également une couche d'oxyde qui n'empêche cette fois que la formation de la phase R. La transformation martensitique est ainsi conservée ;
- Au delà d'une épaisseur de 500 nm, l'effet de l'oxydation est insignifiant ;
- Au delà de 800 nm d'épaisseur, l'effet mémoire de forme diminue à cause des interactions intergranulaires (plusieurs grains sont présents dans l'épaisseur du film).

[Sun et He 2008] ont proposé un modèle multi-échelles afin de représenter l'influence des différentes tailles caractéristiques sur la réponse superélastique d'un AMF. Ils ont pu mettre en évidence que la réponse du matériau et plus particulièrement la taille de l'hystérésis en contrainte, peut être caractérisée par deux rapports sans dimension N et \bar{l} qui sont respectivement le rapport de la taille de l'échantillon considéré sur la taille de grain et le rapport de la taille de grain sur une dimension caractéristique de la microstructure. Ainsi, pour une taille d'échantillon donnée, l'hystérésis est rapidement réduite pour des valeurs très faibles ou très importantes de la taille de grain (voir fig. 1.20). Les prédictions proposées par ce modèle sont qualitativement en accord avec les essais effectués sur des matériaux nanocristallins par [Kim et al. 2006] et [Tsuchiya et al. 2006]. La particularité de cette modélisation est la prise en compte des grains et de leurs interfaces dans le processus de transformation de phase martensitique. Le comportement du matériau est représenté localement par une loi instable dans laquelle, un adoucissement est constaté lorsque la transformation de phase martensitique a lieu, et un front de transformation passant de grain à grain est pris en compte pour la diffusion de la transformation de phase au sein de la structure (voir fig. 1.21). C'est le rapport entre la largeur du front de transformation et la taille des grains et de leurs interfaces qui permet de mettre en évidence les effets de taille.

1.6.2 Effets de localisation

Une particularité observée dans les films minces d'AMF mais également dans les films ou les échantillons fins est la localisation de la transformation de phase au cours d'un charge-



(a) Courbe contrainte-température pour différentes épaisseurs de film.

(b) Évolution de la contrainte d'actionnement et de la contrainte résiduelle en fonction de l'épaisseur du film.

FIG. 1.18 – Mise en évidence de l'effet mémoire double sens assisté sur des films minces de NiTi en fonction de leur épaisseur [Fu et al. 2006].

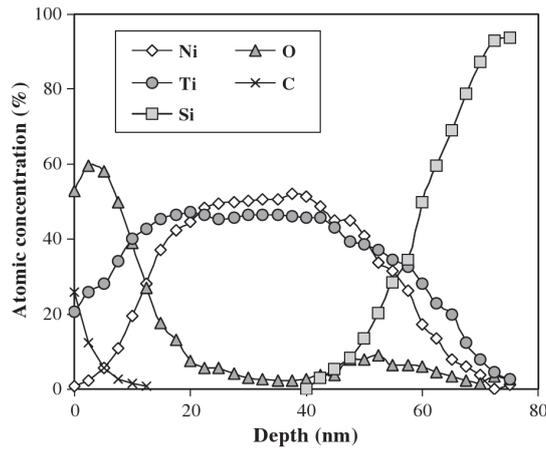


FIG. 1.19 – Composition atomique d'un film de NiTi d'épaisseur 48 nm déposé sur un substrat de silicium en fonction de son épaisseur [Fu et al. 2006]. La forte teneur en oxygène en surface est due à une oxydation.

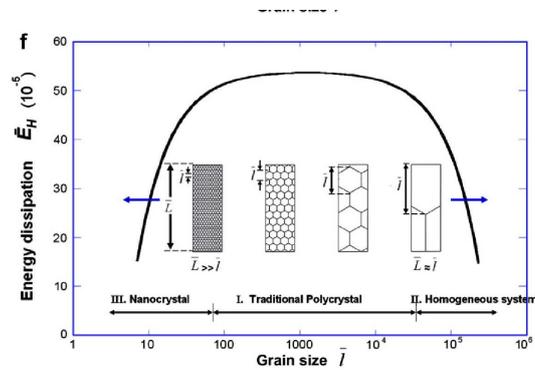


FIG. 1.20 – Évolution de la taille d'hystérésis en contrainte pour un chargement superélastique en fonction de la taille de grain pour un échantillon de taille donnée [Sun et He 2008].

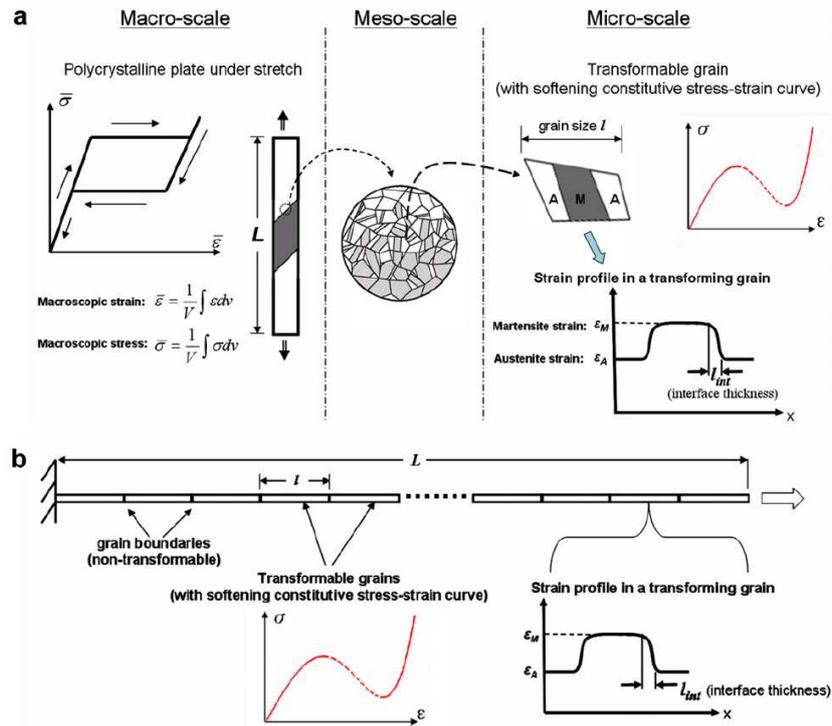


FIG. 1.21 – Modélisation d'un polycristal d'AMF à différentes échelles [Sun et He 2008].

ment en superélasticité. En effet, lorsqu'un échantillon est soumis à un effort de traction, la transformation de phase va d'abord se produire au niveau du grain dont la structure cristalline est la mieux orientée par rapport à la direction du chargement. Une variante préférentielle de martensite est formée, de façon similaire à une loi de Schmid pour les phénomènes de plasticité. Une *bande de transformation* est alors observée, entraînant un adoucissement local. Cette bande va ensuite se propager le long de l'échantillon sous une force de traction quasi constante (voir fig. 1.22). De plus, suivant la vitesse de traction appliquée, plusieurs bandes de transformation peuvent apparaître (voir fig. 1.23 et 1.24). Ceci est dû au fait que la transformation de phase martensitique est exothermique et entraîne donc un échauffement au niveau des bandes de transformation. Cet échauffement favorise la phase chaude (i.e. l'austénite) et empêche donc la propagation de la bande de transformation si le chargement se fait à une vitesse telle que la dissipation thermique n'a pas le temps d'évacuer la chaleur produite. La transformation de phase est donc déplacée à un endroit plus favorable et induit l'apparition d'une autre bande de transformation.

1.6.3 Gestion des effets de localisation dans les modèles de plasticité

Problème de la perte d'ellipticité

Les phénomènes de localisation observés dans les alliages à mémoire de forme peuvent s'apparenter aux phénomènes de localisation de l'adoucissement dans des matériaux élastoplastiques [Jirásek et Bažant 2002]. Un exemple simple est donné sur la figure 1.25. Il s'agit d'une barre de section A et de longueur L soumise à une traction uniaxiale. Si le matériau composant la barre est de type élastoplastique avec un adoucissement isotrope, sa surface de charge s'écrit :

$$f(\sigma, \kappa) = |\sigma| - h(\kappa) = 0 \quad (1.1)$$

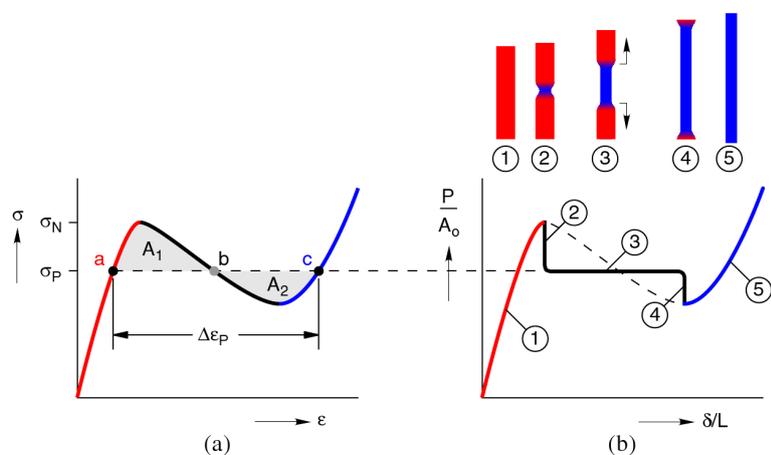


FIG. 1.22 – Schématisation des réponses (a) locale contrainte-déformation et (b) globale force-allongement et la configuration de l'échantillon avant, pendant et après la transformation de phase austénite vers martensite [Churchill et al. 2009].

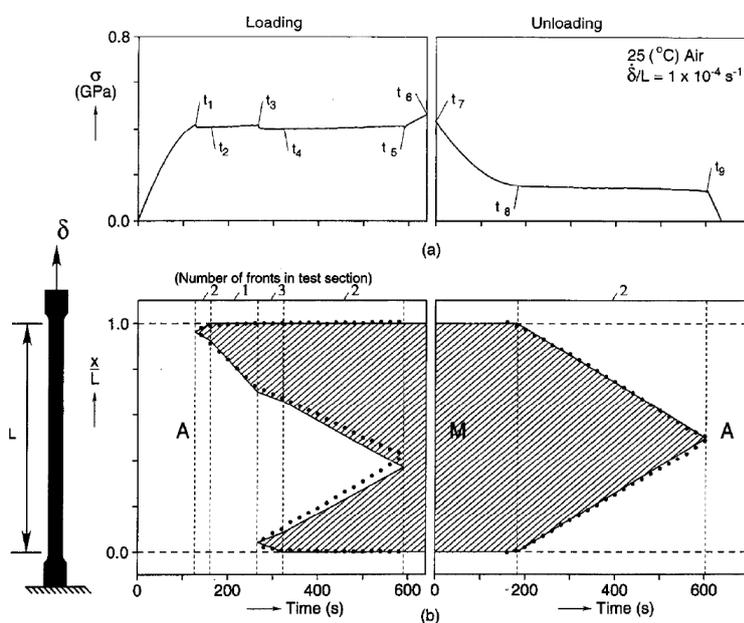


FIG. 1.23 – Essai de traction à une vitesse $\dot{\delta}/L = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. (a) Évolution de la contrainte, (b) diagramme de localisation de la déformation [Shaw et Kyriakides 1997].

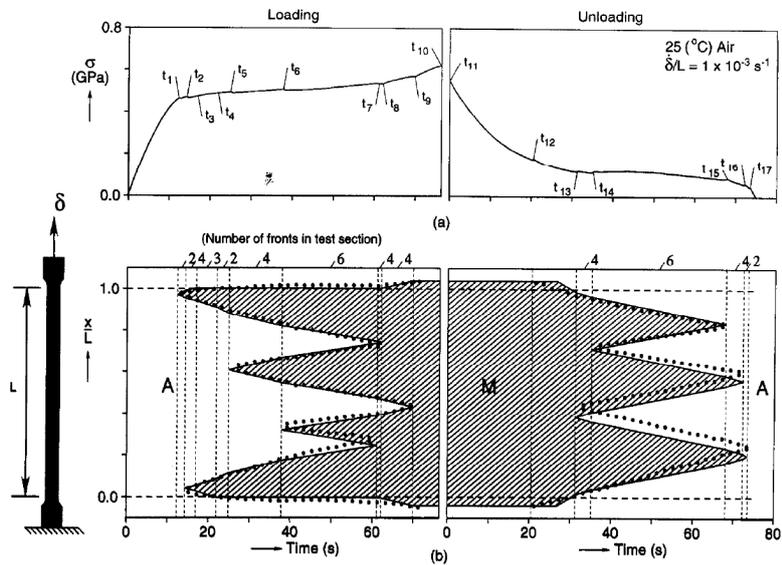


FIG. 1.24 – Essai de traction à une vitesse $\dot{\delta}/L = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. (a) Évolution de la contrainte, (b) diagramme de localisation de la déformation [Shaw et Kyriakides 1997].

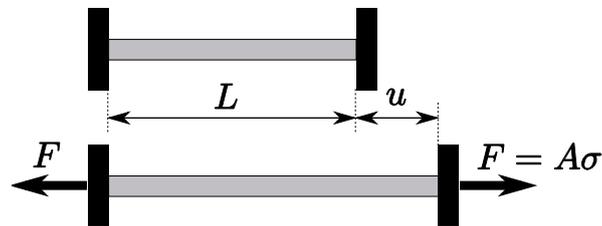


FIG. 1.25 – Barre soumise à une traction uniaxiale

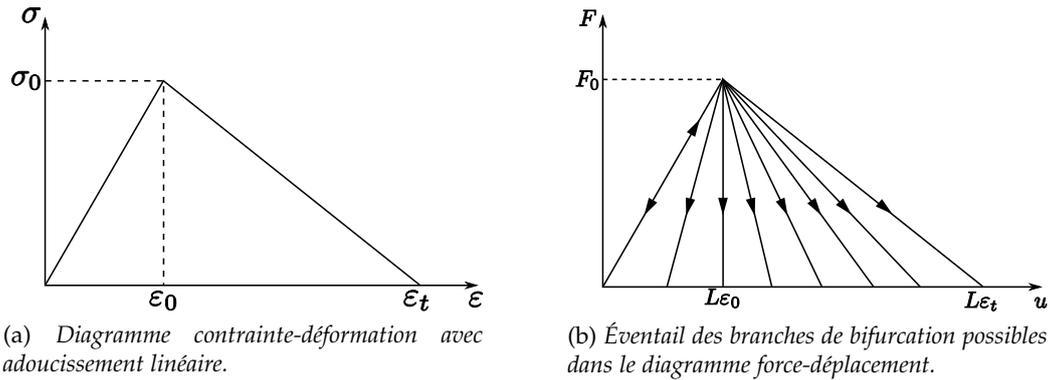


FIG. 1.26 – Comportement d'une barre en traction avec adoucissement.

où κ est la plasticité cumulée et $h(\kappa)$ une fonction décrivant l'évolution de la contrainte d'écoulement. Dans le cas d'une traction monotone ($\kappa = \varepsilon^p$) et d'un adoucissement linéaire, la courbe contrainte-déformation est donnée par la figure 1.26a. La plasticité commence à une déformation $\varepsilon_0 = \sigma_0/E$ où σ_0 est la contrainte d'écoulement initiale et E le module d'Young. La contrainte d'écoulement décroît ensuite linéairement jusqu'à atteindre une valeur nulle lorsque $\varepsilon = \varepsilon_t$. Pour des déformations plus importantes, la contrainte d'écoulement reste nulle ce qui signifie que le matériau a perdu toute sa cohésion. Ainsi, la loi d'adoucissement s'écrit :

$$h(\kappa) = \langle \sigma_0 + H\kappa \rangle \quad (1.2)$$

où $\langle \dots \rangle$ est un opérateur ne retenant que la valeur positive et $H = -\sigma_0/\varepsilon_t$ est le module plastique (négatif).

Si la barre est chargée en traction par un déplacement u à une de ses extrémités, la réponse reste élastique jusqu'à $u = L\varepsilon_0$. À ce niveau, la force F transmise par la barre atteint sa valeur maximale $F_0 = A\sigma_0$ pour ensuite diminuer. Cependant, la contrainte peut diminuer suivant que la déformation augmente (adoucissement) ou diminue (retour élastique). L'équation d'équilibre n'impliquant qu'une distribution uniforme de la contrainte le long de la barre, une force donnée entre zéro et F_0 peut être obtenue par une infinité de valeurs de déplacement u compris dans l'éventail $[0, L\varepsilon_t]$ (voir fig. 1.26b). Le problème a alors une infinité de solutions.

Cette ambiguïté peut être levée en prenant en compte dans la modélisation les imperfections de la structure. En effet, les propriétés matériau ou la section de la barre ne sont pas parfaitement uniformes. Si par exemple la contrainte d'écoulement initiale est localement plus faible sur une portion de la barre, l'adoucissement va commencer dans cette zone et faire décroître la contrainte. Ainsi, le matériau en dehors de la zone affaiblie va se relaxer de façon élastique puisqu'il n'a pas franchi sa limite d'écoulement. Une telle zone peut être arbitrairement petite et la branche de bifurcation est alors très proche de la branche purement élastique du diagramme force-déplacement (fig. 1.26b).

D'un point de vue mathématique, ce type de formulation conduit à une *perte d'ellipticité* qui présente les caractéristiques suivantes :

- L'adoucissement a lieu dans une zone infiniment petite ;
- Le diagramme force-déplacement présente un phénomène de claquage, et ce indépendamment de la taille de la structure ou de la ductilité du matériau ;
- L'énergie dissipée lors de la rupture est nulle.

D'un point de vue numérique, ce type de problème mal posé va conduire à une solution qui dépend de la taille des éléments finis utilisés. Par exemple, on considère que la barre

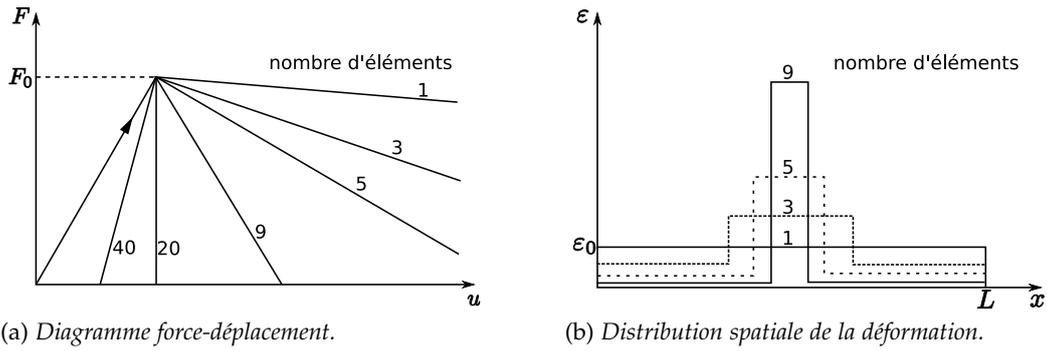


FIG. 1.27 – Effet du maillage sur les résultats numériques [Jirásek et Bažant 2002].

est discrétisée en N_e éléments à deux nœuds avec une interpolation linéaire des déplacements et par conséquent une interpolation constante de la déformation. La zone affaiblie est supposée être située au centre de la barre. La localisation aura alors lieu en un seul élément et la taille de la zone présentant un adoucissement sera $L_a = L/N_e$. La branche de bifurcation suivie va alors fortement dépendre du nombre d'éléments. La branche élastique est atteinte lorsque le nombre d'éléments tend vers l'infini (fig. 1.27a). Les distributions de déformation le long de la barre sont données dans la figure 1.27b. On notera que celles-ci tendent vers une distribution de Dirac lorsque le nombre d'éléments tend vers l'infini.

Formulation non locale

Le concept de l'approche non locale est une méthode efficace pour traiter le problème de la localisation. Cette approche est d'abord apparue en élasticité puis pour décrire les phénomènes d'érouissage en plasticité pour enfin être utilisée dans le but de modéliser les matériaux à adoucissement [Pijaudier-Cabot et Bažant 1987, Peerlings et al. 1998]. De façon générale, les modèles à approche non locale remplacent une ou plusieurs variables d'état du modèle par leur équivalent non local obtenu par une moyenne pondérée au voisinage du point considéré. Si f est un champ « local » au sein d'un domaine V , alors le champ non local correspondant est donné par :

$$\bar{f}(x) = \int_V \alpha(x, \xi) f(\xi) d\xi \quad (1.3)$$

où $\alpha(x, \xi)$ est une *fonction de pondération non locale* donnée. Elle est souvent prise égale à une distribution de Gauss :

$$\alpha_0(r) = \exp\left(-\frac{n_{dim} r^2}{2\ell^2}\right) \quad (1.4)$$

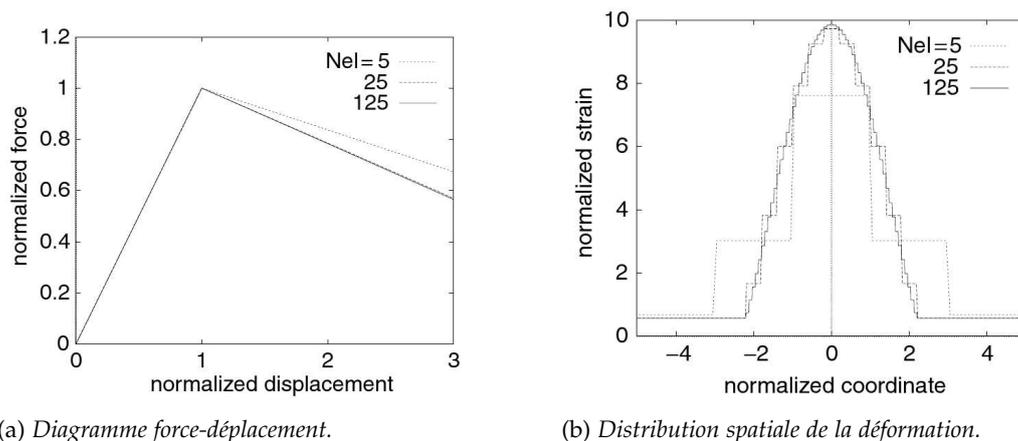
où $r = ||x - \xi||$, ℓ est appelée *longueur interne* du milieu non local et n_{dim} traduit la dimension du problème (1, 2 ou 3). Un autre choix possible est une fonction en forme de cloche :

$$\alpha_0(r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^2 & \text{si } 0 \leq r \leq R \\ 0 & \text{si } R \leq r \end{cases} \quad (1.5)$$

où R est un paramètre proportionnel à la longueur interne.

Un modèle simple pour l'adoucissement isotrope est obtenu si la contrainte d'écoulement est calculée à partir de la moyenne non locale de la variable κ représentant la plasticité cumulée. L'expression de la surface de charge (1.1) peut alors être remplacée par :

$$f(\sigma, \bar{\kappa}) = |\sigma| - h(\bar{\kappa}) = 0 \quad (1.6)$$



(a) Diagramme force-déplacement.

(b) Distribution spatiale de la déformation.

FIG. 1.28 – Convergence de la solution pour un modèle à approche non locales. N_{el} représente le nombre d'éléments [Jirásek et Bažant 2002].

La loi d'évolution de la variable κ ainsi que la loi d'écoulement sont inchangées. Jirásek et Bažant [Jirásek et Bažant 2002] ont montré qu'un tel modèle implémenté en éléments finis permet d'assurer la convergence de la solution quelle que soit la finesse du maillage utilisé (voir fig. 1.28).

CONCLUSION DU CHAPITRE

Les différents comportements observables au sein des alliages à mémoire de forme et plus particulièrement ceux à base Nickel-Titane ont été présentés dans ce chapitre, ainsi que leur origine à l'échelle de la microstructure. Les différentes applications existantes et les particularités de comportement liées aux alliages NiTi ont mis en évidence un besoin grandissant pour des modèles implémentés dans des codes de calcul par éléments finis afin de dimensionner des structures adaptatives. Si des modèles existent, ils ne sont pas encore capables de prédire la totalité des comportements des alliages à mémoire de forme (super-élasticité, effet mémoire, dissymétrie traction-compression, boucles internes) et des NiTi en particulier (présence de macles, effet de la pré-déformation de la martensite).

L'objectif du chapitre suivant est de combler ces manques en proposant un modèle basé sur l'approche initiée par [Peultier et al. 2006] et prenant en compte les spécificités des NiTi. Ce modèle est implémenté numériquement dans un code de calcul par éléments finis et validé par comparaison avec des essais expérimentaux. Il a servi de base de développement à la prise en compte des effets de localisation par une description non locale.

MODÉLISATION DU COMPORTEMENT MACROSCOPIQUE DES AMF À BASE NiTi

2

SOMMAIRE

2.1	MÉCANISMES DE DÉFORMATION	31
2.2	ÉCRITURE D'UN POTENTIEL THERMODYNAMIQUE	31
2.3	CHOIX DES VARIABLES INTERNES	33
2.3.1	Déformation de transformation E^T	34
2.3.2	Déformation d'accommodation des macles	35
2.3.3	Variables internes retenues	36
2.4	DÉFINITION DU POTENTIEL THERMODYNAMIQUE	36
2.5	FORCES MOTRICES THERMODYNAMIQUES	39
2.6	EXPRESSION DE LA DISSIPATION	41
2.7	PRISE EN COMPTE DES CHARGEMENTS PARTIELS	43
2.8	MODÉLISATION DES LIMITATIONS PHYSIQUES	44
2.9	CONDITIONS D'ACTIVATION ET LOIS D'ÉVOLUTION	49
2.9.1	Transformation de phase	49
2.9.2	Orientation des variantes	49
2.9.3	Accommodation inélastique des macles	50
2.10	RÉCAPITULATIF DES DIFFÉRENTS CAS D'ACTIVATION	51
	CONCLUSION	51

Les spécificités liées à l'utilisation d'alliages à mémoire de forme à base de Nickel-Titane induisent une variété importante de comportements, qui doivent être pris en compte dans le cadre d'un modèle de comportement macroscopique, destiné à être implémenté dans un code de calcul par éléments finis.

L'approche présentée ici puise ses fondements dans les travaux effectués par [Peultier et al. 2006; 2008]. C'est le résultat d'une collaboration entre le LEMTA et le LPMM (thèse de Yves Chemisky [Chemisky 2009]). Les principales différences par rapport au modèle proposé par Peultier concernent l'ajout d'une troisième variable interne afin de gérer le mécanisme d'accommodation inélastique des macles et la reformulation de l'énergie d'interaction, permettant une meilleure description du comportement à basse contrainte et au voisinage des températures de transformation.

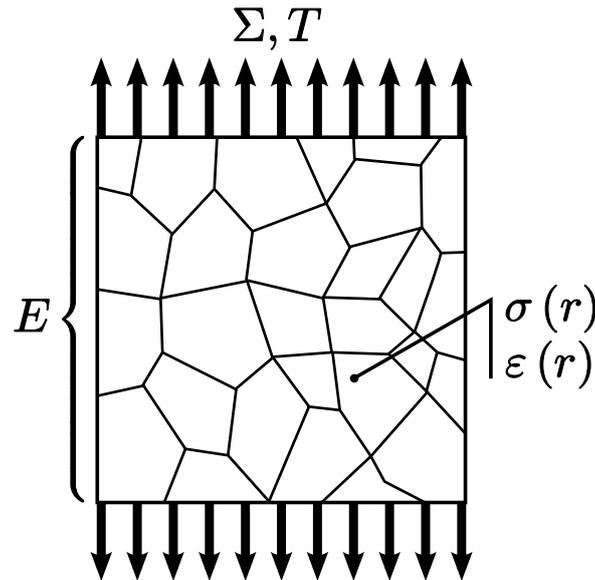


FIG. 2.1 – Volume élémentaire représentatif d'un polycristal d'AMF.

2.1 MÉCANISMES DE DÉFORMATION

Dans la section 1.4, nous avons listé les différents mécanismes existants au sein des alliages de Nickel Titane et pouvant induire une déformation à l'échelle macroscopique. Afin d'établir un modèle de comportement, on postule que la déformation macroscopique du VER (fig. 2.1) est la somme de plusieurs contributions :

$$E = E^{el} + E^{th} + E^T + E^{tw} \quad (2.1)$$

où :

- E^{th} est la déformation induite par dilatation thermique. En faisant l'hypothèse d'une dilatation isotrope identique dans les deux phases en présence, elle s'écrit $E_{ij}^{th} = \alpha \delta_{ij} \Delta T$ où α est le coefficient de dilatation thermique et ΔT , l'écart entre les températures actuelle et de référence au niveau du VER ;
- E^T est la déformation due à l'orientation des variantes de martensite. Elle est induite d'une part par la formation de martensite à l'issue d'un chargement thermomécanique et d'autre part par l'orientation des variantes de martensite sous l'action d'un chargement mécanique. Cette déformation étant liée à deux phénomènes physiques distincts que sont la transformation de phase martensitique et l'orientation des variantes de martensite, une même valeur de E^T peut correspondre à des états différents du VER (voir fig. 2.2) ;
- E^{tw} est la déformation due à l'accommodation inélastique des macles. [Liu et al. 1999] ont montré que les macles se forment dans la martensite auto-accommodée et que les défauts d'empilement sont accommodés suite à l'application d'un chargement mécanique.

2.2 ÉCRITURE D'UN POTENTIEL THERMODYNAMIQUE

Le comportement des AMF est particulièrement lié au niveau de contrainte (orientation des variantes, accommodation des macles) et à la température (transformation de phase), il est

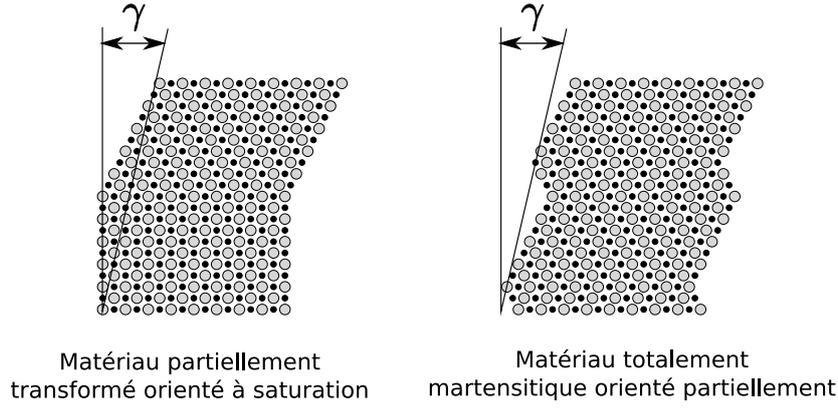


FIG. 2.2 – Origines d'une déformation de transformation.

donc naturel de choisir Σ et T comme variables de contrôle du VER. Ce choix implique l'utilisation de l'enthalpie libre volumique¹ de Gibbs G comme potentiel thermodynamique. On notera que l'utilisation de l'enthalpie libre de Helmholtz est également possible et paraît plus pratique en prévision d'une implémentation en éléments finis dans le sens où les variables de contrôle du VER sont alors la déformation totale et la température, qui correspondent aux variables de contrôle utilisées dans le cadre d'une résolution par la méthode des éléments finis. C'est notamment le cas des problèmes de type *coupled temperature-displacement* pouvant être résolu par le code de calcul `ABAQUS`. Le choix ici a été fait de conserver les variables naturelles du VER afin de représenter plus finement son comportement. L'écriture d'une relation d'élasticité permet ensuite de passer aux variables de contrôle E et T . Les deux choix de potentiel aboutissent aux mêmes équations constitutives, celui basé sur l'enthalpie libre de Helmholtz entraîne cependant des lourdeurs d'écriture.

L'état initial choisi est celui d'un matériau entièrement austénitique à une température T^{init} . De ce fait, l'enthalpie libre de Gibbs de l'austénite s'écrit :

$$G^{init} = U^A - T^{init} S^A - \Sigma_{ij}^{init} E_{ij}^{init} - C_v^A \left[(T^{init} - T_{ref}) - T^{init} \log \frac{T^{init}}{T_{ref}} \right] \quad (2.2)$$

où U^A est l'énergie interne volumique de l'austénite, S^A , son entropie, C_v^A , la chaleur à volume constant de l'austénite et T_{ref} , la température de référence de la quantité de chaleur produite. À l'état initial, on considère que :

$$\begin{aligned} - T^{init} &= T_{ref} \\ - \Sigma_{ij}^{init} E_{ij}^{init} &= 0 \end{aligned}$$

Ce qui correspond à des valeurs de chaleur et de travail mécanique initialement nulles. L'enthalpie libre de Gibbs pour l'état initial austénitique s'écrit alors :

$$G^{init} = U^A - T^{init} S^A \quad (2.3)$$

Lorsque des variantes de martensite apparaissent suite à un chargement thermomécanique (représenté par la température T et la contrainte Σ_{ij}), la partie de l'énergie interne due à l'austénite conserve la même formulation. Par contre, elle est pondérée par le volume occupé par l'austénite, $\left(1 - \frac{V_M}{V}\right)$ où V_M est le volume de martensite présente dans le VER considéré de volume V , ainsi que par la production de chaleur induite par le changement

¹par la suite, toutes les quantités considérées seront définies de façon volumique.

de température.

$$G^A = \left(1 - \frac{V_M}{V}\right) \left(U^A - TS^A - C_v^A \left[(T - T_{ref}) - T \log \frac{T}{T_{ref}} \right] \right) \quad (2.4)$$

La contribution du volume de martensite s'écrit :

$$G^M = \left(\frac{V_M}{V}\right) \left(U^M - TS^M - C_v^M \left[(T - T_{ref}) - T \log \frac{T}{T_{ref}} \right] \right) \quad (2.5)$$

où U^M et S^M sont respectivement l'énergie interne et l'entropie volumiques de la martensite, C_v^M est sa chaleur volumique. Enfin, le chargement mécanique extérieur apporte aussi une contribution à l'enthalpie libre de Gibbs totale :

$$G^{ext} = -\Sigma_{ij} E_{ij} \quad (2.6)$$

L'enthalpie libre de Gibbs totale est la somme de toutes les contributions. Si nous avons cité ici les contributions intrinsèques au chargement et à la nature du matériau, il reste à prendre en compte l'énergie nécessaire pour vaincre les incompatibilités de déformation au sein du VER. Celles-ci sont induites par les incompatibilités entre différentes variantes, aux interfaces entre les variantes (macles) et entre les grains présentant des orientations différentes. Cette contribution à l'enthalpie libre de Gibbs est notée G^{int} et sera détaillée plus tard. On peut alors écrire l'enthalpie libre de Gibbs totale du VER :

$$G^{biphase} = \left(1 - \frac{V_M}{V}\right) \left(U^A - TS^A\right) + \frac{V_M}{V} \left(U^M - TS^M\right) - \Sigma_{ij} E_{ij} + G^{int} - C_v \left[(T - T_{ref}) - T \log \frac{T}{T_{ref}} \right] \quad (2.7)$$

Le potentiel thermodynamique choisi pour décrire un VER d'AMF est la différence d'enthalpie libre de Gibbs entre l'état initial austénitique et l'état biphasé.

$$\Delta G = G^{biphase} - G^{init} \quad (2.8)$$

Cette différence s'écrit en faisant intervenir ΔU et ΔS , respectivement les variations d'énergie libre et d'entropie volumiques entre la phase austénitique et la phase martensitique ($\Delta U = U^M - U^A$ et $\Delta S = S^M - S^A$), ainsi que le changement de température $\Delta T = T - T^{init}$. La chaleur spécifique est supposée égale au sein des deux phases et notée C_v :

$$\Delta G = -\Delta TS^A + \frac{V_M}{V} (\Delta U - T\Delta S) - \Sigma_{ij} E_{ij} + G^{int} - C_v \left(\Delta T - T \log \frac{T}{T_{ref}} \right) \quad (2.9)$$

Ce potentiel est ensuite utilisé dans l'inégalité de Clausius-Duhem pour satisfaire le second principe de la thermodynamique :

$$-\dot{G} - S \cdot \dot{T} - \dot{\Sigma} : E - \vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\text{grad}} T}{T} \geq 0 \quad (2.10)$$

En remplaçant dans cette équation \dot{G} par son expression en fonction des variables de contrôle (Σ, T) et de variables internes macroscopiques, il sera possible d'obtenir la loi de comportement.

2.3 CHOIX DES VARIABLES INTERNES

On part du postulat que $G = G(\Sigma, T, V_k)$. La dérivée temporelle de G est alors donnée par :

$$\dot{G} = \frac{\partial G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} + \frac{\partial G}{\partial T} \cdot \dot{T} + \frac{\partial G}{\partial V_k} \cdot \dot{V}_k \quad (2.11)$$

où V_k représente la k^e composante du vecteur des variables internes (une sommation sur les k est effectuée dans (2.11)). Cette expression est ensuite insérée dans l'inégalité de Clausius-Duhem (2.10) :

$$-\frac{\partial G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} - \frac{\partial G}{\partial T} \cdot \dot{T} - \frac{\partial G}{\partial V_k} \cdot \dot{V}_k - S \cdot \dot{T} - \dot{\Sigma} : E - \vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\text{grad}} T}{T} \geq 0 \quad (2.12)$$

Le choix des variables internes utilisées dans la définition du potentiel thermodynamique du VER doit se faire en accord avec les objectifs du modèle :

- Être définies à l'échelle macroscopique pour un volume élémentaire représentatif afin de pouvoir utiliser le modèle dans un code de calcul par éléments finis ;
- La définition du VER doit être suffisamment riche pour permettre la description des différents comportements observés dans les AMF, fortement dépendants de l'état de la microstructure ;
- Être tensorielle pour permettre le suivi de chargements non proportionnels ;
- Être de nombre réduit afin d'alléger la résolution numérique des équations constitutives ;
- Être reliées à un mécanisme physique afin de faciliter l'identification des paramètres de leurs lois d'évolution à partir d'essais expérimentaux.

Le choix de variables dans le présent modèle est en accord avec la décomposition additive des déformations (2.1). Si les déformations élastique et thermique, E^{el} et E^{th} , peuvent être explicitées à partir des variables de contrôle du VER, Σ et T , l'introduction de variables internes est nécessaire pour définir les déformations de transformation E^T et d'accommodation des macles E^{tw} . La nature de ces déformations au sein du VER est discutée ci-après.

2.3.1 Déformation de transformation E^T

La déformation de transformation macroscopique E^T au sein d'un VER de volume V s'exprime comme la moyenne des déformations de transformation locales en tout point $\varepsilon^T(r)$:

$$E_{ij}^T = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^T(r) dV \quad (2.13)$$

La déformation de transformation ayant pour origine l'orientation des variantes de martensite, elle est nulle dans le volume occupé par la phase austénitique $V - V_M$. De ce fait, la déformation macroscopique de transformation peut s'exprimer sous la forme d'une intégrale sur le volume de martensite, V_M :

$$E_{ij}^T = \frac{V_M}{V} \frac{1}{V_M} \int_{V_M} \varepsilon_{ij}^T(r) dV \quad (2.14)$$

Cette équation fait apparaître un produit de deux termes liés à des processus physiques distincts : l'avancement de la transformation de phase, défini par $\frac{V_M}{V}$, et l'orientation des variantes au sein du volume de martensite $\frac{1}{V_M} \int_{V_M} \varepsilon_{ij}^T(r) dV$. On peut alors introduire deux

variables internes décrivant ces deux phénomènes : la *fraction volumique de martensite* f et la *déformation moyenne de transformation* $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ définies respectivement par :

$$\begin{aligned} f &= \frac{V_M}{V} \\ \bar{\varepsilon}_{ij}^T &= \frac{1}{V_M} \int_{V_M} \varepsilon_{ij}^T(r) dV \end{aligned} \quad (2.15)$$

La déformation de transformation macroscopique au sein du VER s'exprime alors par le produit de ces deux variables internes :

$$E_{ij}^T = f \bar{\varepsilon}_{ij}^T \quad (2.16)$$

Il faut noter que les variables internes sont par définition indépendantes si elles sont considérées comme des variables d'état [Lemaitre et Chaboche 2001]. Ici, la définition de la déformation moyenne de transformation $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ dépend de f qui définit son domaine d'existence. Ces deux variables seront toutefois considérées comme *mathématiquement* indépendantes dans les développements suivants. Cependant, des cas particuliers seront à considérer, notamment lors d'un processus de transformation inverse (diminution du volume de martensite) couplé à une réorientation des variantes de martensite. Ces phénomènes sont traités dans la partie 2.9.2.

2.3.2 Déformation d'accommodation des macles

La déformation macroscopique d'accommodation inélastique des macles E^{tw} est également définie de façon moyenne sur le volume V du VER à partir des contributions locales $\varepsilon^{tw}(r)$:

$$E_{ij}^{tw} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \quad (2.17)$$

En utilisant la même approche que pour la déformation de transformation, il est possible d'introduire un volume de variantes maclées V_{twin} sachant que la déformation d'accommodation des macles $\varepsilon_{ij}^{tw}(r)$ est nulle dans toute autre partie du VER. Le volume V_{twin} est défini en supposant que les macles se forment dans la martensite apparaissant sous une structure auto-accommodée. Il faut différencier ce volume de martensite de celui usuellement nommé *martensite thermique* [Brinson 1993, Raniecki et Lexcelent 1994]. En effet, ces auteurs distinguent lors de la définition des variables internes, une martensite thermique (auto-accommodée) et une martensite formée sous contrainte (orientée). Par exemple, dans le cas de martensite formée par refroidissement sans contrainte d'un échantillon d'austénite, une structure auto-accommodée est observée. Si ensuite, en conservant une température constante, un chargement mécanique est appliqué, les variantes de martensite vont s'orienter. Dans ce cas, les variables définies par Brinson vont évoluer (la quantité de martensite thermique diminue et la quantité de martensite orientée augmente) alors que la quantité de martensite formée auto-accommodée utilisée dans le présent modèle va rester constante (il s'agit toujours de la même martensite, donc la structure qu'elle présentait lors de sa formation reste la même).

Dans le présent modèle, le volume V_{twin} est défini par le volume de martensite formée sous forme auto-accommodée. Si cette martensite est par la suite orientée, le volume V_{twin} reste le même. Il ne peut diminuer que dans le cas d'une transformation inverse (formation d'austénite).

On peut alors, de façon similaire à la déformation de transformation, introduire une *fraction volumique de martensite formée auto-accommodée* f^{FA} définissant un volume au sein

duquel la déformation locale d'accommodation des macles $\varepsilon_{ij}^{tw}(r)$ prend une valeur non nulle :

$$E_{ij}^{tw} = \frac{V_{tw}}{V} \frac{1}{V_{tw}} \int_{V_{tw}} \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV = f^{FA} \frac{1}{V_{tw}} \int_{V_{tw}} \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \quad (2.18)$$

La déformation moyenne d'accommodation des macles au sein du volume V_{tw} est alors décrite par la variable interne $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$. On peut ainsi définir la déformation macroscopique E_{ij}^{tw} comme le produit des deux variables macroscopiques f^{FA} et $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$:

$$E_{ij}^{tw} = f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \quad (2.19)$$

avec :

$$\begin{aligned} f^{FA} &= \frac{V_{tw}}{V} \\ \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} &= \frac{1}{V_{tw}} \int_{V_{tw}} \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \end{aligned} \quad (2.20)$$

2.3.3 Variables internes retenues

Quatre variables internes ont été proposées ici pour décrire l'état d'un VER d'AMF. On peut cependant, en prenant en compte le principe d'indépendance des variables internes, réduire ce nombre. En effet, l'évolution de la fraction volumique de martensite formée auto-accommodée f^{FA} à un instant t est intrinsèquement liée à l'évolution de la fraction volumique de martensite f et à la déformation moyenne de transformation $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ observée. Il est alors possible, en suivant l'évolution du chargement, de calculer la valeur de la variable f^{FA} en fonction des variables f (formation ou disparition de martensite) et $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ (orientation des variantes de martensite formées qui, si elles ne sont pas orientées jusqu'à saturation, définissent un volume de martensite auto-accommodée).

Trois variables internes sont retenues pour définir le potentiel thermodynamique :

- la fraction volumique de martensite f ;
- la déformation moyenne de transformation de la martensite $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$;
- la déformation moyenne d'accommodation des macles au sein de la martensite formée auto-accommodée $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$.

2.4 DÉFINITION DU POTENTIEL THERMODYNAMIQUE

Le potentiel thermodynamique proposé dans la section 2.2 peut maintenant être entièrement explicité en fonction des variables de contrôle Σ_{ij} et T , des variables internes f , $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ et $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ et de paramètres intrinsèques au matériau :

$$\Delta G = -\Delta TS^A + f(\Delta U - T\Delta S) - \Sigma_{ij} E_{ij} + G^{int} - C_v \left(\Delta T - T \log \frac{T}{T^{init}} \right) \quad (2.21)$$

Le terme décrivant l'énergie d'interaction G^{int} correspond à la quantité d'énergie élastique stockée au sein du VER lors de la transformation de phase, de l'orientation des variantes et de l'accommodation inélastique des macles. En introduisant les contraintes locales $\sigma_{ij}(r)$ et un tenseur local de souplesse $\mathcal{S}_{ijkl}(r)$, il s'exprime de façon intégrale sous la forme :

$$G^{int} = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \mathcal{S}_{ijkl}(r) \sigma_{kl}(r) dV \quad (2.22)$$

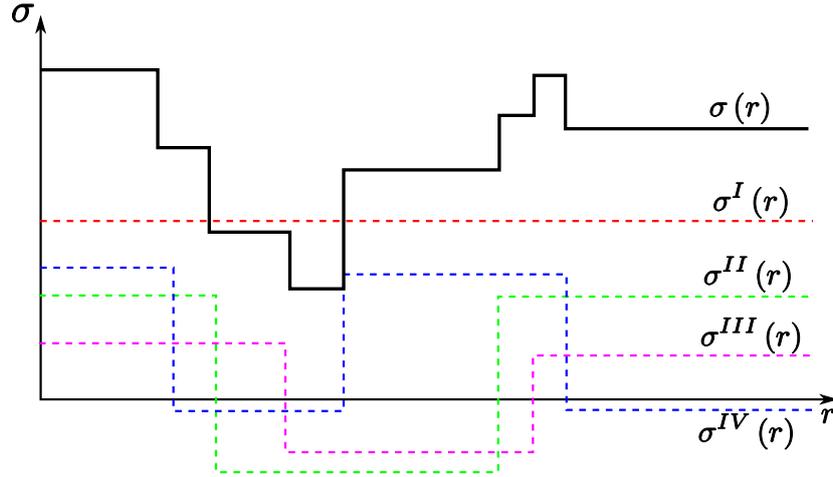


FIG. 2.3 – Décomposition du champ de contrainte hétérogène $\sigma(r)$ en quatre contributions : contrainte macroscopique $\sigma^I(r)$, saut de contrainte lié aux incompatibilités géométriques induites par l'activation de la transformation $\sigma^{II}(r)$, saut de contrainte liée aux incompatibilités d'apparition des variantes $\sigma^{III}(r)$ et saut de contrainte induit par la mobilité des interfaces intermacles $\sigma^{IV}(r)$.

où la déformation élastique $\varepsilon_{ij}^{el}(r) = S_{ijkl}(r) \sigma_{kl}(r)$ s'exprime localement en fonction de la déformation totale et des différentes déformations inélastiques :

$$G^{int} = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \left(\varepsilon_{ij}(r) - \varepsilon_{ij}^{th}(r) - \varepsilon_{ij}^T(r) - \varepsilon_{ij}^{twin}(r) \right) dV \quad (2.23)$$

En supposant des constantes thermoélastiques identiques au sein des deux phases en présence, on peut, en appliquant le théorème de Hill [Hill 1963], extraire les termes liés aux déformations macroscopiques totale et thermique :

$$G^{int} = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij} - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij}^{th} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(r) \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \quad (2.24)$$

L'accumulation de cette énergie élastique due aux déformations de transformation et d'accommodation inélastique des macles s'explique par l'existence d'un champ de contrainte hétérogène au sein du VER, dû à des incompatibilités de déformation à différentes échelles :

- à l'échelle intergranulaire, des grains voisins d'orientations cristallines différentes vont entraîner, lors de la formation de variantes de martensite, des incompatibilités de déformation ;
- à l'échelle intragranulaire, les différentes orientations de variantes de martensite formées ne sont pas nécessairement compatibles entre elles ;
- à l'échelle intravariante, la mobilité des interfaces entre les macles induit une hétérogénéité de contrainte.

Afin de décrire l'hétérogénéité du champ de contraintes au sein du VER, la contrainte locale $\sigma(r)$ est décomposée en quatre contributions (voir fig. 2.3), reliées chacune à un mécanisme de déformation pouvant être décrit à l'aide des variables internes :

$$\sigma(r) = \sigma^I(r) + \sigma^{II}(r) + \sigma^{III}(r) + \sigma^{IV}(r) \quad (2.25)$$

L'énergie élastique du VER fait intervenir quatre contributions G_1 , G_2 , G_3 et G_4 que nous définissons ci-après :

1. G_1^{int} est l'énergie liée à la contrainte macroscopique $\sigma^I(r) = \Sigma$. Elle s'écrit :

$$\begin{aligned}
G_1^{int} &= \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij} - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij}^{th} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}^I(r) \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \\
&= \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij} - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} E_{ij}^{th} - \frac{1}{2V} \int_V \Sigma_{ij} \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \\
&= \frac{1}{2} \Sigma_{ij} \left(E_{ij} - E_{ij}^{th} - E_{ij}^T - E_{ij}^{tw} \right) \\
&= \frac{1}{2} \Sigma_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

où S est le tenseur de souplesse d'ordre 4 considéré identique pour la martensite et l'austénite.

2. G_2^{int} est l'énergie liée aux incompatibilités géométriques de déformation lors de la transformation martensitique. Cette énergie apparaît à l'échelle intergranulaire (incompatibilité entre des grains présentant des déformations de transformation différentes) et intragranulaire (incompatibilité entre la partie transformée et la partie non transformée du VER). Elle est représentée par le champ de contrainte d'ordre II, $\sigma^{II}(r)$:

$$G_2^{int} = -\frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}^{II}(r) \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \tag{2.27}$$

Cette intégrale doit être calculée sur l'ensemble du VER en fonction des variables internes macroscopiques. Ceci n'est pas réalisable directement mais la quantité peut être approchée en considérant que l'énergie stockée augmente avec la déformation de transformation. La contrainte locale d'ordre II est approximée par une contrainte à l'échelle du VER décroissant proportionnellement à $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ en introduisant un paramètre matériau décrivant cette relation de proportionnalité $-H_{\bar{\varepsilon}^T}$. De plus dépendance entre cette contrainte et la déformation moyenne d'accommodation des macles est négligée :

$$\begin{aligned}
G_2^{int} &= \frac{1}{2V} \int_V H_{\bar{\varepsilon}} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \varepsilon_{ij}^T(r) dV \\
&= \frac{1}{2V} H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \int_V \varepsilon_{ij}^T(r) dV \\
&= \frac{1}{2} \frac{V_M}{V} \frac{1}{V_M} H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \int_V \varepsilon_{ij}^T(r) dV \\
&= \frac{1}{2} f H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T
\end{aligned} \tag{2.28}$$

On peut noter que l'expression obtenue est similaire à ce qui est obtenu lors de la modélisation de l'écroutissage plastique où $H_{\bar{\varepsilon}^T}$ peut être comparé à un terme d'écroutissage isotrope.

3. G_3^{int} est l'énergie élastique stockée liée à l'incompatibilité entre les différentes variantes de martensite. On y associe une variation du champ de contraintes $\sigma^{III}(r)$:

$$G_3^{int} = -\frac{1}{2V} \int_V \sigma^{III}(r) \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \tag{2.29}$$

Si toutes les variantes de martensite sont prises en compte, Siredey *et al.* [Siredey et al. 1999] ont montré que cette énergie intervariante au sein d'un grain N d'AMF s'exprime :

$$w_{inter}^N = \frac{1}{2} \sum_{m,n} f_m H^{mn} f_n \tag{2.30}$$

où f_m et f_n sont respectivement les fractions volumiques des variantes m et n , et H est une matrice d'interaction dont la composante mn représente la compatibilité entre les variantes m et n . Le présent modèle ne distingue pas les différentes variantes de martensite. Aussi, l'hypothèse faite est de considérer que le terme d'interaction augmente de façon quadratique en fonction de la fraction volumique de martensite :

$$G_3^{int} = \frac{1}{2} H_f f^2 \quad (2.31)$$

Dans le cas du polycristal, une hypothèse simplificatrice consiste à considérer un paramètre H_f plus important afin de prendre en compte l'apparition de variantes incompatibles induite par les interactions intergranulaires.

4. G_4^{int} est reliée à l'hétérogénéité du champ de contrainte induite par la mobilité des interfaces intermacles. Cette hétérogénéité est traduite localement par la contribution $\sigma^{IV}(r)$.

$$G_4^{int} = -\frac{1}{2V} \int_V \sigma^{IV}(r) \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{tw}(r) \right) dV \quad (2.32)$$

De la même manière que pour l'incompatibilité induite par la déformation de transformation, un paramètre de proportionnalité $-H_{twin}$ par rapport à la déformation moyenne d'accommodation des macles $\bar{\varepsilon}^{tw}$ est considéré pour approximer l'hétérogénéité de contrainte locale par une contrainte macroscopique. De plus, l'interaction de ce phénomène avec la déformation de transformation $\varepsilon_{ij}^T(r)$ est négligée. G_2^{int} s'exprime alors :

$$\begin{aligned} G_4^{int} &= \frac{1}{2V} \int_V H_{twin} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \\ &= \frac{1}{2V} H_{twin} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \int_V \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \\ &= \frac{1}{2} \frac{V_{twin}}{V} \frac{1}{V_{twin}} H_{twin} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \int_{V_{twin}} \varepsilon_{ij}^{tw}(r) dV \\ &= \frac{1}{2} f^{FA} H_{twin} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \end{aligned} \quad (2.33)$$

L'énergie élastique liée aux interactions au sein du VER est alors totalement définie à l'aide des variables de contrôle, des variables internes et de paramètres d'interaction (H_f , $H_{\bar{\varepsilon}^T}$, H_{twin}). Par extension, on peut alors exprimer totalement le potentiel thermodynamique retenu à partir des mêmes variables et satisfaire l'inégalité de Clausius-Duhem. On notera que les approximations retenues pour décrire l'énergie d'interaction font appel à des formes quadratiques qui sont les plus simples possibles pour ce type de phénomènes. Malgré la perte d'informations sur la nature du champ de contraintes locales au sein du VER, cette approche ne nécessite que très peu de paramètres matériau (les 3 paramètres $H_{\bar{\varepsilon}^T}$, H_f et H_{twin}) et facilite ainsi le processus d'identification. De plus, les expressions obtenues se rapprochent de ce qui est généralement adopté dans la modélisation de la plasticité à laquelle le comportement superélastique des AMF est souvent comparé.

Le potentiel thermodynamique (2.21) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \Delta G &= -\Delta T S^A + B(T - T_0) f - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} - \Sigma_{ij} \alpha \delta_{ij} \Delta T - \Sigma_{ij} f \bar{\varepsilon}_{ij}^T \\ &\quad - \Sigma_{ij} f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} + \frac{1}{2} f H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T + \frac{1}{2} H_f f^2 + \frac{1}{2} f^{FA} H_{twin} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \\ &\quad - C_v \left(\Delta T - T \log \frac{T}{T^{init}} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

où $T_0 = \frac{\Delta U}{\Delta S}$ et $B = -\Delta S$, respectivement la température d'équilibre de la transformation de phase et la variation linéaire de l'entropie autour de cette température d'équilibre, sont considérées comme des paramètres intrinsèques au matériau.

2.5 FORCES MOTRICES THERMODYNAMIQUES

Le potentiel thermodynamique explicité dans l'équation (2.34) dépend uniquement des variables de contrôle, des variables internes et de paramètres intrinsèques au matériau considéré. Des forces thermodynamiques A_k associées aux variables internes V_k peuvent alors être définies en considérant la relation :

$$A_k = \frac{\partial \Delta G}{\partial V_k} \quad (2.35)$$

L'inégalité de Clausius-Duhem (2.10) devient :

$$-\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} - \dot{\Sigma} : E - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \cdot \dot{T} - S \cdot \dot{T} - \overbrace{A_k \cdot \dot{V}_k}^{\text{dissipation interne}} - \vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\text{grad}} T}{T} \geq 0 \quad (2.36)$$

où le terme $A_k \cdot \dot{V}_k$ est le produit des forces thermodynamiques liées aux variables internes f , $\bar{\epsilon}_{ij}^T$ et $\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}$ par les vitesses de ces dernières. Il s'agit d'un produit doublement contracté lorsque les variables internes et les forces thermodynamiques sont des tenseurs d'ordre 2 (cas de $\bar{\epsilon}_{ij}^T$, $\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}$, $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^T}$ et $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}}$).

$$-\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma_{ij}} \dot{\Sigma}_{ij} - \dot{\Sigma}_{ij} E_{ij} - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \dot{T} - S \dot{T} - \frac{\partial \Delta G}{\partial f} \dot{f} - \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^T} \dot{\bar{\epsilon}}_{ij}^T - \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^{tw}} \dot{\bar{\epsilon}}_{ij}^{tw} - q_i \frac{T_i}{T} \geq 0 \quad (2.37)$$

Dès cette étape du développement mathématique, il est possible d'introduire deux caractéristiques des phénomènes observés dans les AMF, à savoir le caractère isovolume des déformations de transformation et d'accommodation inélastique des macles ($\bar{\epsilon}_{kk}^T = 0$ et $\bar{\epsilon}_{kk}^{tw} = 0$). Pour ce faire, le tenseur des contraintes de Cauchy Σ_{ij} est remplacé par son déviateur Σ_{ij}^D dans l'expression des forces thermodynamiques $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^T}$ et $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}}$. On obtient alors les forces thermodynamiques A_k suivantes :

- force de transformation $A_f = \frac{\partial \Delta G}{\partial f}$:

$$A_f = B(T - T_0) - \Sigma_{ij} \bar{\epsilon}_{ij}^T + \frac{1}{2} H_{\bar{\epsilon}^T} \bar{\epsilon}_{ij}^T \bar{\epsilon}_{ij}^T + H_f f + \frac{\partial f^{FA}}{\partial f} \left(\frac{1}{2} H_{\text{twin}} \bar{\epsilon}_{ij}^{tw} \bar{\epsilon}_{ij}^{tw} - \Sigma_{ij} \bar{\epsilon}_{ij}^{tw} \right) \quad (2.38)$$

- force d'orientation $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^T} = \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^T}$:

$$A_{\bar{\epsilon}_{ij}^T} = -f \Sigma_{ij}^D + f H_{\bar{\epsilon}^T} \bar{\epsilon}_{ij}^T + \frac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^T} \left(\frac{1}{2} H_{\text{twin}} \bar{\epsilon}_{kl}^{tw} \bar{\epsilon}_{kl}^{tw} - \Sigma_{kl} \bar{\epsilon}_{kl}^{tw} \right) \quad (2.39)$$

- force d'accommodation des macles $A_{\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}} = \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^{tw}}$:

$$A_{\bar{\epsilon}_{ij}^{tw}} = -f^{FA} \Sigma_{ij}^D + f^{FA} H_{\text{twin}} \bar{\epsilon}_{ij}^{tw} \quad (2.40)$$

Les termes $\frac{\partial f^{FA}}{\partial f}$ et $\frac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^T}$ seront négligés dans la suite du développement. Ce choix est motivé par le fait que la valeur de f^{FA} est définie de façon itérative par rapport aux variables f et

$\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ et nécessiterait, dans le cadre d'une implémentation numérique de ce modèle, d'inclure une boucle d'intégration pour évaluer la valeur de ces dérivées. De plus, pour le dimensionnement de structures usuelles, ces termes sont nuls dans la plupart des cas exceptés lors de la formation de martensite auto-accommodée ou de la transformation inverse de martensite formée auto-accommodée. La validation du modèle sur des cas de chargement complexes (voir section 3.4) n'a pas fait apparaître de résultat aberrant ou de difficulté à faire converger son implémentation numérique malgré cette approximation.

De plus, l'équilibre thermoélastique est considéré comme instantané (ou se déroulant à une échelle de temps largement inférieure à celle des processus dissipatifs), ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma_{ij}} - E_{ij} &= 0 \\ \Rightarrow S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} \Delta T + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} &= 0 \end{aligned} \quad (2.41)$$

et :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Delta G}{\partial T} - S &= 0 \\ \Rightarrow S^A - Bf + \Sigma_{ij} \delta_{ij} \alpha - C_v \left(\log \left(\frac{T}{T_{ref}} \right) \right) - S &= 0 \end{aligned} \quad (2.42)$$

2.6 EXPRESSION DE LA DISSIPATION

En tenant compte de l'équilibre thermoélastique énoncé dans les équations (2.41) et (2.42), l'inégalité de Clausius-Duhem (2.36) se réduit à l'expression d'une dissipation qui doit être nécessairement positive :

$$\phi = -A_k \cdot \dot{V}_k - \vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\text{grad}} T}{T} \geq 0 \quad (2.43)$$

La dissipation ϕ se décompose en une dissipation intrinsèque ϕ_1 , fonction de l'évolution des variables internes, et une dissipation thermique par conduction ϕ_2 :

$$\begin{aligned} \phi_1 &= -A_k \cdot \dot{V}_k \\ \phi_2 &= -\vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\text{grad}} T}{T} \end{aligned} \quad (2.44)$$

La modélisation du comportement des AMF passe par la description des phénomènes dissipatifs dont ils peuvent être le siège. Ainsi, les observations expérimentales ont montré qu'une hystérésis, caractéristique d'une dissipation, apparaît lors de la transformation de phase et de la réorientation des variantes de martensite. Le processus d'accommodation inélastique des macles présente une hystérésis très faible que nous considérerons comme nulle dans le présent modèle.

La dissipation lors de la transformation de phase martensitique se manifeste par une hystérésis qui varie en fonction de la température et de la contrainte appliquée. Elle diminue lorsque la contrainte augmente [Churchill et al. 2009], ce qui se traduit par des pentes de transformation directe et inverse différentes si on cherche à représenter ce phénomène dans un pseudo-diagramme de phase. La réorientation des variantes présente quant à elle une dissipation qui dépend uniquement de la contrainte et se traduit par une hystérésis mécanique lors d'un cycle complet de traction-compression sur un matériau martensitique

($T < M_f$). En supposant que la température est constante dans tout le VER, la seule dissipation non nulle ϕ est alors mécanique. Elle s'écrit en fonction de la dérivée temporelle des variables internes et de forces critiques d'activation positives. Elle se décompose en deux contributions : de la transformation de phase, ϕ_f ,

$$\phi_f = F_f^{crit} (\dot{f}) \cdot \dot{f} \quad (2.45)$$

et de la réorientation des variantes, $\phi_{\bar{\epsilon}^T}$,

$$\phi_{\bar{\epsilon}^T} = f \cdot F_{\bar{\epsilon}^T}^{crit} (\dot{\bar{\epsilon}}_{ij}^T) \cdot \dot{\bar{\epsilon}}_{ij}^T \quad (2.46)$$

Afin de prendre en compte la différence observée entre les pentes de transformation lors des transformations de phase directe et inverse, le terme F_f^{crit} utilisé dans l'équation (2.45) est défini à partir de B et T_0 en introduisant les paramètres supplémentaires B_d , B_r et F_f^{max} . Ils correspondent respectivement aux pentes de transformation directe et inverse et à la valeur maximale de la force thermodynamique $-A_f$. Deux expressions sont alors utilisées suivant que l'on traite une transformation austénite vers martensite ($\dot{f} > 0$) ou martensite vers austénite ($\dot{f} < 0$) :

$$\begin{aligned} F_f^{crit} &= F_f^{max} + (B_d - B) \cdot (T - T_0) \quad \text{si } \dot{f} > 0 \\ F_f^{crit} &= -F_f^{max} + (B_r - B) \cdot (T - T_0) \quad \text{si } \dot{f} < 0 \end{aligned} \quad (2.47)$$

De plus, un effet de stabilisation de la martensite observé par Liu et Favier [Liu et Favier 2000], Popov et Lagoudas [Popov et Lagoudas 2007] et Piao *et al.* [Piao et al. 1993] entraîne un décalage des températures de transformation après une prédéformation du matériau. Si l'origine physique de ce phénomène n'est pas précisément identifiée (relaxation d'énergie élastique stockée ou travail mécanique induit par un frottement interne), il est toutefois possible de le prendre en compte dans un modèle de comportement. ceci est fait ici de façon phénoménologique en introduisant la stabilisation comme un mécanisme de dissipation additionnel :

$$\phi_{stab} = -H_s \bar{\epsilon}_{eq}^T \dot{f} \quad (2.48)$$

où H_s est un paramètre strictement positif et $\bar{\epsilon}_{eq}^T$, la déformation moyenne de transformation équivalente de la martensite prise au sens de Von Mises :

$$\bar{\epsilon}_{eq}^T = \sqrt{\frac{2}{3} \bar{\epsilon}_{ij}^T \bar{\epsilon}_{ij}^T} \quad (2.49)$$

Le terme (2.48) entraîne une dissipation d'énergie positive lorsque la transformation inverse se produit ($\dot{f} < 0$) et favorise la transformation directe si la martensite se forme de façon orientée. En tenant compte de la dissipation lors des phénomènes de transformation de phase et de stabilisation de la martensite, les critères de transformation directe et inverse s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} -A_f &= F_f^{max} + (B_d - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\epsilon}_{eq}^T \quad \text{dans le sens } A \rightarrow M \\ -A_f &= -F_f^{max} + (B_r - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\epsilon}_{eq}^T \quad \text{dans le sens } M \rightarrow A \end{aligned} \quad (2.50)$$

Concernant le processus d'orientation des variantes de martensite, Plietsch et Ehrlich [Plietsch et Ehrlich 1997] ont montré expérimentalement qu'un critère isotrope est suffisant pour décrire les conditions de réorientation. Un critère scalaire est alors proposé :

$$\left| -A_{\bar{\epsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma} = f \cdot F_{\bar{\epsilon}^T}^{crit} \quad (2.51)$$

où $\left| -A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma}$ correspond à la norme du tenseur $-A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$ prise au sens de Von Mises :

$$\left| X_{ij} \right|_{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} X_{ij} X_{ij}} \quad (2.52)$$

f est par nature positive ($0 \leq f \leq 1$), on peut alors écrire :

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} = -\frac{A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}}{f} \quad \text{avec} \quad \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma} = F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}^{crit} \quad \text{si} \quad f \neq 0 \quad (2.53)$$

L'accommodation inélastique des macles est traitée en considérant une valeur critique $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}^{crit}$ constante de la force thermodynamique associée $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}$. Le critère à respecter est alors le suivant :

$$\left| -A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} \right|_{\sigma} = F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}^{crit} \quad (2.54)$$

Le phénomène d'accommodation inélastique des macles apparaissant dès l'application d'une contrainte, et $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}^{crit}$ étant une constante, il vient $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} = 0$. L'accommodation inélastique des macles peut ainsi être traitée comme un phénomène non dissipatif. Il s'agit d'une hypothèse forte qui, lors de développements futurs du modèle, pourra être affinée en considérant une force critique non constante.

De la même manière que pour la force d'orientation, la relation 2.54 peut être factorisée par la variable f^{FA} positive :

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} = -\frac{A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}}{f^{FA}} \quad \text{avec} \quad \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} \right|_{\sigma} = 0 \quad \text{si} \quad f^{FA} \neq 0 \quad (2.55)$$

Les conditions $f \neq 0$ et $f^{FA} \neq 0$ sont imposées par la suite de façon numérique, en s'assurant que ces variables ne peuvent atteindre la valeur zéro en conservant des valeurs suffisamment faibles pour ne pas fausser les valeurs des déformations de transformation et d'accommodation inélastique des macles.

2.7 PRISE EN COMPTE DES CHARGEMENTS PARTIELS

La prise en compte des chargements partiels (lorsque la variable f n'atteint pas sa valeur de saturation, 0 ou 1, lors du chargement) est un aspect important à considérer lors de la modélisation du comportement des AMF. En effet, dans le cas de structures soumises à des chargements complexes, il est rare d'atteindre un état de transformation de phase totale.

La formulation utilisée ici reprend celle initiée par Peultier [Peultier 2005]. Elle se base sur la détection de points mémoires en accord avec la notion de variable discrète introduite par Guélin [Wack et al. 1983]. Ainsi, lorsque le sens de transformation s'inverse, la fraction volumique de martensite et la valeur de la force motrice sont notées. Pour servir à la redéfinition de la surface de charge de transformation, deux fonctions Γ_f et κ_f correspondant respectivement au rayon et à la position du centre de la surface de charge sont proposées pour redéfinir la forme de celle-ci. Dans le cas présent, il est nécessaire de spécifier une variable γ_f décrivant l'avancement de la transformation de phase, et ce quel que soit le sens de la transformation :

$$\gamma_f = \frac{|f - f^{mem}|}{|f^{obj} - f^{mem}|} \quad (2.56)$$

où f^{mem} est la valeur de la fraction volumique de martensite lors du dernier changement de sens détecté et f^{obj} la valeur de la fraction de martensite pouvant être atteinte si le

chargement suit son cours (1 pour une transformation austénite \rightarrow martensite et 0 pour une transformation martensite \rightarrow austénite). Les fonctions $\Gamma_f(\gamma_f)$ et $\kappa_f(\gamma_f)$ permettent de décrire un écrouissage linéaire, cinématique et isotrope. Elles s'écrivent :

$$\begin{aligned}\kappa_f &= (1 - \gamma_f) F_f^{mem} \\ \Gamma_f &= (1 - \gamma_f) F_f^{min} + \gamma_f F_f^{max}\end{aligned}\quad (2.57)$$

où F_f^{mem} est la valeur de la force thermodynamique F_f observée lors du dernier changement de sens de transformation diminuée de F_f^{min} (fig. 2.4c). F_f^{min} et F_f^{max} sont des paramètres matériau et permettent de décrire l'allure des boucles internes en fixant les rayons minimal et maximal de la surface de charge.

Après prise en compte des fonctions de boucles internes, les critères de transformation directe et inverse s'écrivent (voir fig. 2.4b) :

$$\begin{aligned}-A_f - \kappa_f &= \Gamma_f + (B_d - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \quad \text{austénite} \rightarrow \text{martensite} \\ -A_f - \kappa_f &= -\Gamma_f + (B_r - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \quad \text{martensite} \rightarrow \text{austénite}\end{aligned}\quad (2.58)$$

En début de chargement, le matériau est supposé totalement austénitique et issu d'une transformation inverse complète à partir de la martensite ($F_f^{mem} = F_f^{max} - F_f^{min}$)(fig. 2.4a).

2.8 MODÉLISATION DES LIMITATIONS PHYSIQUES

Les forces thermodynamiques définies par les équations (2.38), (2.39) et (2.40) ne prennent pas en compte les limitations physiques présentes dans les AMF. Ainsi, la fraction volumique de martensite est nécessairement comprise dans l'intervalle $[0, 1]$:

$$0 \leq f \leq 1 \quad (2.59)$$

De plus, il est couramment admis que la transformation martensitique a lieu à volume constant, impliquant que la déformation de transformation est nécessairement déviatorique. Il en est de même pour la déformation d'accommodation inélastique des macles :

$$\bar{\varepsilon}_{kk}^T = 0 \quad \text{et} \quad \bar{\varepsilon}_{kk}^{tw} = 0 \quad (2.60)$$

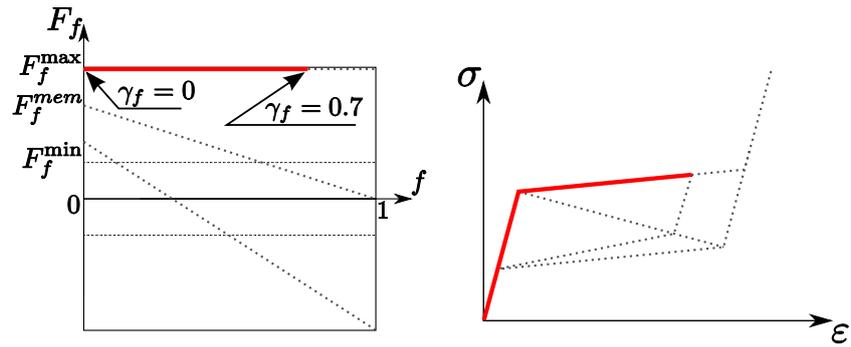
Cette dernière admet également une valeur maximale qui est liée au cisaillement maximal des variantes de martensite :

$$\bar{\varepsilon}_{eq}^T \leq \varepsilon_{SAT}^T \quad (2.61)$$

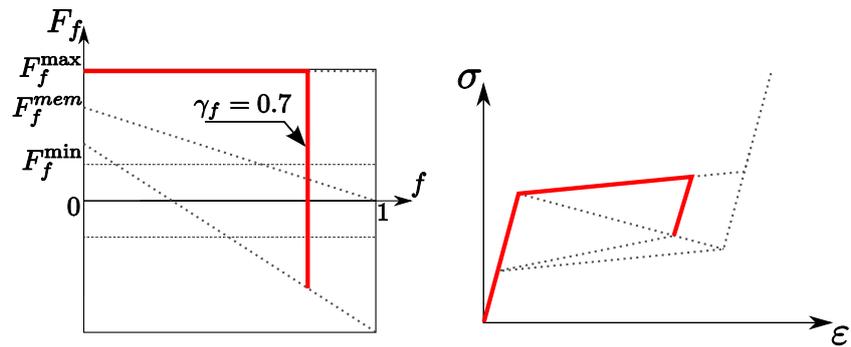
Afin de prendre en compte les différents mécanismes responsables de la limitation de la déformation de transformation, la déformation ε_{SAT}^T n'est pas constante et dépend de l'histoire du chargement.

Ainsi, si un refroidissement sous contrainte d'un polycristal d'austénite est considéré, une première variante de martensite, présentant une orientation favorable par rapport à la direction de la contrainte, va se créer. La déformation de transformation macroscopique observée pour chaque grain sera alors fonction du cisaillement maximal de la variante de martensite formée et de l'orientation des grains. L'échantillon dans sa totalité présentant des grains d'orientations différentes, il offrira une déformation de transformation globale plus faible que celle d'un monocristal correctement orienté par rapport à la contrainte appliquée.

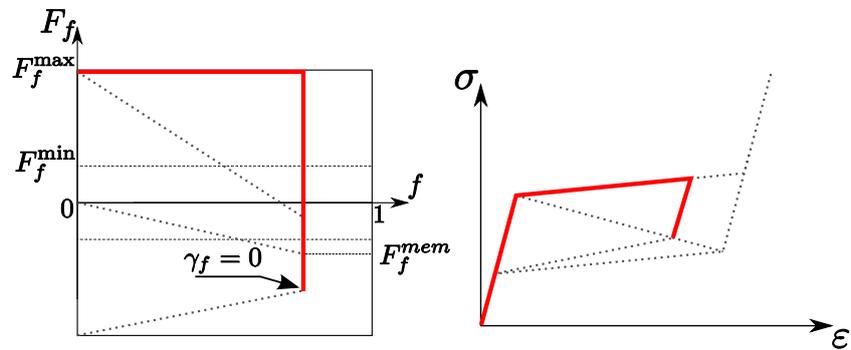
De plus, plusieurs variantes différentes peuvent se former dans un même grain en raison de l'apparition d'incompatibilités de déformation entre des grains voisins. Des variantes moins bien orientées par rapport à la direction de la contrainte appliquée au VER



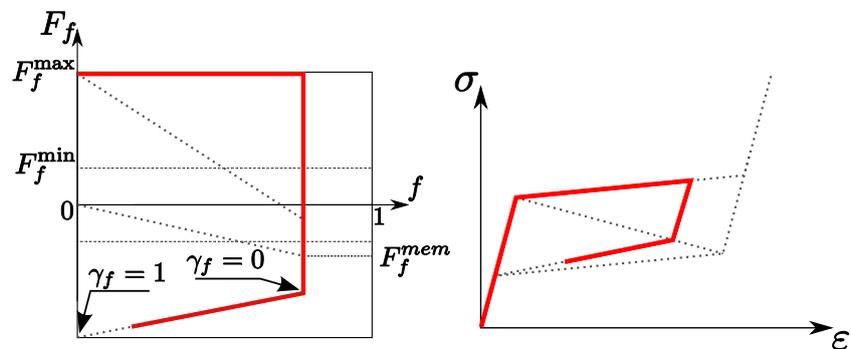
(a) Chargement depuis l'état initial.



(b) Changement de sens de chargement jusqu'au dépassement de la surface de charge du côté opposé.



(c) Redéfinition de la surface de charge.



(d) Poursuite du chargement sur la boucle interne

FIG. 2.4 – Évolution des variables γ_f et F_f^{mem} lors d'un chargement superélastique présentant une boucle interne.

vont se former, réduisant à nouveau la valeur maximale de la déformation de transformation macroscopique de l'échantillon polycristallin. Cette valeur maximale ne peut être calculable sans connaître précisément le cisaillement maximal des variantes, la texture du matériau et les coefficients de compatibilité des différentes variantes. Ceci n'est pas l'objectif d'un modèle macroscopique tel que celui présenté ici. On se contentera donc d'une déformation maximale de transformation notée par la suite ε_{SAT}^T .

Si un refroidissement à contrainte nulle est maintenant considéré, la martensite se forme sous une structure auto-accommodée. Si par la suite une contrainte est appliquée, le mécanisme de réorientation est alors activé. Une variante de martensite bien orientée par rapport à la direction du chargement pourra alors progresser au sein d'un groupe auto-accommodant. Cependant, les différents groupes auto-accommodants ne sont pas nécessairement compatibles entre eux, ce qui aura pour effet de bloquer le processus de réorientation. La déformation maximale obtenue à l'échelle macroscopique sera alors plus faible que celle obtenue dans le cas précédent. Afin de prendre en compte ce phénomène, le modèle proposé introduit une dépendance de la déformation maximale de transformation à l'origine de la martensite (formée orientée ou formée auto-accommodée).

Enfin, une dissymétrie de comportement est observée entre la traction et la compression. Le modèle micromécanique de Patoor *et al.* [Patoor et al. 1995] a mis en évidence que cette caractéristique est liée au degré de symétrie plus faible de la martensite par rapport à l'austénite. Ceci implique une déformation de transformation à saturation dépendante de la direction moyenne des orientations des variantes activées. Ce phénomène peut être modélisé en introduisant une surface limite dans l'espace des déformations de transformation. Patoor *et al.* [Patoor et al. 1995] ont montré qu'un tel critère peut s'exprimer, à l'échelle macroscopique, en fonction des deuxième et troisième invariants J_2 et J_3 du déviateur des contraintes.

Le présent modèle utilise une variable interne définissant la déformation de transformation moyenne de la martensite $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ à laquelle est associée une force thermodynamique liée au processus d'orientation des variantes. Nous avons donc choisi d'exprimer la déformation de transformation maximale (i.e. la valeur maximale de $\bar{\varepsilon}_{eq}^T$) en fonction des deuxième et troisième invariants de $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. Cette formulation permet de prendre en compte la dissymétrie au niveau des déformations maximales de transformation. La résolution des équations de la loi de comportement induit la dissymétrie dans l'espace de contraintes. L'expression de la déformation de transformation à saturation est basée sur l'expression proposée par Peultier [Peultier 2005] que nous avons modifiée afin de prendre en compte la structure d'origine de la martensite et de satisfaire aux conditions de convexité dans l'espace des contraintes. Une telle formulation est basée sur un critère de type Prager, proposé par Patoor *et al.* [Patoor et al. 1995], en fonction des invariants du déviateur des contraintes :

$$F(J_2, J_3, K_\sigma) = J_2 \left(1 + \beta \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \right) - K_\sigma^2 = 0 \quad (2.62)$$

où β permet de caractériser la dissymétrie, K_σ est une contrainte limite, J_2 et J_3 sont respectivement les deuxième et troisième invariants du déviateur des contraintes définis par :

$$J_2(X_{ij}) = \frac{1}{2} X_{ij} X_{ij} \quad (2.63)$$

$$J_3(X_{ij}) = \frac{1}{3} X_{ij} X_{jk} X_{ki} \quad (2.64)$$

Si une température constante est considérée, un critère de transformation étudié dans le cas d'un chargement purement mécanique peut se résumer à une comparaison du produit $\Sigma : \bar{\varepsilon}^T$ à une valeur critique K . Il est alors possible d'associer une déformation de

transformation critique à la contrainte critique :

$$\Sigma^{crit} \varepsilon_{SAT}^T = K \quad (2.65)$$

où Σ^{crit} et ε_{SAT}^T dépendent de la direction de chargement. La dissymétrie est alors reportée sur l'expression de la déformation moyenne de transformation :

$$\varepsilon_{SAT}^T = K_\varepsilon \left(1 + \beta \frac{J'_3}{J'_2{}^{3/2}} \right)^{1/2} \quad (2.66)$$

où J'_2 et J'_3 sont respectivement les deuxième et troisième invariants du tenseur des déformations moyennes de transformation. Cette expression présente toutefois la particularité de ne pas être convexe pour toute valeur de β . Il convient alors de la généraliser à l'ordre n :

$$\varepsilon_{SAT}^T = K_\varepsilon \left(1 + \beta \frac{J'_3}{J'_2{}^{3/2}} \right)^{1/n} \quad (2.67)$$

Les trois paramètres n , K_ε et β peuvent être identifiés expérimentalement à l'aide de trois essais en traction, compression et cisaillement. Afin de s'affranchir de ce dernier essai, le paramètre n a été fixé à 5 de façon empirique. On notera toutefois que des valeurs plus élevées de ce paramètre peuvent conduire à une surface de charge non convexe. Il reste alors à évaluer K_ε et β à partir des valeurs maximales ε_{trac}^T et ε_{comp}^T de $\bar{\varepsilon}^T$ obtenues expérimentalement par des essais de traction et compression uniaxiales. Dans ces deux cas, le tenseur des déformations moyennes de transformation s'écrit :

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^T = \varepsilon_{trac}^T \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^T = \varepsilon_{comp}^T \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

D'où l'expression de K_ε :

$$K_\varepsilon = \varepsilon_{trac}^T \left(1 + \frac{\beta}{\alpha} \right)^{-1/n} \quad (2.70)$$

où α est une constante issue des valeurs des deuxième et troisième invariants du tenseur des déformations moyennes de transformation dans le cas uniaxial :

$$\alpha = 4 \cdot \left(\frac{3}{4} \right)^{3/2} \approx 2,598 \quad (2.71)$$

D'où le paramètre de dissymétrie β :

$$\beta = \left(\frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right) \alpha \quad (2.72)$$

avec γ le rapport des déformations à saturation en compression et en traction uniaxiales, élevé à la puissance n :

$$\gamma = \left(\frac{\varepsilon_{comp}^T}{\varepsilon_{trac}^T} \right)^n \quad (2.73)$$

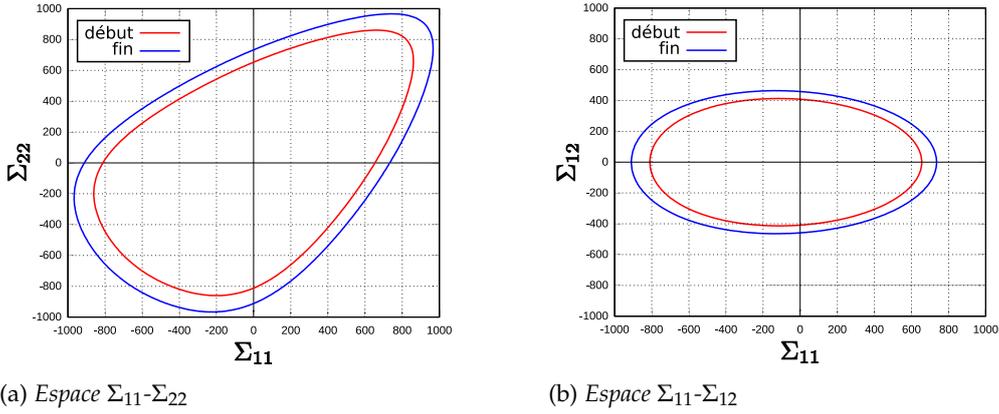


FIG. 2.5 – Surfaces de début et de fin de transformation pour le cas superélastique dans l'espace des contraintes.

On peut ainsi obtenir les paramètres permettant d'exprimer la valeur maximale de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ en fonction de sa direction à partir des déformations recueillies pour deux cas de chargement de compression et de traction uniaxiales. De plus, cette formulation permet d'écrire la dissymétrie dans l'espace des contraintes par l'intermédiaire des surfaces de transformation (voir fig. 2.5).

Il faut également prendre en compte, dans la valeur maximale de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$, la structure selon laquelle s'est formée la martensite. Pour ce faire, un ratio η_ε entre la déformation de transformation à saturation observée pour de la martensite formée auto-accommodée ε_{trac}^{TFA} et pour de la martensite formée orientée ε_{trac}^T , dans le cas de la traction uniaxiale, est adopté :

$$\eta_\varepsilon = 1 - \frac{\varepsilon_{trac}^{TFA}}{\varepsilon_{trac}^T} \quad (2.74)$$

La déformation maximale de transformation s'exprime ainsi en fonction de la déformation à saturation de la martensite orientée et de la fraction volumique de martensite formée auto-accommodée f^{FA} , déjà introduite pour traiter le cas de l'accommodation inélastique des macles :

$$\varepsilon_{MAX}^T = \varepsilon_{SAT}^T \cdot \left(1 - \frac{f^{FA}}{f} \eta_\varepsilon \right) \quad (2.75)$$

Cette expression se base uniquement sur les cas limites (martensite formée totalement orientée ou totalement auto-accommodée). Par manque de données bibliographiques sur l'évolution de la déformation de transformation à saturation pour des cas intermédiaires, une interpolation linéaire est retenue.

Notons que le critère de Von Mises est retrouvé ici si les déformations de transformation à saturation introduites ne présentent pas de dissymétrie.

Les limitations physiques définies doivent être prises en compte au niveau des forces thermodynamiques afin que les valeurs des variables internes issues de la résolution des équations régissant l'équilibre du VER soient acceptables. Pour ce faire, des multiplicateurs de Lagrange sont introduits :

1. λ_0 permet de prendre en compte la condition $f \geq 0$:

$$\lambda_0 = 0 \quad \text{si } f \geq 0, \quad \lambda_0 > 0 \quad \text{sinon} \quad (2.76)$$

2. λ_1 assure le respect de la condition $f \leq 1$:

$$\lambda_1 = 0 \quad \text{si } f \leq 1, \quad \lambda_1 > 0 \quad \text{sinon} \quad (2.77)$$

3. λ_2 permet la prise en compte de la déformation de transformation à saturation $\bar{\varepsilon}_{eq}^T \leq \varepsilon_{MAX}^T$:

$$\lambda_2 = 0 \quad \text{si} \quad \bar{\varepsilon}_{eq}^T \leq \varepsilon_{MAX}^T, \quad \lambda_2 > 0 \quad \text{sinon} \quad (2.78)$$

λ_2 est ensuite multiplié par la variable interne $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ afin de prendre la forme d'un tenseur d'ordre 2 orienté dans la direction de la déformation de transformation ($\lambda_{2ij} = \lambda_2 \bar{\varepsilon}_{ij}^T$), ce qui permet de l'introduire dans l'expression de la force thermodynamique $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$.

Les forces thermodynamiques sont ensuite modifiées afin d'y introduire les multiplicateurs de Lagrange. Ces expressions modifiées sont notées F_k :

- la force de transformation F_f :

$$\begin{aligned} F_f &= -A_f - \lambda_0 - \lambda_1 \\ &= \Sigma_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2} H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T - H_f f - \lambda_0 - \lambda_1 \end{aligned} \quad (2.79)$$

- la force d'orientation $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$:

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} = -A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} - \lambda_2 = \Sigma_{ij}^D - H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \lambda_{2ij} \quad (2.80)$$

- la force d'accommodation des macles $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}$:

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} = -A_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} = \Sigma_{ij}^D - H_{tw} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} \quad (2.81)$$

Il faut noter qu'aucune limitation n'a été mise sur la valeur de la variable interne $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$. En effet, bien que le phénomène d'accommodation inélastique des macles admette une valeur de déformation finie, cette limite est atteinte après l'activation de la plasticité. Le présent modèle n'ayant pas vocation à être valable après activation de la plasticité, nous considérerons que le processus d'accommodation des macles et la variable tensorielle $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ qui le décrit n'admettent pas de limite.

2.9 CONDITIONS D'ACTIVATION ET LOIS D'ÉVOLUTION

2.9.1 Transformation de phase

La prise en compte dans l'expression de la dissipation du formalisme des boucles internes permet de dégager trois cas distincts en ce qui concerne le processus de transformation de phase :

Si $F_f - \kappa_f = \Gamma_f + (B_d - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ **et** $\frac{d(F_f - \kappa_f)}{dt} = 0$, la transformation de phase est activée dans le sens austénite \rightarrow martensite, $\dot{f} > 0$.

Si $F_f - \kappa_f = -\Gamma_f + (B_r - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ **et** $\frac{d(F_f - \kappa_f)}{dt} = 0$, la transformation de phase est activée dans le sens martensite \rightarrow austénite, $\dot{f} < 0$.

Sinon, la transformation martensitique est inactive. La fraction volumique de martensite f reste donc constante ($\dot{f} = 0$).

2.9.2 Orientation des variantes

Des expériences effectuées par L'excellent *et al.* [L'excellent et al. 2002] ont montré que la direction d'écoulement de la déformation de transformation est normale à la surface de

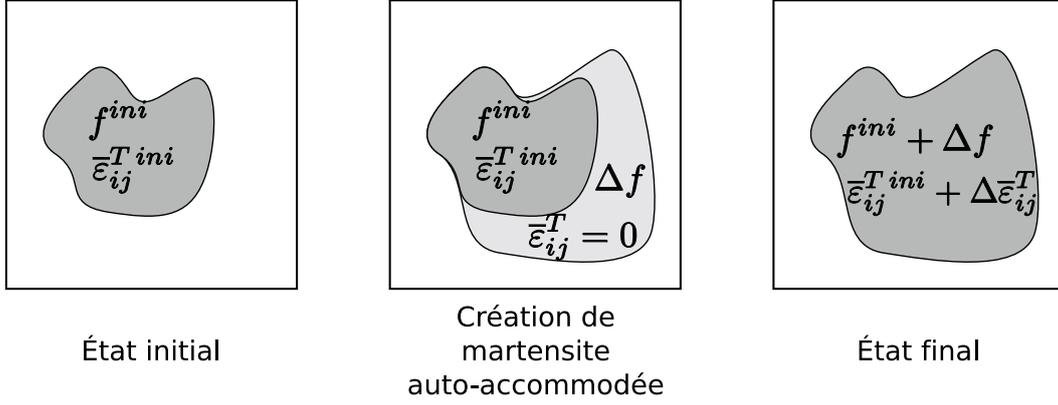


FIG. 2.6 – Évolution des variables internes dans le cas d'une transformation austénite \rightarrow martensite lorsque l'orientation des variantes n'est pas activée.

transformation. Le présent modèle suppose que la direction de la vitesse de déformation de transformation moyenne suit une règle de normalité par rapport à la force thermodynamique $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$:

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{\partial |F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma}}{\partial F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}} \quad (2.82)$$

De plus, les conditions d'activation du mécanisme d'orientation des variantes sont définies par :

Si $|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma} = F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit}$ **et** $\frac{d|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma}}{dt} = 0$, l'orientation des variantes est activée, et la variable interne qui lui est associée évolue, $\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T \neq 0$.

Si $|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma} < F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit}$ **ou si** $|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma} = F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit}$ **et** $\frac{d|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_{\sigma}}{dt} \leq 0$, l'orientation des variantes de martensite est inactive.

Il faut, dans ce dernier cas, considérer des lois d'évolution supplémentaires pour définir l'évolution de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. En effet, la nature même de cette variable (valeur moyenne sur le domaine martensitique) fait que si ce domaine évolue (variation de la variable f), la déformation moyenne de transformation peut évoluer. Ainsi, si la transformation de phase est activée dans le sens austénite \rightarrow martensite et que l'orientation des variantes est inactive, la martensite créée va se former selon une structure auto-accommodée. La déformation de transformation globale reste constante ($\dot{E}_{ij}^T = 0$), ce qui implique, connaissant la variation de f , une variation de $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ (voir fig. 2.6) telle que :

$$f \bar{\varepsilon}_{ij}^T = C^{te} \quad (2.83)$$

Si la transformation est activée dans le sens martensite \rightarrow austénite, de la martensite disparaît mais celle qui reste présente toujours la même déformation moyenne de transformation :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0 \quad (2.84)$$

Enfin, si aucune transformation de phase ne se produit ($\dot{f} = 0$), la déformation moyenne de transformation reste également constante. Il s'agit ici d'un cas purement élastique :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0 \quad (2.85)$$

2.9.3 Accommodation inélastique des macles

Le critère d'accommodation inélastique des macles implique que la force thermodynamique $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}}$ associée à la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ est telle que :

$$\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}} \right|_{\sigma} = 0 \quad (2.86)$$

Ce critère reste toujours activé, ce qui implique une évolution de la variable interne $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$. Celle-ci, de la même manière que la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$, présente une direction d'écoulement définie par la règle de normalité sur la force thermodynamique qui lui est associée. Ici, cette direction coïncide avec celle du tenseur déviateur des contraintes.

La variable f^{FA} correspondant à la fraction volumique de martensite formée auto-accommodée doit être définie. Elle dépend de l'histoire de la transformation de phase et peut être calculée si le tenseur $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ est connu à tout moment, donnant ainsi accès à la norme de l'orientation de la martensite formée, et par déduction au ratio de martensite formée auto-accommodée :

$$\dot{f}^{FA} = \dot{f} \frac{\varepsilon_{SAT}^T - \bar{\varepsilon}_{eq}^T}{\varepsilon_{SAT}^T} \quad \text{si } \dot{f} > 0 \quad (2.87)$$

Lorsque la martensite est retransformée en austénite, on suppose que la transformation inverse se répartit de façon équiprobable entre les variantes formées orientées et les variantes formées auto-accommodées :

$$\frac{f^{FA}}{f} = C^{te} \quad \text{si } \dot{f} \leq 0 \quad (2.88)$$

2.10 RÉCAPITULATIF DES DIFFÉRENTS CAS D'ACTIVATION

Les conditions d'activation et les lois d'évolution des différents processus font apparaître cinq combinaisons distinctes de comportement :

1. Transformation et orientation non activées : la réponse est purement élastique (f et $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ constants) à l'exception de l'accommodation inélastique des macles si la variable f^{FA} est non nulle (dans ce cas, $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ varie).
2. Orientation activée et transformation non activée : La fraction volumique de martensite f est constante et la déformation de transformation moyenne $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ évolue. L'accommodation inélastique des macles a lieu si $f^{FA} \neq 0$.
3. Transformation et orientation activées : les variables f et $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ évoluent en même temps, ainsi que $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ si $f^{FA} \neq 0$.
4. Transformation activée dans le sens $A \rightarrow M$ et orientation non activée : la fraction de martensite augmente en considérant une déformation de transformation à l'échelle du VER constante, ce qui a pour effet d'atténuer la valeur de $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. L'accommodation des macles a lieu sous des conditions similaires au cas précédent.
5. Transformation activée dans le sens $M \rightarrow A$ et orientation non activée : la fraction volumique de martensite f diminue et la valeur de $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ reste constante (une partie de la martensite disparaît mais la fraction de martensite restante conserve la même orientation). L'accommodation des macles a lieu si $f^{FA} \neq 0$.

CONCLUSION DU CHAPITRE

À l'issue de ce chapitre, les équations constitutives du modèle de comportement des alliages à mémoire de forme sont définies, suivant les différents cas d'activation des processus de déformation du matériau. Les limitations physiques des variables internes, le phénomène de boucles internes ainsi que la dissymétrie traction-compression sont pris en compte dans l'écriture des forces thermodynamiques et des dissipations, aboutissant à un système d'équations non linéaires avec un fort couplage. Ce dernier ne peut être résolu de façon analytique et implique donc une résolution numérique. Cette résolution sera suivie par l'implémentation du modèle dans un code de calcul par élément finis afin de réaliser du calcul de structures. La partie numérique de ce travail fait l'objet du chapitre suivant.

IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE

3

SOMMAIRE

3.1	RÉSOLUTION NUMÉRIQUE DES ÉQUATIONS CONSTITUTIVES	55
3.1.1	Mise en équations	55
3.1.2	Gestion numérique des saturations	56
3.1.3	Expression des résidus de Newton-Raphson	57
3.2	IMPLÉMENTATION DU MODÈLE 3D DANS UN CODE DE CALCUL PAR ÉLÉMENTS FINIS	62
3.2.1	Prise en compte d'une loi de comportement non-linéaire dans une résolution par éléments finis	62
3.2.2	Calcul des modules tangents thermomécaniques de la loi de comportement	64
3.2.3	Prise en compte des rotations finies	66
3.3	IMPLÉMENTATION DES MODÈLES 2D CONTRAINTES PLANES ET AXISYMETRIQUE .	67
3.3.1	Simplifications adoptées pour les modèles 2D	67
3.3.2	Notation de Voigt en 2D contraintes planes	69
3.3.3	Application : Problème de coques minces (cisaillement transverse)	73
3.4	VALIDATION DU MODÈLE ET DE SON IMPLÉMENTATION	75
3.4.1	Procédure d'identification des paramètres	76
3.4.2	Étude de sensibilité aux paramètres	82
3.4.3	Validation sur des cas de chargements complexes	87
3.4.4	Validation de l'hypothèse des contraintes planes	99
	CONCLUSION	105

Les équations constitutives du modèle de comportement défini lors du chapitre précédent nécessitent une résolution numérique. Cette résolution dans le cas général va permettre d'implémenter le modèle dans un code de calcul par élément finis, afin de réaliser des calculs de structures.

3.1 RÉOLUTION NUMÉRIQUE DES ÉQUATIONS CONSTITUTIVES

Les équations constitutives du modèle ont été présentées au chapitre précédent. Si leur résolution peut se faire de manière analytique dans des cas de chargement particuliers (traction uniaxiale isotherme, cisaillement simple, ...), une résolution numérique est en général nécessaire pour réaliser des calculs de structures faisant intervenir des trajets de chargement complexes.

La procédure de résolution numérique des équations de la loi de comportement a pour vocation :

- d’être implémentée dans différents codes de calcul par éléments finis ;
- d’être utilisée pour simuler des cas de chargement complexes sur un point matériel ;
- d’être implémentée dans des codes d’identification de paramètres.

Afin de rendre l’implémentation numérique du modèle la plus adaptative possible, nous avons choisi de travailler avec le langage orienté objet C++¹. Ceci permet une programmation par modules et facilite le travail dans le cas d’une équipe de plusieurs développeurs (ce modèle et son implémentation numérique ont été développés dans le cadre d’une collaboration entre le LEMTA et le LPMM). De plus, une bibliothèque nommée SIMULA+ [Sim] écrite dans ce même langage a été adoptée afin de faciliter l’utilisation d’opérateurs d’algèbre tensorielle. Enfin, l’aspect modulaire permet l’utilisation d’autres lois de comportement ou d’autres schémas d’intégration numérique.

3.1.1 Mise en équations

La loi de comportement peut être vue comme un système différentiel non linéaire du premier ordre. Les équations retenues correspondent à l’activation des différents processus physiques considérés dans ce travail. À ces processus a été attribuée une liste de variables. Celles-ci peuvent être regroupées en deux catégories :

1. Les variables de pilotage : la déformation totale E_{ij} et la température T , stockées dans un vecteur Y
2. Les variables inconnues : Σ_{ij} , f , $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$, $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$, $\lambda_{\bar{\varepsilon}^T}$ et $\lambda_{\bar{\varepsilon}^{tw}}$ stockées dans un vecteur X

Il faut noter que cette classification des variables diffère par rapport aux variables de contrôle choisies pour définir notre VER (Σ_{ij} et T). Ce choix s’explique par la volonté d’implémenter le présent modèle dans un code de calcul par éléments finis au sein duquel les inconnues issues de la discrétisation spatiale de la structure sont des déplacements (ou indirectement des déformations) et des températures aux noeuds.

Le modèle peut ainsi se ramener à un ensemble d’équations $\mathcal{M}^{continu}$ qui lie les variables inconnues X et leurs différentielles dX aux variables de pilotage Y et à leurs différentielles dY :

$$\mathcal{M}^{continu}(X, dX, Y, dY) = 0 \quad (3.1)$$

Il est ensuite possible de séparer les équations en deux types :

- les équations différentielles décrivant une évolution des variables :

$$dX = \mathcal{G}(X, Y) dY \quad (3.2)$$

¹Le code de calcul par éléments finis utilisé, Abaqus, est conçu pour une programmation des routines utilisateurs *via* le langage Fortran. L’utilisation du C++ présente certaines difficultés d’implémentation, notamment en ce qui concerne la gestion de l’espace mémoire (allocation de taille fixe pour le Fortran et allocation dynamique pour le C++). Cette caractéristique permet la mise en place de procédures sophistiquées pour la prise en compte des points mémoire discrets, par exemple, un tableau dynamique permettant le stockage des différentes variables d’état discrètes relatives à l’histoire du chargement [Rio et al. 2008].

– les équations intégrales définissant un état d'équilibre :

$$\mathcal{F}(X, Y) = 0 \quad (3.3)$$

Le but de l'intégration est de déterminer la valeur des inconnues $X(t)$ correspondant à la valeur des variables de pilotage $Y(t)$ décrivant un trajet de chargement. Le chargement au cours du temps est alors discrétisé en une série d'états de chargement $Y_0, Y_1, \dots, Y_n, \dots, Y_N$. Une évolution linéaire est supposée entre deux valeurs discrètes consécutives Y_n et Y_{n+1} .

La résolution du problème discret consiste donc à calculer l'état des inconnues X_{n+1} , connaissant les valeurs au pas de temps précédent X_n et Y_n ainsi que le point atteint par le trajet de chargement à la fin de l'incrément $n + 1$. Les équations peuvent ainsi être réécrites de manière incrémentale pour former un ensemble $\mathcal{M}^{incremental}$ tel que :

$$\mathcal{M}^{incremental}(X_n, \Delta X, Y_n, \Delta Y) = 0 \quad (3.4)$$

où ΔX et ΔY sont respectivement les incréments des inconnues et des variables de pilotage, considérés constants pour un incrément de temps donné et définis par $\Delta X = X_{n+1} - X_n$ et $\Delta Y = Y_{n+1} - Y_n$.

Étant donnée la nature non linéaire du problème, le calcul de l'incrément ΔX n'est pas direct et il est nécessaire de réaliser une série d'itérations $\Delta X^0, \Delta X^1, \dots, \Delta X^i, \dots, \Delta X^I$ afin de converger vers un état $X_{n+1} = X_n + \Delta X^I$ satisfaisant les équations du modèle à une erreur numérique près. Ce passage du continu au discret implique donc une *translation* de la différentielle dX en un incrément ΔX et un choix de l'instant auquel les équations du modèle sont résolues. Concernant ce dernier point, trois approches sont possibles :

1. la formulation explicite, où les équations sont écrites en début d'incrément :

$$\mathcal{M}^{incremental}(X_n, \Delta X, Y_n, \Delta Y) = 0 \quad (3.5)$$

2. la formulation implicite, où les équations sont écrites en fin d'incrément :

$$\mathcal{M}^{incremental}(X_{n+1}, \Delta X, Y_{n+1}, \Delta Y) = 0 \quad (3.6)$$

3. la formulation semi-implicite, où les équations sont écrites à une valeur de temps intermédiaire :

$$\mathcal{M}^{incremental}(X_n + \theta \Delta X, \Delta X, Y_n + \theta \Delta Y, \Delta Y) = 0 \quad (3.7)$$

où θ est un paramètre appartenant à l'intervalle $[0, 1]$

Différentes méthodes numériques existent suivant le type d'équations à intégrer, impliquant chacune de faire un compromis entre les trois critères suivants : précision de la solution, stabilité de la solution et temps de calcul. Les critères de choix d'un schéma d'intégration sont présentée en annexe A.1.

3.1.2 Gestion numérique des saturations

Il a été vu, dans la section 2.8 que les équations du modèle faisaient intervenir des multiplicateurs de Lagrange afin de modéliser les limites physiques des différentes variables internes utilisées. Or, la définition des multiplicateurs de Lagrange telle qu'elle a été faite au moment de poser les équations constitutives du modèle induit une expression des forces thermodynamiques non continue aux points de saturation. La recherche numérique d'une solution à ces équations implique d'utiliser une expression continue dans l'intervalle des

valeurs pouvant être prises par les variables internes. Pour ce faire, les multiplicateurs de Lagrange ont été remplacés par des fonctions de pénalisation continues de leur variable associée. Une première proposition est d'utiliser des fonctions issues de la fonction inverse prenant une valeur négligeable loin du point de saturation et une valeur élevée au voisinage du point de saturation :

$$\lambda_0 \text{ est remplacé par } \tilde{\lambda}_0(f) = \alpha_0 \frac{f-1}{f} \quad (3.8)$$

$$\lambda_1 \text{ est remplacé par } \tilde{\lambda}_1(f) = \alpha_1 \frac{f}{1-f} \quad (3.9)$$

$$\lambda_{2ij} \text{ est remplacé par } \tilde{\lambda}_{2ij}(\bar{\varepsilon}^T) = \alpha_2 \left(\frac{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}{\varepsilon_{MAX}^T - \bar{\varepsilon}_{eq}^T} \right) \quad (3.10)$$

L'avantage de ce type de formulation est de proposer une forme dérivable (voir fig. 3.1) des différentes courbes représentatives du comportement au voisinage des points de changement de comportement, plus représentative de la réalité que les représentations multilinéaires initialement proposées par le modèle et numériquement plus facile à gérer dans le cadre d'un calcul de structures par éléments finis. Cependant, dans le cas de la déformation moyenne de transformation, lors de chargements complexes faisant intervenir une évolution de la déformation maximale de transformation ε_{MAX}^T au cours du chargement, il arrive qu'il soit nécessaire d'autoriser un léger dépassement numérique de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ par rapport à sa valeur de saturation. Ceci n'étant pas possible avec des fonctions de type inverse sous peine d'introduire une discontinuité, notre choix s'est porté vers une expression utilisée lors de la gestion numérique des problèmes de contact dans le code éléments finis Abaqus [Abaqus], faisant intervenir les paramètres p_2 et c_2 , respectivement l'ordonnée à l'origine de la fonction et la limite à partir de laquelle elle prend une valeur non nulle :

$$\tilde{\lambda}'_{2ij}(\bar{\varepsilon}^T) = \begin{cases} \bar{\varepsilon}_{ij}^T \cdot \frac{p_2}{e-1} \cdot \left(\frac{\frac{\bar{\varepsilon}_{eq}^T}{\varepsilon_{MAX}^T} - 1}{c_2} + 1 \right) \cdot \exp\left(\frac{\frac{\bar{\varepsilon}_{eq}^T}{\varepsilon_{MAX}^T} - 1}{c_2} - 1 \right) & \text{si } \frac{\bar{\varepsilon}_{eq}^T}{\varepsilon_{MAX}^T} - 1 > -c_2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.11)$$

Ce type d'expression offre l'avantage de maintenir la continuité et la dérivabilité une fois la limite de saturation franchie. Le dépassement de la limite reste toutefois contenu par la forte pente présentée par l'expression de la fonction pénalisation ayant pour effet de faire converger la solution vers une valeur acceptable. La figure 3.2 présente l'allure des deux types de formulation retenus.

Il est important de noter que les fonctions de pénalité adoptées font apparaître des paramètres supplémentaires. Ces derniers ont notamment une influence sur le rayon des « arrondis » observés sur les courbes de traction-compression (voir fig. 3.1). Toutefois, ces paramètres ne seront pas par la suite considérés comme des paramètres matériaux dans le sens où leur rôle n'est pas de prendre en compte le comportement réel du matériau mais bien de faciliter la résolution numérique des équations du modèle.

3.1.3 Expression des résidus de Newton-Raphson

La mise en place des équations du modèle a fait apparaître différents cas d'activation possibles entraînant dans chaque cas un jeu d'équations particulier. Le choix est fait d'utiliser une méthode de résolution généralisée quels que soient les processus activés. De fait, le système d'équations se décompose en :

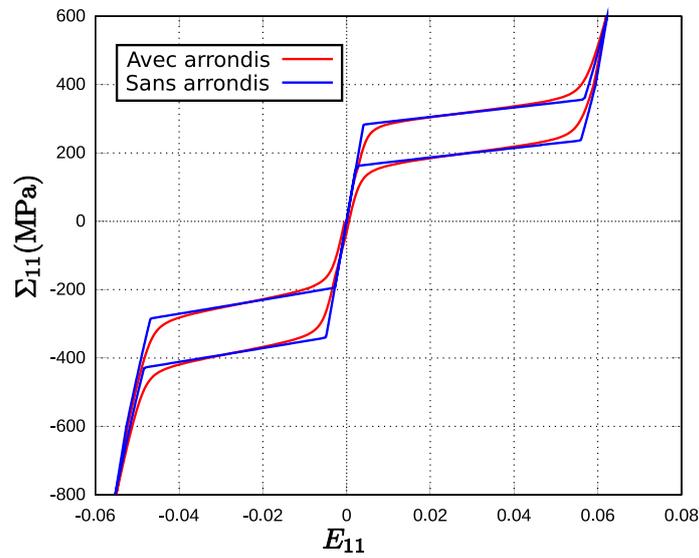


FIG. 3.1 – Formulation « arrondie » des limites de saturation de la transformation martensitique : application à un chargement superélastique.

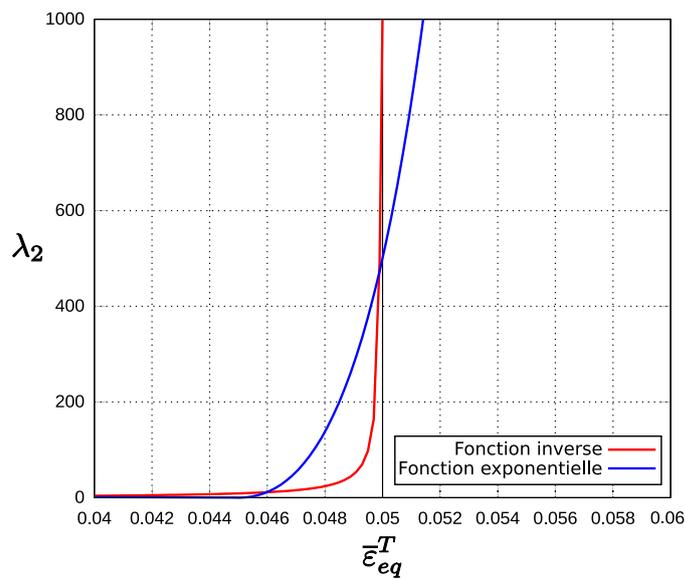


FIG. 3.2 – Allure des fonctions utilisées pour représenter numériquement les multiplicateurs de Lagrange.

- un résidu de transformation R_f
- un résidu d'orientation $R_{\bar{\varepsilon}^T}$
- un résidu d'écoulement de la déformation moyenne de transformation $R_{\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$
- un résidu élastique $R_{\sigma_{ij}}$ permettant de gérer les conditions thermoélastiques

Il faut noter qu'aucun résidu n'est posé pour le processus d'accommodation inélastique des macles. En effet, la direction de ce phénomène est supposée être colinéaire à celle du déviateur des contraintes et l'expression de la fonction de charge permet d'écrire directement $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ en fonction de Σ_{ij}^D et H_{twi} . L'accommodation des macles peut ainsi être directement prise en compte dans l'expression du résidu élastique. Un tenseur d'ordre 4 H_{ijkl}^{twi} est défini tel que $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} = H_{ijkl}^{twi} \Sigma_{kl}^D$. Ce dernier est comparable à un tenseur de souplesse élastique isotrope avec un module d'Young égal au paramètre d'interaction H_{twi} et un coefficient de poisson de 1/2 afin de traduire le caractère isovolume de ce phénomène de déformation.

Afin de définir quels processus sont activés et par la suite les équations constitutives à retenir, une prédiction élastique de l'état de contrainte en fin d'incrément est effectuée. Les forces thermodynamiques sont calculées à partir de la prédiction de contrainte et les processus correspondants sont considérés comme actifs si leur valeur dépasse la valeur critique. La résolution numérique du système d'équations choisi est ensuite effectuée et une solution est obtenue lorsque les résidus sont annulés, à une erreur numérique près. L'algorithme de résolution est le suivant :

Étape 1 : prédiction élastique de l'état de contrainte :

$$\Sigma_{ij}^{n+1\ pred} = \Sigma_{ij}^n + C_{ijkl} \Delta E_{kl} \quad (3.12)$$

Étape 2 : calcul des forces thermodynamiques $F_f^{n+1\ pred}$ et $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}^{n+1\ pred}$ à partir de la prédiction de contrainte. L'évolution de la force de transformation ΔF_f^{pred} est définie par $F_f^{n+1\ pred} - F_f^n$

Étape 3 : tests d'activation des mécanismes de transformation et d'orientation, les variables notées Or et Tr permettent de caractériser respectivement l'activation de l'orientation et de la transformation

Si $F_f^{pred} - \kappa_f > \Gamma_f + (B_d - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ **et** $\Delta F_f^{pred} > 0$, la transformation de phase est activée dans le sens direct ($Tr = 1$)

Si $F_f^{pred} - \kappa_f < -\Gamma_f + (B_r - B) \cdot (T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ **et** $\Delta F_f^{pred} < 0$, la transformation de phase est activée dans le sens inverse ($Tr = -1$)

Si non la transformation de phase n'est pas activée ($Tr = 0$)

Si $\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}^{pred} \right|_{\sigma} > F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}^{crit}$, l'orientation est activée ($Or = 1$)

Si non l'orientation n'est pas activée ($Or = 0$)

Étape 4 : détection d'un éventuel changement de sens de transformation

Si $Tr^{n+1} \neq Tr^n$, il y a un changement de sens de transformation par rapport à l'incrément précédent. Les variables γ_f et F_f^{mem} sont mises à jour

Étape 5 : définition du système d'équations à résoudre en fonction des valeurs de Tr et Or

Si $Tr = 1$ et $Or = 1$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f - (B_d - B)(T - T_0) + H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma} - F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{3}{2} \frac{F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.13)$$

Si $Tr = -1$ et $Or = 1$:

$$\begin{cases} R_f = -F_f + \kappa_f - \Gamma_f + (B_r - B)(T - T_0) + H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma} - F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{3}{2} \frac{F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.14)$$

Si $Tr = 0$ et $Or = 1$:

$$\begin{cases} R_f = \Delta f \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma} - F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{3}{2} \frac{F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_{\sigma}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.15)$$

Si $Tr = 1$ et $Or = 0$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f - (B_d - B)(T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| \Delta f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T + \Delta f \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}{\left| \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.16)$$

Si $Tr = -1$ et $Or = 0$:

$$\begin{cases} R_f = -F_f + \kappa_f - \Gamma_f + (B_r - B)(T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}{\left| \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.17)$$

Si $Tr = 0$ et $Or = 0$:

$$\begin{cases} R_f = \Delta f \\ R_{\bar{\varepsilon}^T} = \left| \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}{\left| \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right|_{\varepsilon}} \\ R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \alpha \delta_{ij} (T - T_{ref}) + f \bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA} \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \end{cases} \quad (3.18)$$

Dans chaque cas, le tenseur $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ est calculé directement à partir du tenseur déviateur des contraintes Σ_{ij}^D ($\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} = H_{ijkl}^{tw} \Sigma_{kl}^D$). Le système d'équations à résoudre fait ainsi apparaître, dans tous les cas, les inconnues suivantes :

- l'incrément de contrainte $\Delta \Sigma$
- l'incrément de fraction volumique de martensite Δf
- l'incrément de déformation moyenne de transformation $\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T$
- le multiplicateur $\Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T}$

Ces incréments des inconnues sont regroupés au sein du vecteur ΔX . De plus, afin de tenir compte de la condition $\bar{\varepsilon}_{kk}^T = 0$, un des termes diagonaux du résidu d'écoulement de la déformation moyenne de transformation doit être exprimé en fonction des deux autres. Ceci est pris en compte lors de l'écriture du jacobien dans le cadre de la résolution de Newton-Raphson.

Étape 6 : résolution du système d'équations

Le système d'équations choisi suite à une prédiction élastique de l'état de contrainte est résolu à l'aide d'un algorithme de Newton-Raphson. L'incrément ΔY des variables de pilotage a pour effet de déséquilibrer le système $\mathcal{R}(X, Y + \Delta Y) \neq 0$. La prédiction élastique effectuée pour détecter les cas d'activation permet de proposer une première valeur ΔX^0 de l'incrément des variables inconnues. On a alors $\mathcal{R}(X + \Delta X^0, Y + \Delta Y) \neq 0$.

Afin de proposer une correction ΔX^i de l'incrément des variables inconnues, on réalise, selon le schéma d'intégration de Newton-Raphson, un développement de Taylor du premier ordre au voisinage de l'état $X + \Delta X^{i-1}$ où i est l'itération en cours. Pour ce faire, il faut déterminer les dérivées de chaque résidu par rapport à l'incrément de chaque variable inconnue. L'algorithme itératif de Newton-Raphson se déroule de la façon suivante :

1. Le système est déséquilibré suite à l'incrément des variables de pilotage. Une première solution issue de la prédiction élastique est proposée :

$$\mathcal{R}(X + \Delta X^0, Y + \Delta Y) \neq 0 \quad (3.19)$$

2. Un développement de Taylor au premier ordre est effectué afin de proposer une correction $\delta \Delta X$ de la solution :

$$\mathcal{R}(X + \Delta X^i + \delta \Delta X, Y + \Delta Y) = \mathcal{R}(X + \Delta X^i, Y + \Delta Y) + \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \Delta X} \delta \Delta X \quad (3.20)$$

où $\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \Delta X} = \mathcal{J}_X$ est appelé *jacobien* du système.

3. Par inversion, on en déduit la correction $\delta \Delta X$:

$$\delta \Delta X = \mathcal{J}^{-1} \left(-\mathcal{R}(X + \Delta X^i, Y + \Delta Y) \right) \quad (3.21)$$

4. Un amortissement de la correction est effectué afin que les valeurs des inconnues respectent les limitations physiques. Ainsi, la correction $\delta \Delta X$ est multipliée par un coefficient α (voir équation 3.22) qui prend des valeurs dans l'intervalle $[0, 1]$. Notons que si $\alpha = 1$, la correction n'est pas affectée et si $\alpha = 0$, la correction est annulée, ce qui revient à conserver l'état initial.

5. La valeur de l'incrément est mise à jour :

$$\Delta X^{i+1} = \Delta X^i + \alpha \delta \Delta X \quad (3.22)$$

6. Tant que $\mathcal{R}(X + \Delta X^{i+1}, Y + \Delta Y) \neq 0$ à un résidu numérique près, une nouvelle correction est calculée. Il faut noter que l'erreur numérique tolérée doit être indépendante de la taille d'incrément des variables de pilotage ΔY . La méthode retenue ici consiste à exprimer l'erreur de correction, dans le cas d'équilibrage des surfaces de charges, comme le quotient du résidu par le rayon de la surface de charge. L'erreur tolérée a ainsi une signification compréhensible (ex : le point définissant l'état de chargement se situe sur la surface de charge à x % près).

Un schéma de principe de la résolution des équations du modèle par la méthode de Newton-Raphson est présenté dans la figure 3.3. On notera que la prédiction de l'activation des différents phénomènes n'est réalisée qu'une seule fois, par prédiction élastique, en début d'incrément. Ce choix se justifie par la faible taille des pas de temps utilisés lors de chargement complexes pouvant faire intervenir des changements d'activation au cours du pas de chargement. Les pas de chargements proportionnels, pendant lesquels les changements d'activation sont évités, peuvent en revanche être de taille importante, permise par l'utilisation d'un schéma d'intégration implicite.

3.2 IMPLÉMENTATION DU MODÈLE 3D DANS UN CODE DE CALCUL PAR ÉLÉMENTS FINIS

3.2.1 Prise en compte d'une loi de comportement non-linéaire dans une résolution par éléments finis

Le schéma d'intégration de Newton-Raphson adopté permet, à partir d'un état initial équilibré, de fournir en sortie l'incrément de la contrainte et des variables internes par rapport à une donnée d'entrée qui est l'incrément de déformation totale et de température. Un tel algorithme permet donc de décrire le comportement d'un point matériel mais se révèle insuffisant dans le cadre d'un calcul de structure impliquant une géométrie et un chargement complexes.

Dans ce cas de figure, la méthode adoptée est celle des *éléments finis*, où la géométrie de la structure est divisée en *éléments* (voir fig. 3.4). Ainsi, le problème continu, sous la forme du principe des puissances virtuelles, s'exprime dans le cas d'un chargement quasi-statique :

$$P^{ext} - P^{int} = 0 \quad (3.23)$$

où P^{ext} correspond à la puissance extérieure fournie (chargement) et P^{int} la puissance interne. À titre d'exemple, pour un équilibre statique mécanique, ceci s'exprime :

$$\int_{\partial\Omega} T_i \delta u_i dS - \int_{\Omega} \delta E_{ij} \Sigma_{ij} d\Omega = 0 \quad (3.24)$$

T_i et δu_i sont respectivement les composantes des vecteurs contrainte et déplacement virtuel suivant la direction i , Ω étant le domaine de l'étude, de frontière $\partial\Omega$. Une fois le problème discrétisé en éléments finis, le vecteur déplacement d'un point de la structure $\{u(x)\}$ peut être défini en fonction des déplacements $\{U\}$ des nœuds formant le *maillage* de celle-ci :

$$\{u(x)\} = [N(x)] \{U\} \quad (3.25)$$

De plus, connaissant les déplacements en tout point, il est possible de remonter à l'état de déformation $\{E(x)\}$:

$$\{\delta E(x)\} = [B(x)] \{\delta U\} \quad (3.26)$$

Lancement de la subroutine UMAT

Prise en compte des rotations finies $\bar{\varepsilon}_{ij}^T \leftarrow Q \bar{\varepsilon}_{ij}^T Q^T$

Prédiction élastique $\Sigma_{ij}^{n+1} = \Sigma_{ij}^n + C_{ijkl} \Delta E_{kl}$

Calcul des forces motrices $F_f^{n+1}, F_{\varepsilon^T}^{n+1}$

Test d'activation de la transformation et de l'orientation

si $F_f - \kappa_f > \Gamma_f + (B_d - B)(T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ et $\Delta F_{f_{A \rightarrow M}} > 0$

$Tr = 1$

si $F_f - \kappa_f < -\Gamma_f + (B_d - B)(T - T_0) - H_s \bar{\varepsilon}_{eq}^T$ et $\Delta F_{f_{M \rightarrow A}} < 0$

$Tr = -1$

sinon

$Tr = 0$

si $|F_{\varepsilon^T}| > F_{\varepsilon^T}^{max}$

$Or = 1$

sinon

$Or = 0$

Test de changement de sens de transformation

si $Tr^{n+1} \neq Tr^n$ les paramètres du point mémoire sont mis à jour

Définition du système d'équation suivant les valeurs de Tr et Or

Résolution par Newton-Raphson

Calcul d'erreur à partir de la prédiction élastique

$\mathcal{R}(X + \Delta X^0, Y + \Delta Y) \neq 0$

tant que $\mathcal{R}(X + \Delta X^{i+1}, Y + \Delta Y) \neq 0$ à un résidu numérique près

Calcul du Jacobien $\mathcal{J} = \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \Delta X}$

Inversion du jacobien et mise à jour de l'incrément

$\Delta X^{i+1} = \Delta X^i + \alpha(X^i) \delta \Delta X$

Calcul des opérateurs tangents

$L_{ijkl} = \frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta E_{kl}} \quad \mathcal{T}_{ij} = \frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta T}$

Les valeurs équilibrées sont transmises à ABAQUS

Fin de la subroutine UMAT

FIG. 3.3 – Schéma de principe de la résolution des équations du modèle par la méthode de Newton-Raphson.

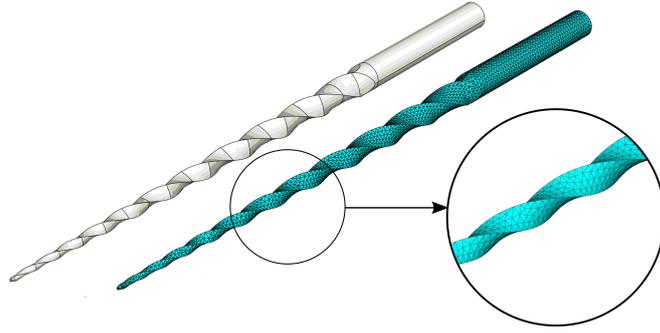


FIG. 3.4 – Discrétisation spatiale en éléments finis.

La puissance des forces intérieures P^{int} peut donc se réécrire sous forme discrète, en faisant intervenir le vecteur des forces nodales $\{F\}$:

$$\begin{aligned} P^{int} &= \{\delta U\}^T \{F\} = \int_{\Omega} \{\delta E\}^T \{\Sigma\} d\Omega \\ &= \{\delta U\}^T \left(\int_{\Omega} [B(x)]^T \{\Sigma(x)\} d\Omega \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Il est alors possible de simplifier cette expression en la factorisant par les déplacements virtuels $\{\delta U\}$:

$$\{F\} = \int_{\Omega} [B(x)]^T [\Sigma(x)] d\Omega \quad (3.28)$$

La résolution des équations de la forme faible de l'équilibre est réalisée par la méthode de Newton-Raphson. Ainsi, le jacobien de la forme linéarisée du résidu d'équilibre correspond à une matrice tangente définie par :

$$[K] = \int_{\Omega} [B(x)]^T \left[\frac{\partial \Delta \Sigma}{\partial \Delta E}(x) \right] [B(x)] d\Omega \quad (3.29)$$

Cette matrice tangente doit être, dans le cas d'une procédure de résolution utilisant un schéma d'intégration de Newton-Raphson, calculée à chaque itération. Pour ce faire, le domaine Ω est divisé en sous-domaines Ω_e correspondant chacun à un élément. Des sous-matrices tangentes $[K_e]$ sont alors calculées pour chaque élément et assemblées pour former la matrice globale. Le calcul intégral pour chaque élément est facilité par l'emploi de géométries connues (quadrangle, tétraèdre, ...) et d'une technique d'intégration par la méthode de la quadrature de Gauss (voir section 4.2.5). La loi de comportement est ainsi évaluée pour chaque point matériel dit *de Gauss*. Dans le cas d'un comportement non linéaire, l'opérateur $\frac{\partial \Delta \Sigma}{\partial \Delta E}$ n'est pas constant et il est nécessaire de l'actualiser à chaque itération.

Ceci se ramène, au niveau de chaque point de Gauss, à calculer des modules tangents de la loi de comportement $\frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta E_{kl}}$ qui sont des modules mécaniques et auxquels il faut rajouter, dans le cas d'un problème faisant intervenir de la thermique comme c'est souvent le cas dans les AMF, les modules tangents thermiques $\frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta T}$. Un schéma résumant le principe de la résolution par la méthode des éléments finis est présenté dans la figure 3.5

3.2.2 Calcul des modules tangents thermomécaniques de la loi de comportement

Les modules tangents thermomécaniques de la loi de comportement sont calculés à partir des équations constitutives de cette dernière. Il est possible de déterminer ces quantités de

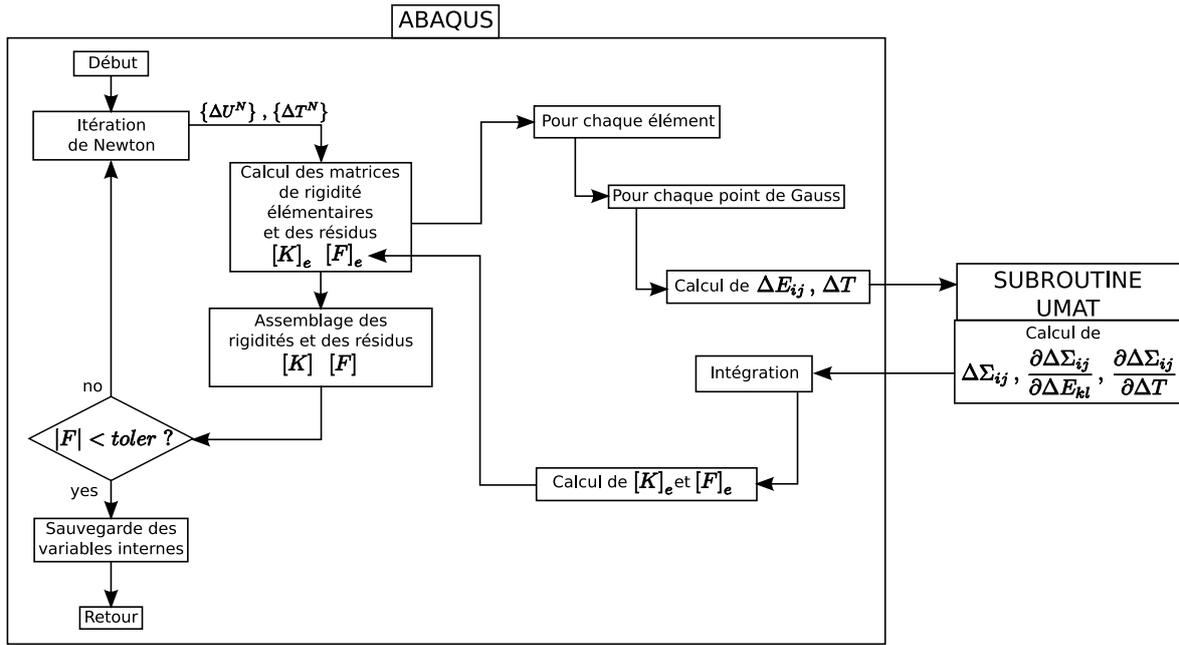


FIG. 3.5 – Schéma du principe de résolution par la méthode des éléments finis.

façon analytique, mais ceci implique un calcul lourd en raison des différents cas d'activations rencontrés, mettant en œuvre plusieurs systèmes d'équations. Il est cependant possible, lorsqu'une intégration implicite par le schéma de Newton-Raphson est utilisée, de calculer les modules tangents en même temps que la résolution numérique des équations différentielles régissant le comportement. Ainsi, le problème équilibré en fin de chaque incrément s'écrit :

$$\mathcal{R} = 0 \quad \text{et} \quad \delta\mathcal{R} = 0 \quad (3.30)$$

qu'il est possible de différencier suivant les variables de contrôle et les inconnues utilisées :

$$\mathcal{J}_X \delta\Delta X + \mathcal{J}_Y \delta\Delta Y = 0 \quad (3.31)$$

où \mathcal{J}_X et \mathcal{J}_Y sont les jacobiens associés respectivement aux inconnues et aux variables de pilotage et définis par :

$$\mathcal{J}_X = \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\Delta X} \quad \text{et} \quad \mathcal{J}_Y = \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\Delta Y} \quad (3.32)$$

La relation 3.31 permet, par inversion, d'exprimer la variation de ΔX en fonction de la variation de ΔY :

$$\delta\Delta X = -\mathcal{J}_X^{-1} \mathcal{J}_Y \delta\Delta Y \quad (3.33)$$

Les modules tangents faisant intervenir des variables inconnues au numérateur (Σ_{ij}) et des variables de pilotage au dénominateur (E_{kl} et T), les valeurs de $\frac{\partial\Delta\Sigma_{ij}}{\partial\Delta E_{kl}}$ et $\frac{\partial\Delta\Sigma_{ij}}{\partial\Delta T}$ sont extraites de composantes de $\frac{\partial\Delta X}{\partial\Delta Y} = -\mathcal{J}_X^{-1} \mathcal{J}_Y$.

On notera que le jacobien \mathcal{J}_X est déjà calculé et inversé au cours du schéma d'intégration de Newton-Raphson. Il convient ici de ne conserver que la valeur de ce jacobien calculée lors de l'ultime itération. Le jacobien \mathcal{J}_Y est issu de la dérivation des équations constitutives $\mathcal{R}(X, Y)$ faisant intervenir les variables de pilotage ΔE_{kl} et ΔT et issues du système défini par la prédiction élastique en début d'incrément. On remarquera que ce calcul est aisé car il n'aboutit à des valeurs non nulles que dans le cas du résidu élastique et du résidu de transformation lorsque celle-ci est activée.

3.2.3 Prise en compte des rotations finies

La loi de comportement présentée est écrite dans le cadre des petites déformations. Cette approximation est raisonnable dès lors que les déformations totales restent inférieures à 10 %, ce qui est le cas pour les AMF qui dépassent rarement 7 %. Cependant, cette formulation n'est pas objective dans le cas d'une structure soumise à des rotations de corps rigide, comme dans le cas d'une flexion où la zone transformée agit comme une rotule plastique. Afin de rendre la déformation objective, le code de calcul par éléments finis retenu, `Abaqus` utilise l'algorithme de Hugues et Winget [Hugues et Winget 1980] qui permet la prise en compte de ces rotations dans le calcul des tenseurs des contraintes et des déformations. Dans le cas d'un matériau défini par l'utilisateur, comme c'est le cas avec la sous-fonction `UMAT` que nous utilisons, cette rotation n'est pas appliquée aux variables internes définissant une grandeur tensorielle (c'est le cas de la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$). Une étude effectuée par Hartl *et al.* [Hartl et al. 2008] a montré l'importance de la prise en compte des rotations dans le cas de structures en AMF soumises à des chargements en flexion ou torsion. Notre loi de comportement ayant pour objectif de simuler tout type de chargement, il est impératif de prendre en compte ce cas de figure.

Pour ce faire, il faut prendre en compte le tenseur des contraintes à l'incrément n qui est la somme de la contribution de l'incrément en cours et de l'état de contrainte constaté à l'incrément $n - 1$, auquel une rotation de corps rigide est appliquée :

$$\begin{aligned}\Sigma^n &= \underline{\Sigma}^{n-1} + \Delta\Sigma^n \\ &= Q\Sigma^{n-1}Q^T + \Delta\Sigma^n\end{aligned}\quad (3.34)$$

où Q est le tenseur des rotations calculé à partir de la partie antisymétrique de l'approximation discrète du gradient des vitesses au cours du pas n obtenu par la méthode du point milieu généralisé.

Dans le cas de matériaux isotropes comme ceux pris en compte par le présent modèle, le tenseur élastique d'ordre 4, noté C_{ijkl} , est invariant par rotation de corps rigide. Ainsi, une expression de l'état de contrainte analogue à celle de Hartl *et al.* [Hartl et al. 2008] s'écrit, en négligeant la déformation obtenue par dilatation thermique, petite devant les autres déformations :

$$\Sigma^n = C_n : (\underline{E}_n - \underline{E}_n^{in}) + C_n : (\Delta E_n - \Delta E_n^{in}) \quad (3.35)$$

où \underline{E}_n^{in} représente la déformation inélastique qui, dans notre cas, correspond à la somme de la déformation de transformation et de la déformation d'accommodation des macles. Pour obtenir une expression objective du tenseur des contraintes à l'état n , il suffit d'appliquer une rotation de corps rigide aux tenseurs de déformations. Le code de calcul par éléments finis utilisé (`Abaqus`) propose une gestion des non-linéarités géométriques (le paramètre `NLGEOM` vaut `YES` si les non-linéarités sont prises en compte et `NO` sinon). Avant de passer les tenseurs des déformations \underline{E}_n et des contraintes Σ_n à la sous-fonction `UMAT` qui a pour but d'équilibrer la loi de comportement, le solveur leur applique une rotation de corps rigide. Cependant, dans le cas de variables internes tensorielles, cette rotation de corps rigide n'est pas appliquée, c'est donc à l'utilisateur de la sous-fonction de la faire. Dans le présent modèle, la déformation inélastique objective s'écrit :

$$\underline{E}_n^{in} = f\bar{\varepsilon}_n^T + f^{FA}\bar{\varepsilon}_n^{tw} \quad (3.36)$$

Étant donné que la déformation moyenne d'accommodation inélastique des macles est déduite directement du tenseur des contraintes, cette grandeur est objective. Il reste à actualiser la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$, ceci est fait dès le lancement de la sous-fonction `UMAT` :

$$\bar{\varepsilon}_n^T = Q\bar{\varepsilon}_n^T Q^T \quad (3.37)$$

Cette actualisation des tenseurs de déformation permet de travailler, au cours de chaque incrément de chargement, avec des variables définies objectivement.

3.3 IMPLÉMENTATION DES MODÈLES 2D CONTRAINTES PLANES ET AXISY-MÉTRIQUE

Si le modèle présenté dans la section précédente offre une description en 3D du comportement des alliages à mémoire de forme, beaucoup d'applications peuvent être étudiées en adoptant des simplifications géométriques. Ainsi, dans le cas de solides de révolution tels que les anneaux d'accouplement, il est possible de définir un modèle de comportement axisymétrique. Les structures minces telles que les films ou encore les micro-actionneurs taillés dans une plaque fine peuvent être vus, au moment de les dimensionner, comme des structures présentant un état plan de contrainte.

Il est alors possible, en se basant sur le modèle complet en trois dimensions, d'en dériver des modèles plus simples pour les cas axisymétrique et contraintes planes. Ces développements supplémentaires sont nécessaires afin d'assurer la compatibilité de la routine UMAT avec les éléments de structure axisymétriques et 2D contraintes planes car ces derniers stockent les composantes des tenseurs de contrainte et de déformation dans des vecteurs présentant une taille différente de ceux adoptés dans le modèle 3D.

3.3.1 Simplifications adoptées pour les modèles 2D

Modèle axisymétrique

Dans un problème axisymétrique exprimé dans un repère cylindrique (r, θ, z) , les déplacements, par condition de symétrie, sont indépendants de θ d'une part, et ne présentent pas de composante suivant θ d'autre part :

$$\begin{cases} u_r = u_r(r, z) \\ u_\theta = 0 \\ u_z = u_z(r, z) \end{cases} \quad (3.38)$$

Le tenseur des déformations obtenu est de la forme :

$$E = \begin{pmatrix} u_{r,r} & 0 & \frac{1}{2}(u_{r,z} + u_{z,r}) \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ \frac{1}{2}(u_{r,z} + u_{z,r}) & 0 & u_{z,z} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

Dans le cadre d'un calcul par la méthode des éléments finis, u_r est généralement considéré comme le degré de liberté numéro 1 et u_z le degré de liberté numéro 2. De ce fait, le tenseur des déformations devient :

$$E_{EF} = \begin{pmatrix} u_{r,r} & \frac{1}{2}(u_{r,z} + u_{z,r}) & 0 \\ \frac{1}{2}(u_{r,z} + u_{z,r}) & u_{z,z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{u_r}{r} \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Dans ce cas de figure, seules les composantes non nulles sont transmises à la sous-fonction UMAT. En retour, celle-ci doit fournir les composantes Σ_{rr} , $\Sigma_{\theta\theta}$, Σ_{zz} et Σ_{rz} du tenseur des contraintes. Ceci correspond aux composantes non nulles de ce tenseur.

De ce fait, dans le cas axisymétrique, il est possible d'utiliser directement le modèle développé dans le cas 3D en complétant le tenseur des déformations donné en entrée par des valeurs nulles pour les composantes non fournies par le code de calcul par éléments

finis. Une attention particulière doit tout de même être portée sur l'ordre des composantes, passées en convention de Voigt, des tenseurs des déformations et des contraintes ainsi que des modules tangents thermomécaniques retournés.

Modèle contraintes planes

Un problème présentant un état plan de contraintes s'exprime, dans le repère cartésien, par un tenseur des contraintes sous la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & 0 \\ \Sigma_{12} & \Sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

À ce tenseur des contraintes est associé, par le biais de la loi de comportement du matériau, un tenseur des déformations de la forme :

$$E = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & 0 \\ E_{12} & E_{22} & 0 \\ 0 & 0 & E_{33} \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

Toute la difficulté de la modélisation en supposant un état plan de contrainte vient du fait que la composante 33 du tenseur des déformations est non nulle. En effet, dans le cas d'un calcul par éléments finis en deux dimensions, seules les composantes u_1 et u_2 du champ de déplacement sont considérées. Il n'est donc pas possible de connaître la composante 33 du tenseur des déformations. S'il est possible de la déterminer à partir des composantes 11 et 22 dans le cas d'un solide élastique linéaire (utilisation du coefficient de Poisson), ou d'un matériau isovolume (hypothèse d'un tenseur des déformations déviatorique), c'est plus complexe pour notre modèle de comportement pour les AMF puisque celui-ci fait intervenir une déformation élastique à laquelle s'ajoute des déformations déviatoriques.

De plus, la connaissance de la composante 33 du tenseur des déformations est primordiale car la loi de comportement fait intervenir la notion de déformation équivalente nécessitant la connaissance de l'intégralité du tenseur. Deux solutions sont envisageables pour régler ce problème :

1. Nous avons à notre disposition une routine permettant, à partir d'une donnée d'entrée formée des 6 composantes du tenseur des déformation en 3 dimensions, permet de calculer les 6 composantes du tenseur des contraintes en sortie. Sachant que dans le cadre d'un calcul 2D, le code de calcul ne fournit que les trois composantes E_{11} , E_{22} et E_{12} , il est possible d'effectuer un calcul supplémentaire à la suite de celui de la routine de comportement qui itérerait afin d'obtenir la valeur de E_{33} permettant un tenseur des contraintes en sortie tel que $\Sigma_{i3} = 0$. Cette solution implique donc des opérations numériques supplémentaires ainsi que l'ajout d'équations additionnelles pour respecter les hypothèses faites sur la forme du tenseur des contraintes. Cette approche ajoute une complexité numérique supplémentaire nuisible à la robustesse de l'outil recherché. De plus, l'ajout d'équations engendre des coûts de calcul supplémentaires, ce qui va à l'encontre d'une approche ayant pour but de simplifier le dimensionnement d'une structure fine.
2. La décomposition des déformations fait apparaître une déformation élastique, dont la composante E_{33}^{el} peut se déterminer à partir des deux autres composantes normales, et deux déformations à caractère déviatorique ($\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ et $\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$) où les trois composantes normales sont dépendantes. Il est alors possible de connaître toutes les composantes

de tous les tenseurs. Cependant, l'hypothèse d'un état plan de contraintes doit être prise en compte directement dans la loi de comportement, notamment en ce qui concerne le calcul du déviateur des contraintes. Cette solution n'engendre pas de calcul numérique supplémentaire et permet de réduire les équations tensorielles à seulement trois composantes au lieu de six dans le cas 3D. C'est donc cette dernière solution qui est retenue.

3.3.2 Notation de Voigt en 2D contraintes planes

Notation des contraintes et des déformations

La modélisation adoptée en supposant un état plan de contraintes, implique que les grandeurs tensorielles ne font intervenir que trois composantes. Afin de réduire la quantité de mémoire nécessaire à la résolution numérique, ces dernières vont être notées en adoptant la convention de Voigt. Ainsi, le tenseur des contraintes s'écrit :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & 0 \\ \Sigma_{12} & \Sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{matrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{12} \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{matrix} \right\} \quad (3.43)$$

Pour le tenseur des déformations, notons que la composante 33 n'est pas représentée explicitement dans la notation de Voigt et que la composante de cisaillement est multipliée par 2 :

$$E = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & 0 \\ E_{12} & E_{22} & 0 \\ 0 & 0 & E_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{matrix} E_{11} \\ E_{22} \\ 2E_{12} \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{matrix} \right\} \quad (3.44)$$

La composante transverse du tenseur des déformations est obtenue par addition des composantes transverses des tenseurs des déformations élastique, thermique, de transformation et d'accommodation inélastique des macles :

Déformation élastique : il faut calculer une matrice de souplesse \tilde{S} qui serait l'équivalent du tenseur de souplesse d'ordre 4. Celle-ci permet de calculer le vecteur des déformations élastiques $\{E^{el}\}$ à partir du vecteur des contraintes $\{\Sigma\}$:

$$E_i^{el} = \tilde{S}_{ij} \Sigma_j \quad (3.45)$$

En utilisant la notation de Voigt (déformation de cisaillement comptée deux fois), la matrice de souplesse \tilde{S} s'écrit :

$$\tilde{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

En suivant le même principe, une matrice de rigidité \tilde{C} peut être définie telle que :

$$\Sigma_i = \tilde{C}_{ij} E_j^{el} \quad (3.47)$$

D'où la matrice \tilde{C} :

$$\tilde{C} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Le détail du calcul de ces deux matrices d'élasticité est donné en annexe A.2.1.

Déformation de transformation : la déformation de transformation est supposée se faire à volume constant, ce qui implique $\bar{\varepsilon}_{kk}^T = 0$. Ainsi, pour représenter cette grandeur sous forme vectorielle, on écrit :

$$\bar{\varepsilon}^T = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_{11}^T & \bar{\varepsilon}_{12}^T & 0 \\ \bar{\varepsilon}_{12}^T & \bar{\varepsilon}_{22}^T & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\varepsilon}_{33}^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_{11}^T & \bar{\varepsilon}_{12}^T & 0 \\ \bar{\varepsilon}_{12}^T & \bar{\varepsilon}_{22}^T & 0 \\ 0 & 0 & -(\bar{\varepsilon}_{11}^T + \bar{\varepsilon}_{22}^T) \end{pmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \bar{\varepsilon}_{11}^T \\ \bar{\varepsilon}_{22}^T \\ 2\bar{\varepsilon}_{12}^T \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \bar{\varepsilon}_1^T \\ \bar{\varepsilon}_2^T \\ \bar{\varepsilon}_3^T \end{array} \right\} \quad (3.49)$$

Afin de calculer la déformation moyenne de transformation équivalente $\bar{\varepsilon}_{eq}^T$, il est nécessaire d'introduire une matrice M_1 , correspondant à la métrique du nouvel espace vectoriel défini par la notation de Voigt, qui permet de calculer le produit tensoriel $\bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T$ à partir des représentations vectorielles de $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ tout en prenant en compte la composante $\bar{\varepsilon}_{33}^T$ non nulle :

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T = \left(M_{1ij} \bar{\varepsilon}_j^T \right) \bar{\varepsilon}_i^T \quad (3.50)$$

Cette matrice M_1 s'écrit :

$$M_1 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

Déformation d'accommodation inélastique des macles : cette déformation est directement calculée à partir du tenseur des contraintes par la relation :

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} = H_{ijkl}^{tw} \Sigma_{kl} \quad (3.52)$$

où H^{tw} peut s'apparenter à un tenseur d'élasticité isotrope où $E = \frac{3}{2}H_{tw}$ et $\nu = 0,5$. Une matrice \tilde{H}^{tw} peut être définie, de façon similaire à la matrice \tilde{S} :

$$\tilde{H}^{tw} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3H_{tw}} & -\frac{1}{3H_{tw}} & 0 \\ -\frac{1}{3H_{tw}} & \frac{2}{3H_{tw}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{H_{tw}} \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

Le vecteur représentant la déformation d'accommodation des macles est ainsi obtenu directement à partir de la représentation vectorielle du tenseur des contraintes :

$$\bar{\varepsilon}_i^{tw} = \tilde{H}_{ij}^{tw} \Sigma_j \quad (3.54)$$

On notera que le passage en contraintes planes *via* une réduction directe de la contrainte normale est rendu possible par le fait que les deux déformations $\bar{\varepsilon}^T$ et $\bar{\varepsilon}^{tw}$ sont supposées chacune déviatorique. Si cette hypothèse est justifiée dans le cas de la déformation de transformation où l'étude cristallographique de la transformation martensitique montre que cette dernière se produit à volume quasi-constant, il est à noter que le caractère déviatorique de la déformation d'accommodation des macles est issu d'une hypothèse simplificatrice due à un manque d'informations bibliographiques concernant la description de ce mécanisme de déformation. Les futures évolutions du modèle 3D pourront ainsi rendre plus délicat le passage directe en 2D contrainte planes.

Déformation par dilatation thermique : dans le cas isotrope, la dilatation thermique s'exprime :

$$E^{th} = \left\{ \begin{array}{c} E_{11}^{th} \\ E_{22}^{th} \\ 2E_{12}^{th} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} E_1^{th} \\ E_2^{th} \\ E_3^{th} \end{array} \right\} = \alpha \Delta T \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right\} = \alpha \Delta T \{ \tilde{\delta} \} \quad (3.55)$$

et la composante E_{33}^{th} non nulle vaut $\alpha \Delta T$

Notation des forces thermodynamiques

Les contraintes et déformations ayant été introduites sous notation vectorielle, il est nécessaire d'exprimer les différentes forces thermodynamiques et les équations d'équilibre en adoptant les mêmes conventions.

Équilibre thermoélastique : en formulation 3D, le résidu élastique s'exprime de la façon suivante :

$$R_{\sigma_{ij}} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + \alpha\delta_{ij}\Delta T + f\bar{\varepsilon}_{ij}^T + f^{FA}\bar{\varepsilon}_{ij}^{tw} - E_{ij} \quad (3.56)$$

étant donné que $R_{\sigma_{ij}}$ est homogène à une déformation, il sera représenté sous forme vectorielle avec la convention « déformation » :

$$R_{\sigma} = \left\{ \begin{array}{c} R_{\sigma_{11}} \\ R_{\sigma_{22}} \\ 2R_{\sigma_{12}} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} R_{\sigma_1} \\ R_{\sigma_2} \\ R_{\sigma_3} \end{array} \right\} \quad (3.57)$$

Son expression devient alors :

$$R_{\sigma_i} = \tilde{S}_{ij}\Sigma_j + \alpha\Delta T\tilde{\delta}_i + f\bar{\varepsilon}_i^T + f^{FA}\bar{\varepsilon}_i^{tw} - E_i \quad (3.58)$$

On notera que la déformation globale E_{33} est prise en compte de façon intrinsèque par le biais de la formulation du modèle en 2D contraintes planes.

Force de transformation : en 3D, l'expression de la force thermodynamique de transformation est la suivante :

$$F_f = \Sigma_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2}H_{\bar{\varepsilon}^T}\bar{\varepsilon}_{ij}^T\bar{\varepsilon}_{ij}^T - H_f f - \lambda_0 - \lambda_1 \quad (3.59)$$

La seule difficulté pour transcrire cette égalité en représentation vectorielle consiste à exprimer le produit doublement contracté $\Sigma_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. Grâce à la notation de Voigt, ce produit tensoriel se résume, une fois passé en représentation vectorielle, à un produit scalaire entre les vecteurs $\{\Sigma\}$ et $\{\bar{\varepsilon}^T\}$. La force de transformation s'exprime alors :

$$F_f = \Sigma_i\bar{\varepsilon}_i^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2}H_{\bar{\varepsilon}^T} \left(M_{1ij}\bar{\varepsilon}_j^T \right) \bar{\varepsilon}_i^T - H_f f - \lambda_0 - \lambda_1 \quad (3.60)$$

Force d'orientation : la formulation tridimensionnelle de la force thermodynamique d'orientation est :

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} = \Sigma_{ij}^D - H_{\bar{\varepsilon}^T}\bar{\varepsilon}_{ij}^T - \lambda_{2ij} \quad (3.61)$$

Il faut noter que l'expression de $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$ est homogène à une contrainte et que par conséquent, sa représentation vectorielle se fera selon la convention « contrainte ». De plus, le tenseur $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$ est déviatorique :

$$F_{\bar{\varepsilon}^T} = \left(\begin{array}{ccc} F_{\bar{\varepsilon}_{11}^T} & F_{\bar{\varepsilon}_{12}^T} & 0 \\ F_{\bar{\varepsilon}_{12}^T} & F_{\bar{\varepsilon}_{22}^T} & 0 \\ 0 & 0 & -(F_{\bar{\varepsilon}_{11}^T} + F_{\bar{\varepsilon}_{22}^T}) \end{array} \right) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{c} F_{\bar{\varepsilon}_1^T} \\ F_{\bar{\varepsilon}_2^T} \\ F_{\bar{\varepsilon}_3^T} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} F_{\bar{\varepsilon}_1^T} \\ F_{\bar{\varepsilon}_2^T} \\ F_{\bar{\varepsilon}_3^T} \end{array} \right\} \quad (3.62)$$

Le calcul de la représentation vectorielle du tenseur déviateur des contraintes fait intervenir un opérateur matriciel noté D , tel que :

$$\Sigma_i^D = D_{ij}\Sigma_j \quad (3.63)$$

avec :

$$D = \begin{bmatrix} 2/3 & -1/3 & 0 \\ -1/3 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

De plus, $F_{\bar{\varepsilon}^T}$ étant représentée avec une convention « contrainte », il est nécessaire de convertir le terme $H_{\bar{\varepsilon}^T} \bar{\varepsilon}_{ij}^T$ qui le compose. Pour ce faire, une matrice de passage notée P_1 est utilisée :

$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

On obtient ainsi $\{F_{\bar{\varepsilon}^T}\}$, la représentation vectorielle du tenseur $F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}$:

$$F_{\bar{\varepsilon}_i^T} = D_{ij} \Sigma_j - H_{\bar{\varepsilon}^T} P_{1ij} \bar{\varepsilon}_j^T - \lambda_2 i \quad (3.66)$$

Remarques sur la dérivation

L'implémentation du modèle de comportement 2D avec l'hypothèse d'un état plan de contraintes en utilisant le schéma d'intégration de Newton-Raphson fait intervenir les dérivées des différents termes employés. Une attention particulière doit être apportée à cette dérivation. En effet, les éléments mathématiques de base de la modélisation sont des tenseurs qui sont représentés sous forme de vecteurs. Il faut donc veiller, sachant que les inconnues et les variables de contrôle de notre problème sont entièrement définies par les composantes des vecteurs $\{E\}$, $\{\Sigma\}$ et $\{\bar{\varepsilon}^T\}$ et les scalaires T et f , à dériver les différentes expressions par rapport aux composantes des vecteurs et non uniquement représenter sous forme vectorielle le tenseur obtenu par dérivation de l'expression initiale. Par exemple, si on considère le terme scalaire $\bar{\varepsilon}_{kl}^T \bar{\varepsilon}_{kl}^T$, en notation tensorielle, sa dérivée par rapport à $\bar{\varepsilon}^T$ donne :

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{kl}^T \bar{\varepsilon}_{kl}^T}{\partial \bar{\varepsilon}_{ij}^T} = 2 \bar{\varepsilon}_{ij}^T \quad (3.67)$$

En représentant sous forme vectorielle le tenseur obtenu, on obtient :

$$\begin{Bmatrix} 2 \bar{\varepsilon}_{11}^T \\ 2 \bar{\varepsilon}_{22}^T \\ 4 \bar{\varepsilon}_{12}^T \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \bar{\varepsilon}_1^T \\ 2 \bar{\varepsilon}_2^T \\ 2 \bar{\varepsilon}_3^T \end{Bmatrix} \quad (3.68)$$

Si maintenant, on part de l'expression de $\bar{\varepsilon}_{kl}^T \bar{\varepsilon}_{kl}^T$ calculée directement à partir de la représentation vectorielle $\{\bar{\varepsilon}^T\}$, comme donné dans l'équation 3.50 :

$$\bar{\varepsilon}_{kl}^T \bar{\varepsilon}_{kl}^T = \left(M_{1ij} \bar{\varepsilon}_j^T \right) \bar{\varepsilon}_i^T \quad (3.69)$$

et que l'on procède à une dérivation par rapport à chaque composante $\bar{\varepsilon}_i^T$:

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}_{kl}^T \bar{\varepsilon}_{kl}^T}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} = 2 M_{1ij} \bar{\varepsilon}_j^T \Rightarrow \begin{Bmatrix} 4 \bar{\varepsilon}_1^T + 2 \bar{\varepsilon}_2^T \\ 4 \bar{\varepsilon}_2^T + 2 \bar{\varepsilon}_1^T \\ \bar{\varepsilon}_3^T \end{Bmatrix} \quad (3.70)$$

La différence entre les deux types de calcul vient du fait que la métrique M_1 , associée au nouvel espace défini par la notation de Voigt, est différente de l'identité. Aussi, lors de la dérivation partielle du produit doublement contracté par rapport à une variance des composantes du tenseur, on obtient la variance conjuguée des composantes du tenseurs.

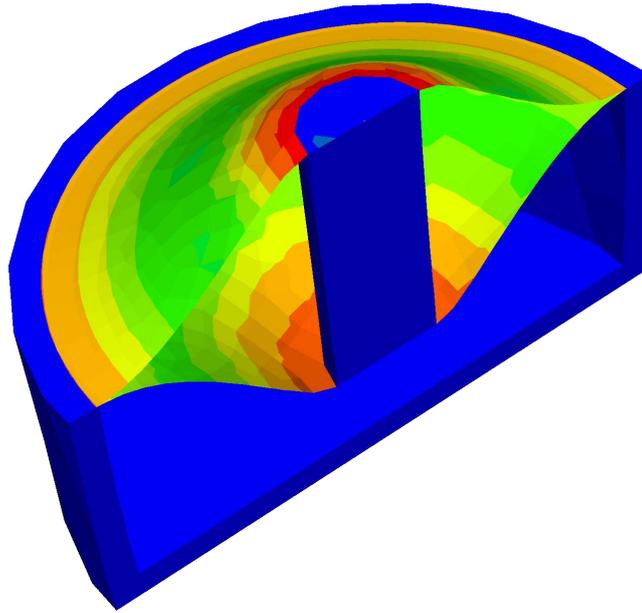


FIG. 3.6 – Exemple de simulation faisant intervenir des éléments de coque : vue en coupe d'une micropompe constituée de deux films minces d'AMF.

Les résultats obtenus sont alors identiques à la variance près. Dans le cadre d'une résolution numérique ayant pour but de calculer les composantes du vecteur $\{\bar{\varepsilon}^T\}$, on adoptera le second type de dérivation alors que pour une dérivation dite « physique » (calcul d'une direction d'écoulement par exemple), c'est le premier type de dérivation qui sera choisi. '

3.3.3 Application : Problème de coques minces (cisaillement transverse)

L'objectif du développement du modèle 2D avec l'hypothèse d'un état plan de contraintes est d'être implémenté dans un code de calcul par éléments finis en vue de dimensionner des structures faisant intervenir des films minces d'AMF comme par exemple du domaine microfluidique (voir fig. 3.6, cas d'une micro-pompe). Pour ce faire, le calcul par éléments finis nécessite l'utilisation d'éléments de type coque formulés en contraintes planes.

L'utilisation d'éléments structuraux de type coque fait intervenir des hypothèses simplificatrices :

- hypothèse des sections droites : les points matériels situés sur une normale à la surface moyenne non déformée restent sur une droite dans la configuration déformée. Les déplacements u et v (suivant x et y) d'un point quelconque x,y,z varient linéairement en z et le déplacement transversal (suivant z) n'est fonction que de x et y . Cette hypothèse a été proposée par plusieurs auteurs [Reissner 1945, Mindlin 1951];
- hypothèse des contraintes planes $\Sigma_{zz} = 0$. Dans le cas général, les composantes de cisaillement transverse Σ_{iz} avec $i \neq z$ sont considérées comme non nulles;
- prise en compte d'une loi de comportement de cisaillement transverse dépendante de facteurs de correction déterminés *a priori* par des considérations d'équivalences énergétiques.

C'est ce dernier point qui peut poser problème dans le cas de matériaux présentant une loi de comportement fortement non linéaire comme c'est le cas des alliages à mémoire de forme. Pour simplifier l'introduction du facteur de correction k de cisaillement transverse,

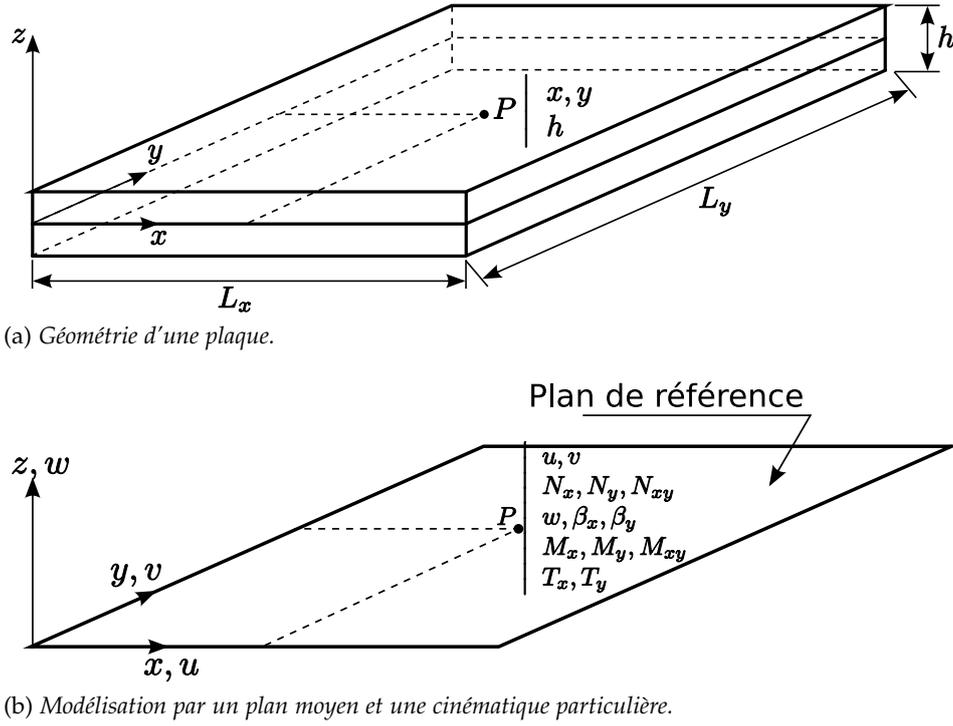


FIG. 3.7 – Description d'une plaque.

il est possible de considérer la théorie des plaques uniquement. Ainsi, cette théorie fait intervenir (voir fig. 3.7) :

- cinq variables cinématiques indépendantes (les déplacements u et v dans le plan de référence $z = 0$, le déplacement transversal w ainsi que les rotations β_x et β_y de la normale à la surface moyenne dans les plans xz et yz)
- trois efforts normaux N_x, N_y, N_{xy} , trois moments de flexion M_x, M_y et M_{xy} ainsi que deux efforts tranchants T_x et T_y

Le plan xy est appelé *plan moyen de la plaque* ou plan de référence (fig. 3.7b). Dans le cas de plaques homogènes isotropes, la théorie retenue dépend des caractéristiques géométriques. Ainsi, les hypothèses de Mindlin seront retenues si $4 \leq L/h \leq 20$ et celles de Kirchhoff si $L/h > 20$ avec L une dimension caractéristique dans le plan xy . La théorie de Kirchhoff peut ainsi être considérée comme un cas particulier de la théorie de Reissner/Mindlin dans le cas d'une influence faible du cisaillement transversal. Dans le cas de plaques homogènes, un facteur de correction de cisaillement transversal k généralement admis est de $5/6$ [Bollé 1947].

Dans le cadre d'une formulation en petits déplacements, les déformations linéaires en un point (x, y, z) s'écrivent :

$$\{\varepsilon(x, y)\} = \{e(x, y)\} + z \{\chi(x, y)\} \quad (3.71)$$

avec :

$$\begin{aligned} \{\varepsilon\} &= \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} & \{e\} &= \begin{Bmatrix} u_{,x} \\ v_{,y} \\ u_{,y} + v_{,x} \end{Bmatrix} \\ \{\chi\} &= \begin{Bmatrix} \beta_{x,x} \\ \beta_{y,y} \\ \beta_{x,y} + \beta_{y,x} \end{Bmatrix} & \{\gamma\} &= \begin{Bmatrix} \beta_x + w_{,x} \\ \beta_y + w_{,y} \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.72)$$

Des relations entre les résultantes des efforts et les déformations sont ensuite posées [Batoz et Dhatt 1990] :

$$\begin{aligned}\{N\} &= [H_m] \{e\} + [H_{mf}] \{\chi\} \\ \{M\} &= [H_{mf}] \{e\} + [H_f] \{\chi\} \\ \{T\} &= [H_c] \{\gamma\}\end{aligned}\quad (3.73)$$

Les matrices $[H_m]$, $[H_{mf}]$ et $[H_f]$ sont définies de façon intégrale sur l'épaisseur de la plaque considérée :

$$\begin{aligned}[H_m] &= \int_{-t}^t [H] dz \\ [H_{mf}] &= \int_{-t}^t [H] z dz \\ [H_f] &= \int_{-t}^t [H] z^2 dz\end{aligned}\quad (3.74)$$

Dans les relations précédentes, la matrice $[H]$ vaut,

$$H = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix}\quad (3.75)$$

dans le cas de l'élasticité isotrope. On notera par ailleurs que $[H] = [\tilde{C}]$. Pour un comportement non linéaire, la matrice $[H]$ est remplacée par le module tangent mécanique de la loi adoptée (3.2.2) formulée dans le cadre de l'hypothèse des contraintes planes. La matrice $[H_c]$, quant à elle, permet de prendre en compte le cisaillement transverse. Pour une plaque élastique isotrope, elle s'exprime :

$$[H_c] = \frac{5}{6} h \frac{E}{2(1+\nu)} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\quad (3.76)$$

En non linéaire, comme c'est le cas pour le présent modèle, il faut veiller à ce que l'hypothèse de travail reste valide. En effet, si la formulation adoptée (hypothèse des contraintes planes) ne permet pas de prendre en compte le cisaillement transverse, ce dernier est alors déterminé par la correction $[H_c]$. Celle-ci est *a priori* évaluée de façon élastique. De ce fait, la modélisation de structures minces en utilisant les éléments standards du code *Abaqus* et en introduisant une loi de comportement spécifique *via* la routine *UMAT* doit se rapprocher le plus possible de l'hypothèse de Kirchhoff ($L/h > 20$). Ainsi, l'approximation de la rigidité en cisaillement transverse par un module élastique ne vient pas perturber le résultat obtenu.

3.4 VALIDATION DU MODÈLE ET DE SON IMPLÉMENTATION

Le modèle présenté et ses différentes déclinaisons (3D, 2D axisymétrique, 2D contraintes planes) ont pour objectif de simuler tous les types de chargements thermomécaniques, des uniaxiaux aux non proportionnels. Il est alors nécessaire de disposer d'une base de données expérimentale afin de pouvoir comparer les prédictions du modèle avec les réponses expérimentales d'une éprouvette. Les paramètres permettant la définition des équations constitutives doivent pouvoir être évalués à partir d'essais simples (typiquement des essais

uniaxiaux) et une méthode d'identification doit être établie. Il est également utile de réaliser des simulations purement numériques pour tester la robustesse du modèle et de son implémentation.

Deux bases de données sont utilisées dans le cadre de cette étude :

- Celle établie par l'équipe de l'IP ASCR de Prague qui contient des essais de chargement isothermes effectués sur des fils de NiTi pour différentes températures, des essais de retour contraint à différentes contraintes et des essais de traction-torsion. Cette base a été réalisée à l'occasion d'un *workshop* sur la simulation des AMF [Sittner 2008] ayant pour but de comparer différents modèles.
- Celle de Grabe et Bruhns [Grabe et Bruhns 2009] portant sur des tubes minces de NiTi. Dans cette base de données, c'est l'aspect multiaxial et le sens du trajet de chargement qui ont été mis en avant.

3.4.1 Procédure d'identification des paramètres

Un point important à considérer lors de la mise en place d'une loi de comportement concerne la détermination des paramètres intrinsèques au matériau et les moyens à mettre en œuvre pour y parvenir. En effet, un modèle permettant la description de phénomènes complexes implique un jeu de paramètres assez large et dont le nombre est liée à la diversité de comportements pris en compte. Ils doivent toutefois être facilement identifiables par l'utilisateur d'un code de calcul par éléments finis dans lequel un tel modèle est implémenté, et ce avec un nombre d'essais minimal. Il est tout de même quelquefois nécessaire de poser des hypothèses sur la valeur de certains paramètres à partir de données bibliographiques extrapolées afin de réduire la campagne d'essais. Ceci met en avant l'importance d'utiliser des paramètres ayant un sens « physique » de manière à pouvoir juger de la valeur qui leur sera allouée.

Les paramètres du présent modèle peuvent être identifiés à partir de quatre essais isothermes uniaxiaux. Il s'agit d'essais uniquement en traction sauf un qui devra obligatoirement présenter une phase de compression afin d'évaluer le paramètre lié à la dissymétrie de comportement des AMF. Il faudra également ajouter un essai de DSC² ou de résistivité électrique sur un échantillon présentant une structure martensitique auto-accommodée afin de pouvoir évaluer le paramètre lié à la stabilisation de la martensite. Certains paramètres peuvent être considérés comme « standard » comme le module d'Young E et la déformation maximale de transformation à saturation en traction ε_{trac}^T . Ils sont bien souvent fournis par l'élaborateur du matériau ou facilement identifiables à partir d'un essai de traction unique. En revanche, d'autres paramètres ont été introduits directement dans la formulation thermodynamique et ne peuvent être mesurés que de façon indirecte. C'est notamment le cas des valeurs critiques des forces thermodynamiques qu'il faut lier de façon univoque à des grandeurs mesurables.

Le principe d'identification utilisé ici consiste à isoler les différents mécanismes de déformation. Ainsi, un essai uniaxial en superélasticité permet de définir les paramètres relatifs à la résolution de l'équation de la transformation de phase (ex : H_f), alors que pour les essais de réorientation de martensite, seule l'équation liée à la réorientation des variantes nécessite d'être considérée (ex : détermination du paramètre $H_{\bar{e}T}$). Il faut noter que la procédure d'identification ne nécessite pas l'utilisation d'une méthode complexe puisque l'ensemble des paramètres peut être déterminé par la mesure de niveaux de contrainte particuliers ou de pentes caractéristiques sur la courbe contrainte-déformation.

Les paramètres du modèle sont classés en cinq catégories :

²Differential Scanning Calorimetry

1. Les paramètres indépendants de la transformation martensitique comme le module d'Young E , le coefficient de Poisson ν et le coefficient de dilatation thermique α qui sont par ailleurs considérés identiques dans les deux phases.
2. Les paramètres reliés à l'énergie chimique : il s'agit de la température d'équilibre T_0 et des paramètres prenant en compte la dépendance des températures de transformation vis-à-vis de l'état de contrainte B , B_d et B_r . Ainsi, en considérant un test de traction uniaxiale, la composante non nulle de contrainte est notée Σ_{11} et ε_{trac}^T est la valeur de déformation de transformation maximale observée. En écrivant les critères de transformation avec $f = 0$, ce qui correspond au début de la transformation directe et à la fin de la transformation inverse dans le cas d'un cycle complet, il vient, pour le critère de transformation directe :

$$\Sigma_{11}^S A \rightarrow M \varepsilon_{trac}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2} H_{\bar{\varepsilon}^T} \varepsilon_{trac}^T \varepsilon_{trac}^T = F_f^{max} + (B_d - B)(T - T_0) - H_s \varepsilon_{trac}^T \quad (3.77)$$

et pour le critère de transformation inverse :

$$\Sigma_{11}^F M \rightarrow A \varepsilon_{trac}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2} H_{\bar{\varepsilon}^T} \varepsilon_{trac}^T \varepsilon_{trac}^T = -F_f^{max} + (B_r - B)(T - T_0) - H_s \varepsilon_{trac}^T \quad (3.78)$$

En supposant un chargement thermique à contrainte nulle ($T = M_s$ en charge et $T = A_f$ en décharge), on obtient :

$$F_f^{max} = B_d(T_0 - M_s) = -B_r(T_0 - A_f) \quad (3.79)$$

d'où l'expression de T_0 :

$$T_0 = \frac{B_d M_s + B_r A_f}{B_d + B_r} \quad (3.80)$$

Dans le cas de martensite apparaissant totalement orientée ($\bar{\varepsilon}_{eq}^T = \varepsilon_{trac}^T$), on a :

$$\begin{aligned} \Sigma_{11} \varepsilon_{trac}^T - B_d(T - T_0) &= C_1^{te} \\ \Sigma_{11} \varepsilon_{trac}^T - B_r(T - T_0) &= C_2^{te} \end{aligned} \quad (3.81)$$

Les paramètres B_d et B_r peuvent alors s'écrire en fonction des pentes de transformation $b_{d\ trac}$ et $b_{r\ trac}$. Ces dernières correspondent respectivement à la transformation directe et inverse pour des cas où la martensite apparaît orientée à saturation (voir fig. 3.8) suite à un chargement en traction uniaxial :

$$\begin{aligned} B_d &= b_{d\ trac} \varepsilon_{trac}^T \\ B_r &= b_{r\ trac} \varepsilon_{trac}^T \end{aligned} \quad (3.82)$$

Finalement, les paramètres à mesurer sont $b_{d\ trac}$, $b_{r\ trac}$, M_s et A_f .

3. Les paramètres liés aux valeurs critiques des forces thermodynamiques : trois valeurs sont à identifier : la force maximale de transformation F_f^{max} , la force minimale de transformation F_f^{min} et la force critique d'orientation $F_{\bar{\varepsilon}^T}^{max}$. L'équation 3.79 donne une expression de F_f^{max} en fonction d'autres paramètres. F_f^{min} s'identifie sur une courbe de traction superélastique présentant une boucle à saturation et une boucle partielle (voir fig. 3.9). Il faut alors identifier la contrainte de début de transformation inverse dans chacun des cycles : $\Sigma_{11\ partiel}$ et $\Sigma_{11\ complet}$. Il faut de plus repérer la fraction de martensite $f_{partiel}$ atteinte par la boucle interne (voir fig. 3.9). On a alors :

$$\Sigma_{11\ partiel} - \Sigma_{11\ complet} + H_f(1 - f_{partiel}) = 2(1 - f_{partiel}) \left(F_f^{max} - F_f^{min} \right) \quad (3.83)$$

La grandeur $f_{partiel}$ peut se mesurer en faisant l'hypothèse, dans le cas d'un chargement superélastique, que la déformation de transformation mesurée est proportionnelle à la fraction volumique de martensite. De plus, le paramètre utilisé dans ce modèle pour caractériser les boucles internes est le ratio r_f défini par :

$$r_f = 1 - \frac{F_f^{min}}{F_f^{max}} \quad (3.84)$$

Cette formulation permet, en posant $r_f = 0$, de faire disparaître le phénomène de boucles internes. De plus, s'il n'est pas possible de réaliser un essai présentant une boucle interne, il est possible de n'évaluer que F_f^{max} à partir des températures et des pentes de transformation.

Enfin, un essai de traction uniaxiale sur un matériau initialement martensitique présentant une structure auto-accommodée permet de mesurer la contrainte limite de réorientation Σ^{reor} (fig. 3.10) qui est égale, selon le critère d'orientation adopté (eq. 2.51), au paramètre matériau $F_{\bar{\epsilon}^T}^{max}$.

4. Les paramètres de déformation à saturation : trois valeurs distinctes de déformation de transformation à saturation sont à identifier afin d'alimenter le modèle. Les déformations à saturation en traction ϵ_{trac}^T et en compression ϵ_{comp}^T peuvent être mesurées sur un essai de traction-compression uniaxial superélastique. En revanche, la déformation à saturation de la martensite auto-accommodée ϵ_{trac}^{TFA} est mesurée à partir d'un essai de traction sur un matériau initialement martensitique dont les variantes présentent une structure auto-accommodée (voir fig. 3.10).
5. Les paramètres d'interaction : ils sont au nombre de quatre. H_f représente les interactions entre les variantes de martensite. Il peut être déterminé lors d'un chargement superélastique sur un cycle de traction jusqu'à saturation et relâchement. En considérant les contraintes $\Sigma_{11 A \rightarrow M}^s$ et $\Sigma_{11 A \rightarrow M}^f$, qui correspondent respectivement aux contraintes de début et de fin de transformation directe, on peut écrire le critère de transformation :

$$\begin{aligned} F_f^{max} - H_s \epsilon_{trac}^T &= \Sigma_{11 A \rightarrow M}^s \epsilon_{trac}^T - B_d (T - T_0) - \frac{1}{2} H_{\bar{\epsilon}^T} \epsilon_{trac}^T \epsilon_{trac}^T \\ F_f^{max} - H_s \epsilon_{trac}^T &= \Sigma_{11 A \rightarrow M}^f \epsilon_{trac}^T - B_d (T - T_0) - H_f - \frac{1}{2} H_{\bar{\epsilon}^T} \epsilon_{trac}^T \epsilon_{trac}^T \end{aligned} \quad (3.85)$$

On peut alors en déduire l'expression de H_f :

$$H_f = \left(\Sigma_{11 A \rightarrow M}^f - \Sigma_{11 A \rightarrow M}^s \right) \epsilon_{trac}^T \quad (3.86)$$

De plus, si on mesure la pente de la courbe contrainte-déformation au niveau du plateau de transformation, on obtient la relation : $\left(\frac{\Delta \Sigma}{\Delta E} \right)_f = \frac{H_f}{\epsilon_{trac}^T{}^2}$. Le paramètre $H_{\bar{\epsilon}^T}$ se détermine de la même manière en considérant une courbe de traction sur un matériau martensitique présentant une structure auto-accommodée. Si $\Sigma_{11 O}^s$ et $\Sigma_{11 O}^f$ sont respectivement les contraintes de début et de fin d'orientation et $\Sigma_{ij O}^{fD}$ le tenseur déviateur associé à $\Sigma_{ij O}^f$, le critère d'orientation devient :

$$F_{\bar{\epsilon}^T}^{max} = \Sigma_{11 O}^s = \left| \Sigma_{ij O}^{fD} - H_{\bar{\epsilon}^T} \epsilon_{trac}^T \right|_{\sigma} \quad (3.87)$$

L'expression de $H_{\bar{\epsilon}^T}$ est alors donnée par la relation :

$$H_{\bar{\epsilon}^T} = \frac{3 \Sigma_{11 O}^f - \Sigma_{11 O}^s}{2 \epsilon_{trac}^T} \quad (3.88)$$

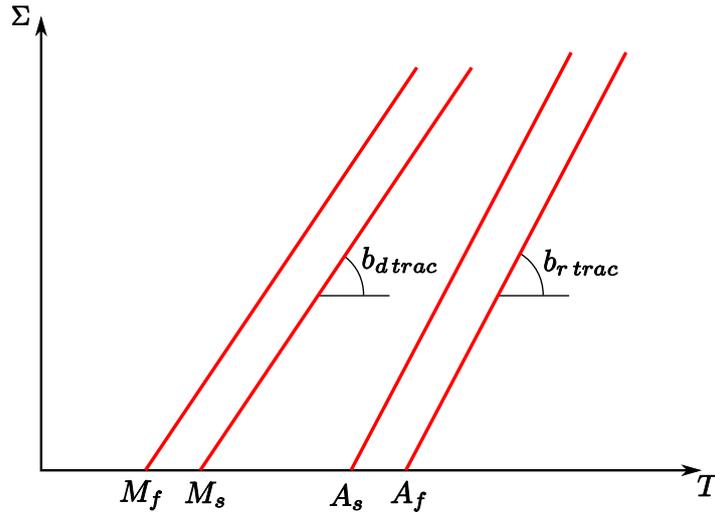


FIG. 3.8 – Identification des paramètres matériaux : pentes de transformation directe et inverse.

ou encore par une mesure de la pente contrainte-déformation du plateau de réorientation $\left(\frac{\Delta\Sigma}{\Delta E}\right)_{\bar{\varepsilon}^T} = \frac{3}{2}H_{\bar{\varepsilon}^T}$.

De la même manière, le paramètre d'interaction H_{twin} est identifié à partir d'un essai de traction sur un matériau martensitique auto-accommodé, en considérant la déformation d'accommodation inélastique des macles E^{tw} correspondant à un niveau de contrainte égal à la limite de réorientation des variantes de martensite Σ_{110}^s . La déformation totale à ce niveau de contrainte est alors uniquement composée de déformation élastique et de déformation d'accommodation des macles. La relation $\Sigma_{ijO}^{s,D} - H_{twin}\bar{\varepsilon}_{trac}^{tw} = 0$ issue du critère d'équilibre du processus d'accommodation des macles permet d'établir l'expression de H_{twin} :

$$H_{twin} = \frac{3}{2} \frac{\Sigma_{110}^s}{E^{tw}} \quad (3.89)$$

En ce qui concerne le paramètre H_s caractéristique de la stabilisation de la martensite suite à une prédéformation, il faut connaître les températures de transformation A_f et A'_f correspondant respectivement aux températures de transformation inverse obtenues à partir d'un échantillon martensitique présentant une structure auto-accommodée et d'un échantillon martensitique orienté à saturation suite à un chargement en traction. Les relations suivantes sont alors obtenues en appliquant le critère de transformation inverse dans chaque cas :

$$\begin{aligned} -H_f &= -F_f^{max} + B_r (A_f - T_0) \\ -H_f - \frac{1}{2}H_{\bar{\varepsilon}^T}\varepsilon_{trac}^T\varepsilon_{trac}^T &= -F_f^{max} + B_r (A'_f - T_0) - H_s\varepsilon_{trac}^T \end{aligned} \quad (3.90)$$

On en déduit l'expression de H_s :

$$H_s = \frac{B_r}{\varepsilon_{trac}^T} (A'_f - A_f) + \frac{1}{2}H_{\bar{\varepsilon}^T}\varepsilon_{trac}^T \quad (3.91)$$

Ainsi, pour caractériser tous les paramètres matériau du modèle, les essais suivants doivent être réalisés :

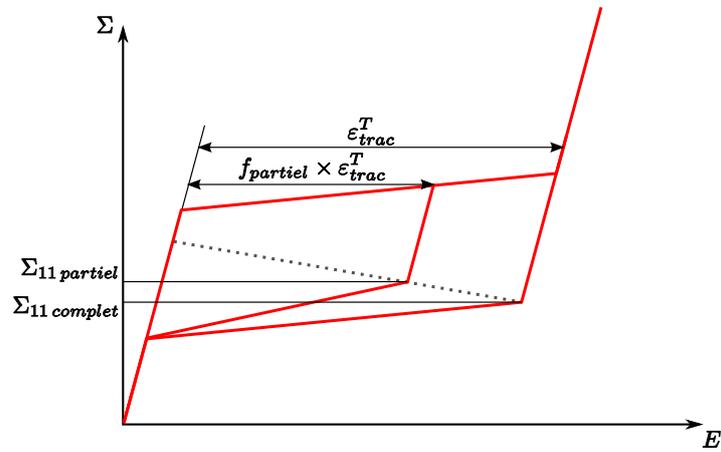


FIG. 3.9 – Identification des paramètres matériaux : paramètres liés à la modélisation des boucles internes.

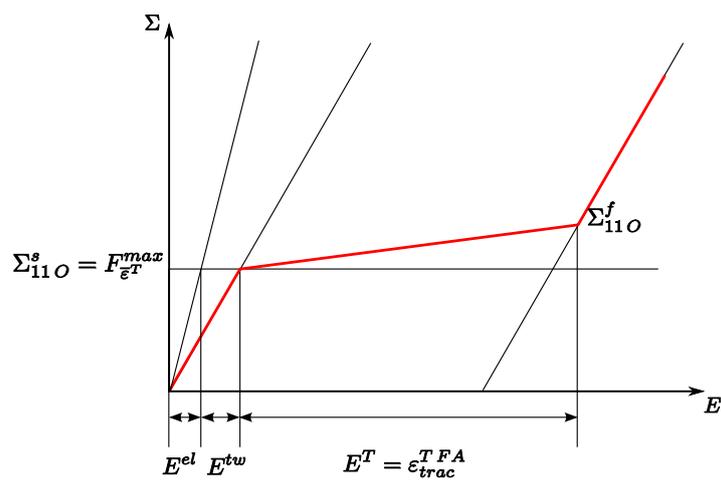


FIG. 3.10 – Identification des paramètres matériaux : essai de traction sur de la martensite formée auto-accommodée.

Paramètre	Unité	Signification
E	MPa	Module d'Young
ν		Coefficient de Poisson
α	$^{\circ}\text{C}^{-1}$	Coefficient de dilatation thermique
ε_{trac}^T		Valeur à saturation de la déformation de transformation en traction
ε_{trac}^{TFA}		Valeur à saturation de la déformation de transformation en traction à partir de la martensite présentant une structure auto-accommodée
ε_{comp}^T		valeur à saturation de la déformation de transformation en compression
$b_{d\,trac}$	MPa / $^{\circ}\text{C}$	Pente de transformation directe en traction dans le pseudo-diagramme de phase
$b_{r\,trac}$	MPa / $^{\circ}\text{C}$	Pente de transformation inverse en traction dans le pseudo-diagramme de phase
M_s	$^{\circ}\text{C}$	Température de début de transformation austénite \rightarrow martensite
A_f	$^{\circ}\text{C}$	Température de fin de transformation martensite \rightarrow austénite
r_f		Coefficient d'amplitude des boucles internes
$F_{\varepsilon^T}^{max}$	MPa	Contrainte de réorientation des variantes
H_f	MPa	Coefficient de pseudo-écrouissage de la transformation de phase
H_{ε^T}	MPa	Coefficient de pseudo-écrouissage de réorientation
H_{twin}	MPa	Coefficient de pseudo-écrouissage d'accommodation des macles
H_s	MPa	Coefficient de stabilisation de la martensite

TAB. 3.1 – Récapitulatif des paramètres du modèle

- 3 essais de traction uniaxiaux à l'état superélastique afin de construire le pseudo-diagramme de phase à partir des points de début et de fin de transformation. Une de ces courbes pourra servir à identifier le paramètre d'interaction H_f et les paramètres de force critique de transformation ;
- Une courbe de réorientation à partir de martensite auto-accommodée afin d'identifier les paramètres du phénomène d'orientation ;
- Un essai de DSC ou de résistivité électrique afin de déterminer les températures de transformation de la martensite auto-accommodée et ainsi de calculer le paramètre de stabilisation de la martensite ;
- Un essai de traction-compression afin d'évaluer le paramètre de dissymétrie.

Le tableau 3.1 dresse la liste de tous les paramètres du modèle ainsi que leur signification et le tableau 3.2 propose une liste de valeurs usuelles des paramètres matériaux.

E (MPa)	ν	α ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	ε_{trac}^T	ε_{trac}^{TFA}	ε_{comp}^T
70 000	0,3	8.10^{-6}	0,05	0,04	0,04
$b_{d\,trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	$b_{r\,trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	M_s ($^{\circ}\text{C}$)	A_f ($^{\circ}\text{C}$)	r_f	
5	6	20	50	0,6	
F_{ε}^{max} (MPa)	H_f (MPa)	$H_{\varepsilon T}$ (MPa)	H_{twin} (MPa)	H_s (MPa)	
100	4	1 000	40 000	50	

TAB. 3.2 – Valeurs usuelles des paramètres matériaux.

3.4.2 Étude de sensibilité aux paramètres

Même si les paramètres du modèle, déterminés selon la méthode proposée, sont issus de tests uniaxiaux, il seront utilisés dans le description de comportements multiaxiaux. De plus, la plupart des valeurs déterminées à partir des courbes de traction-compression (paramètres d'interaction, valeur des forces critiques, ...) le sont à partir d'expressions qui font intervenir les déformations de transformation à saturation en traction et compression pour la martensite formée orientée et en traction pour la martensite formée avec une structure auto-accommodée. De ce fait, la mesure des paramètres ε_{trac}^T , ε_{comp}^T et ε_{trac}^{TFA} est un point critique dans le processus d'évaluation des paramètres matériaux. Afin d'évaluer la sensibilité de la réponse du modèle à ces paramètres, une série de simulations a été réalisée en comparant la réponse proposée par le modèle pour différents chargements avec un jeu de paramètres de référence (voir tab. 3.2) et celle obtenue avec un jeu de paramètres où une erreur de mesure de l'ordre de 10 % aurait été faite lors de l'évaluation des paramètres ε_{trac}^T , ε_{comp}^T et ε_{trac}^{TFA} .

Les simulations réalisées sont les suivantes :

- Construction d'un pseudo-diagramme de phase mécanique : pour différentes valeurs de température, un chargement en traction simple puis retour est effectué. Les contraintes de début et de fin de transformation directe et inverse sont notées et reportées dans un repère (T, Σ) . La même chose est réalisée sur des chargements en compression puis retour ;
- Construction d'un pseudo-diagramme de phase thermique : pour différentes valeurs de contrainte en traction et en compression, un refroidissement jusqu'à transformation martensitique complète est effectué, suivi, d'un chauffage jusqu'à un retour vers un matériau totalement austénitique. Les températures de début et de fin de transformation directe et inverse sont notées et reportées dans l'espace (T, Σ) ;
- Construction de la surface de charge en transformation dans l'espace des contraintes normales : le matériau initialement austénitique est soumis à un chargement en contrainte de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \begin{cases} \Sigma_{11} = A \cos \theta \\ \Sigma_{22} = A \sin \theta \end{cases} \quad \forall \theta \in [0, 2\pi[\quad (3.92)$$

Les points de début et de fin de transformation sont reportés dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$;

- Construction de la surface de charge en transformation dans l'espace des contraintes normale et de cisaillement : le matériau initialement austénitique est soumis à un chargement en contrainte de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} & 0 \\ \Sigma_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \begin{cases} \Sigma_{11} = A \cos \theta \\ \Sigma_{12} = A \sin \theta \end{cases} \quad \forall \theta \in [0, 2\pi[\quad (3.93)$$

Les points de début et de fin de transformation sont reportés dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{12})$;

- Construction de la surface de charge en orientation des variantes dans l'espace des contraintes normales : le matériau initialement martensitique et présentant une structure auto-accommodée est soumis à un chargement en contrainte de la forme :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \Sigma_{11} = A \cos \theta \\ \Sigma_{22} = A \sin \theta \end{cases} \quad \forall \theta \in [0, 2\pi[\quad (3.94)$$

Les points de début et de fin de d'orientation sont reportés dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$;

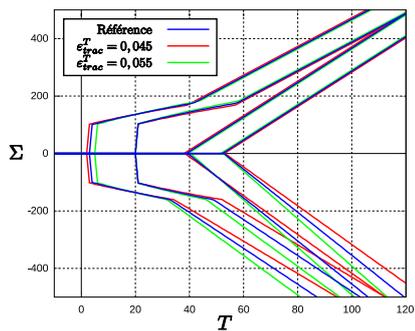
- Simulation d'un essai de traction compression superélastique ($T > A_f$) ;
- Simulation d'un essai de traction compression en réorientation de variantes de martensite ($T < M_f$ et variantes formées auto-accommodées).

Les résultats des différents essais sont présentés pour une variation de chaque paramètre étudié : ε_{trac}^T (fig. 3.11), ε_{comp}^T (fig. 3.12) et ε_{trac}^{TFA} (fig. 3.13).

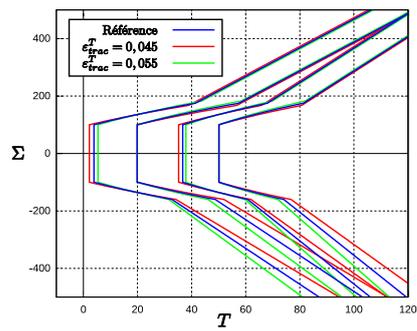
On peut remarquer que le paramètre ε_{trac}^{TFA} qui caractérise la déformation maximale de transformation pouvant être atteinte par la martensite formée auto-accommodée n'a aucune influence sur les pseudo-diagrammes de phase (fig. 3.30a et 3.30b) ainsi que sur les essais ayant pour état de départ un matériau totalement austénitique. Ceci est dû au fait que dans ce cas, les variantes se forment directement de façon orientée et ne font donc pas intervenir ce paramètre pour le calcul de la déformation de transformation à saturation. La seule influence de ce paramètre est remarquable sur une courbe de réorientation de la martensite (fig. 3.13d) ou sur la surface de charge de fin de transformation (fig. 3.13g) et se traduit par un décalage de la valeur de déformation de transformation à saturation à la fois en traction et en compression. Ce paramètre est en fait utilisé pour définir un ratio entre la déformation de transformation à saturation pour des variantes formées de façon orientée et celle obtenue pour de la martensite formée auto-accommodée. Le modèle suppose que ce ratio est ensuite constant quel que soit la direction de déformation.

Le paramètre ε_{comp}^T , comme sa définition l'indique, fait évoluer la déformation de transformation à saturation en compression pour les essais de traction-compression (fig 3.12c et 3.12d). Le tracé des surfaces de charge en transformation ainsi qu'en orientation fait apparaître une influence, outre celle observée dans le cas de la compression pure, sur le quadrant correspondant à de la bi-traction dans le diagramme $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$. Enfin, l'observation des pseudo-diagrammes de phase montre que les pentes de transformation sous un chargement en compression augmentent en valeur absolue lorsque la valeur de ε_{comp}^T diminue. En règle générale, une augmentation de la valeur critique de déformation de transformation fait baisser la valeur de contrainte correspondante au début et la fin de transformation dans le cas d'un chargement superélastique ainsi que la pente du plateau de transformation lors d'un essai de traction. Ceci est dû à la présence d'un terme $\Sigma_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ dans la force de transformation et au fait que la martensite créée lors d'un chargement superélastique s'oriente directement à sa valeur de saturation

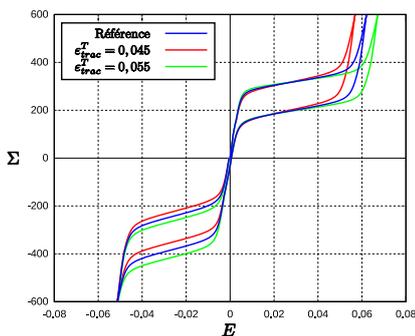
Le paramètre ayant l'influence la plus générale est ε_{trac}^T . En effet, si le modèle comporte des paramètres de déformation de transformation à saturation dans le cas de la compression ou de la martensite formée auto-accommodée, ces derniers ne servent qu'à définir des ratios qui sont ensuite utilisés dans l'expression de ε_{SAT}^T , cette dernière étant ensuite uniquement basée sur le paramètre ε_{trac}^T . De ce fait, ε_{trac}^T a une influence sur l'allure des courbes en compression (fig. 3.11c et 3.11d) ainsi que sur la pente des limites de transformation en compression (fig. 3.11a et 3.11b). Cette influence est d'ailleurs beaucoup plus importante que celle constatée en traction. Il est de plus important de noter que le ratio traction-compression est à surveiller dans le cas de l'expression de la surface de charge en



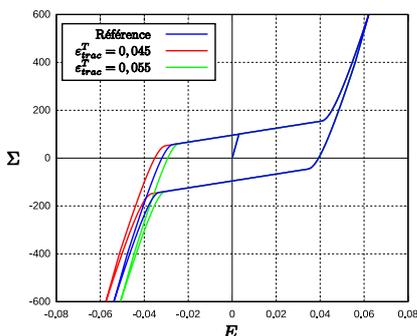
(a) Pseudo-diagramme de phase mécanique.



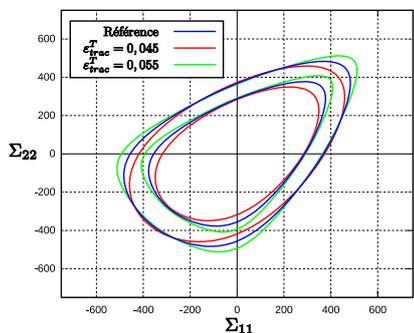
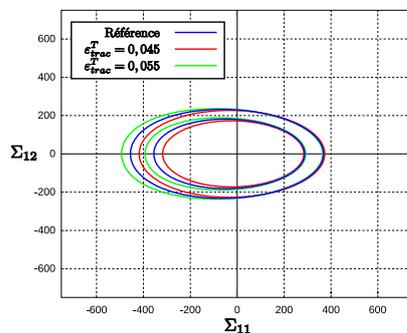
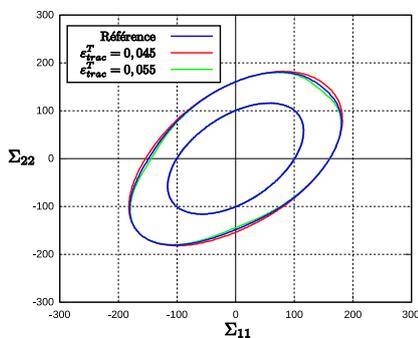
(b) Pseudo-diagramme de phase thermique.

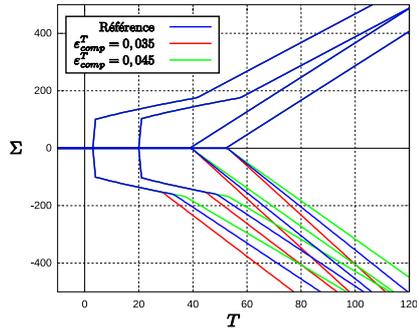


(c) Traction-compression superélastique

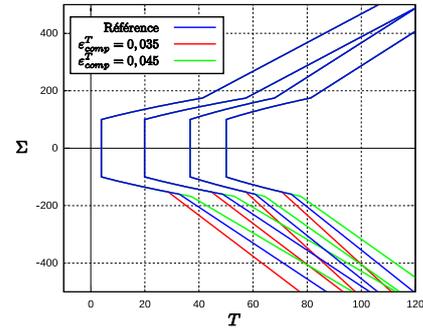


(d) Traction-compression en orientation des variantes.

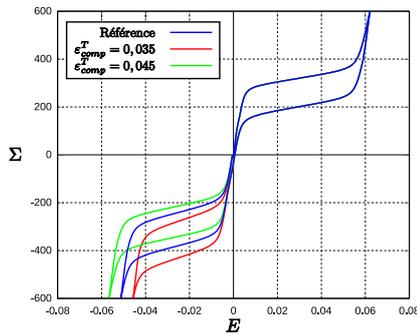
(e) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.(f) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{12})$.(g) Surfaces de début et de fin d'orientation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.FIG. 3.11 – Étude de l'influence du paramètre ϵ_{trac}^T .



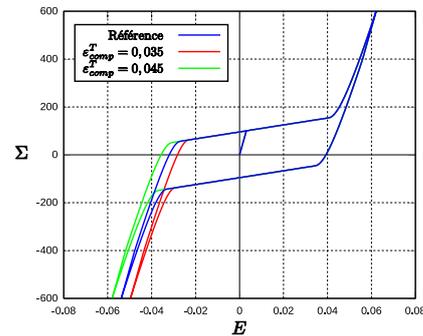
(a) Pseudo-diagramme de phase mécanique.



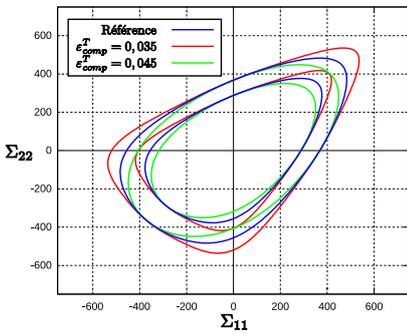
(b) Pseudo-diagramme de phase thermique.



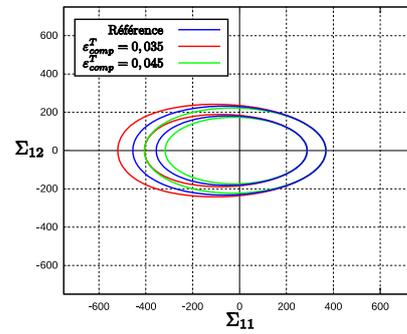
(c) Traction-compression superélastique



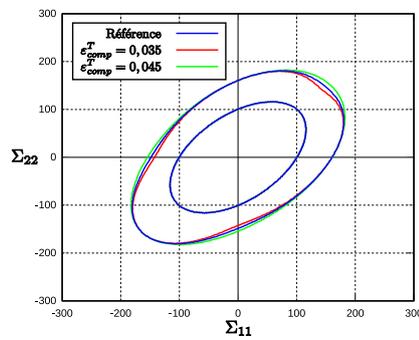
(d) Traction-compression en orientation des variantes.



(e) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.

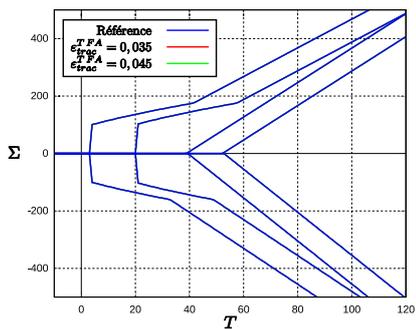


(f) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{12})$.

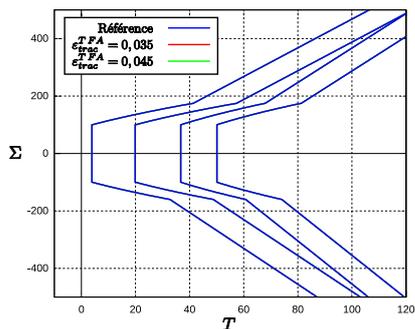


(g) Surfaces de début et de fin d'orientation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.

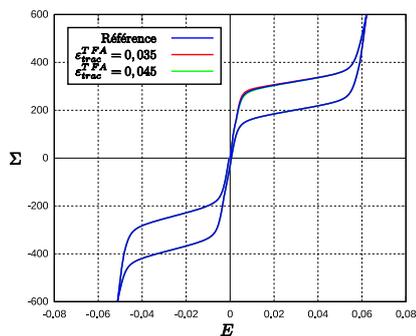
FIG. 3.12 – Étude de l'influence du paramètre ϵ_{comp}^T .



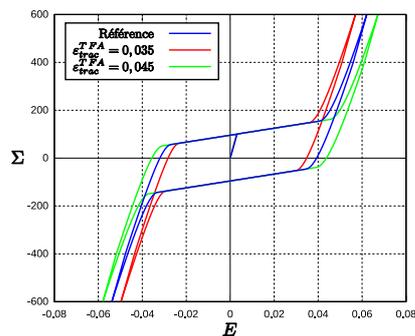
(a) Pseudo-diagramme de phase mécanique.



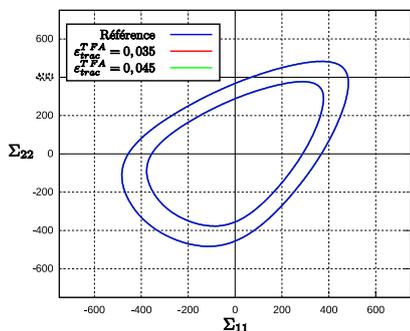
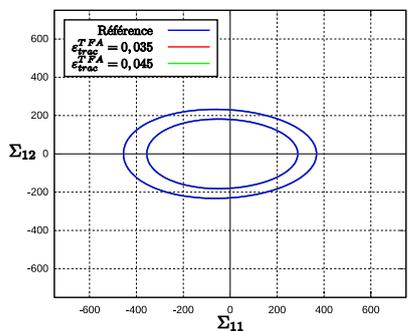
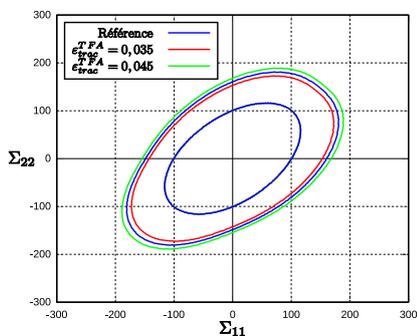
(b) Pseudo-diagramme de phase thermique.



(c) Traction-compression superélastique



(d) Traction-compression en orientation des variantes.

(e) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.(f) Surfaces de début et de fin de transformation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{12})$.(g) Surfaces de début et de fin d'orientation dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$.FIG. 3.13 – Étude de l'influence du paramètre ϵ_{trac}^{TFA} .

orientation. En effet, les figures 3.11g et 3.12g montrent que dans certains cas critiques, la convexité de la surface n'est pas respectée.

3.4.3 Validation sur des cas de chargements complexes

Objectif des essais de validations

Les essais de validations réalisés ont pour objectif de confronter la réponse du modèle à des résultats obtenus expérimentalement, et ce pour des trajets de chargement complexes justifiant l'utilisation d'un modèle tridimensionnel. Différents points seront observés pour juger de la qualité du modèle :

- La prise en compte des différents mécanismes de déformation ;
- La description des cycles partiels ;
- La réponse face à des chargements mêlant à la fois thermique et mécanique ;
- Le comportement multiaxial et non proportionnel ;
- La prise en compte de chargement présentant des gradients de contrainte ou de déformation.

Bases de données utilisées

Une première base de données concerne des essais réalisés sur des fils de NiTi par l'équipe de l'IP ASCR de Prague [Sittner 2008]. Les fils présentent un diamètre de 0,1 mm et sont superélastiques à température ambiante. Chaque échantillon a subi 100 cycles de stabilisation en traction uniaxiale jusqu'à une déformation de 8 %. Enfin, chaque essai est précédé d'un chauffage à 120 °C suivi d'un refroidissement jusqu'à la température d'essai afin d'assurer un état initial identique à chaque manipulation. Quatre types d'essais ont été réalisés :

- Des essais de traction uniaxiale à différentes températures, avec des cycles complets et partiels ;
- Des cycles thermiques sous différents niveaux de contrainte de traction ;
- Des chargements isothermes en traction-torsion à différentes températures ;
- Des essais de retour contraint.

L'autre base de données utilisée a été fournie par Grabe et Bruhns [Grabe et Bruhns 2009] et concerne des essais réalisés sur des tubes minces de NiTi. Ces derniers sont soumis à des chargements traction-torsion, ce qui, compte tenu de la géométrie des éprouvettes, fait apparaître un état de contrainte complexe de traction et cisaillement combinés. Les essais réalisés sont des trajets carré et papillon, ce qui permet d'observer l'influence du sens de parcours du trajet de chargement.

Les paramètres matériaux utilisés pour simuler ces différents essais sont présentés dans le tableau 3.3

Simulation des essais isothermes de traction de l'IP ASCR

Les essais de traction réalisés sur des fils de NiTi par l'équipe de Prague sont de deux types : des essais en cycle complet uniquement (traction jusqu'à la saturation de la déformation de transformation puis retour) et des essais présentant un cycle complet suivi d'un cycle partiel. Tous ces essais sont réalisés à des températures de -20, -10, 0, 10, 20, 40 et 60 °C. Les résultats expérimentaux sont confrontés aux prédictions du modèle sur les figures 3.14, 3.15 et 3.16.

Plusieurs observations peuvent être faites quant aux résultats obtenus :

- Le module d'Young E a été identifié à partir de la courbe de traction à 20 °C. On peut remarquer que ce module ne correspond pas à celui observé expérimentalement pour

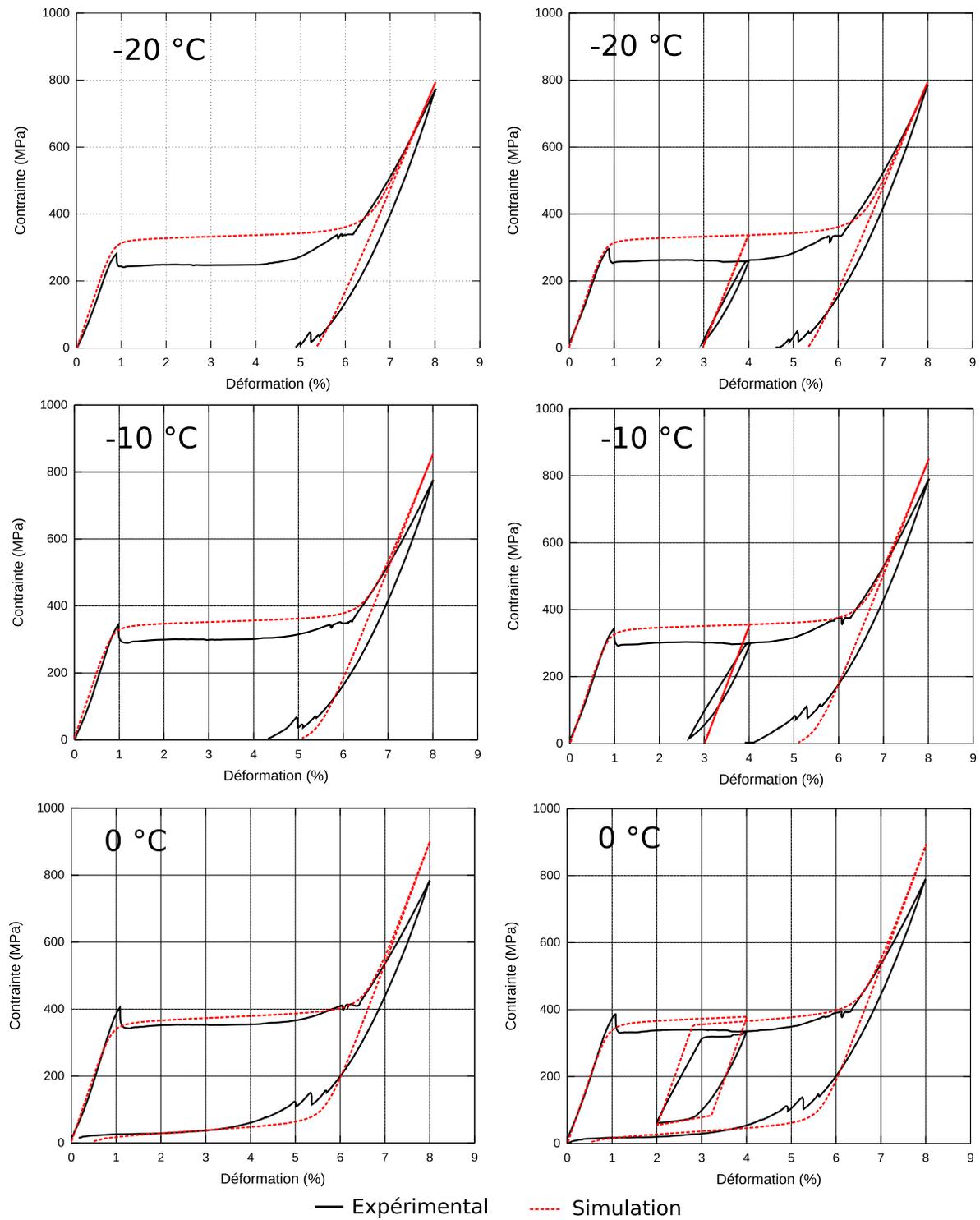


FIG. 3.14 – Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à -20, -10 et 0 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux

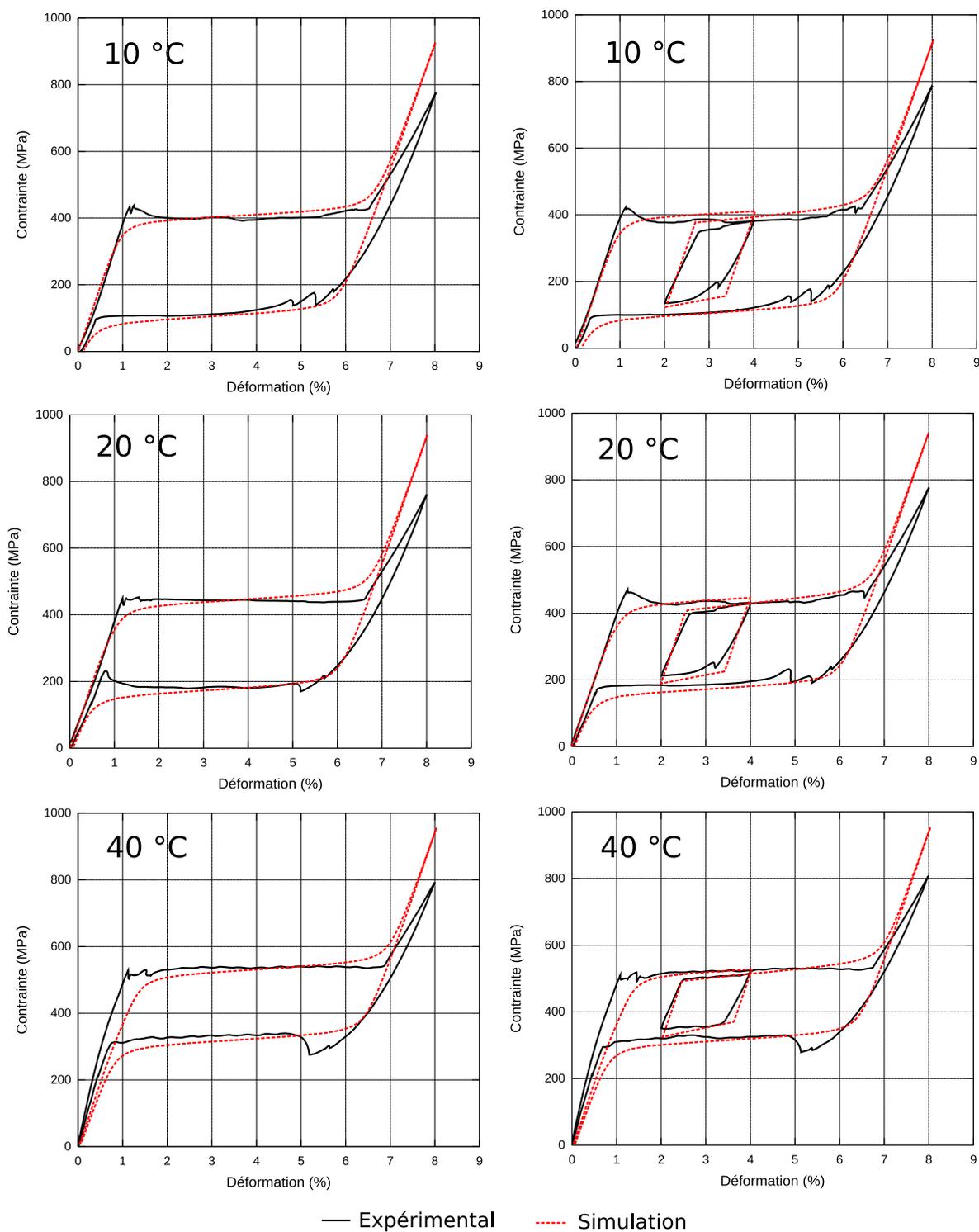


FIG. 3.15 – Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à 10, 20 et 40 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux

	E (MPa)	ν	α ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	ε_{trac}^T	ε_{trac}^{TFA}	ε_{comp}^T
IP ASCR	39 500	0,3	8.10^{-6}	0,056	0,053	0,044*
Grabe	70 000*	0,3*	8.10^{-6}	0,05*	0,04*	0,04*
	b_{dtrac} (MPa/ $^{\circ}\text{C}$)	b_{rtrac} (MPa/ $^{\circ}\text{C}$)	M_s ($^{\circ}\text{C}$)	A_f ($^{\circ}\text{C}$)	r_f	
IP ASCR	4.2	7	-80	-2	0,25	
Grabe	5*	6*	-53	-23	0,6*	
	$F_{\bar{\varepsilon}_1}^{max}$ (MPa)	H_f (MPa)	$H_{\bar{\varepsilon}_T}$ (MPa)	H_{twin} (MPa)	H_s (MPa)	
IP ASCR	220	2	1 635	25 000*	68,5*	
Grabe	100*	4*	1 000*	40 000*	50*	

TAB. 3.3 – Paramètres matériau utilisés dans les essais de validation. Le « * » indique les paramètres qui ont dû être estimés par manque de données expérimentales.

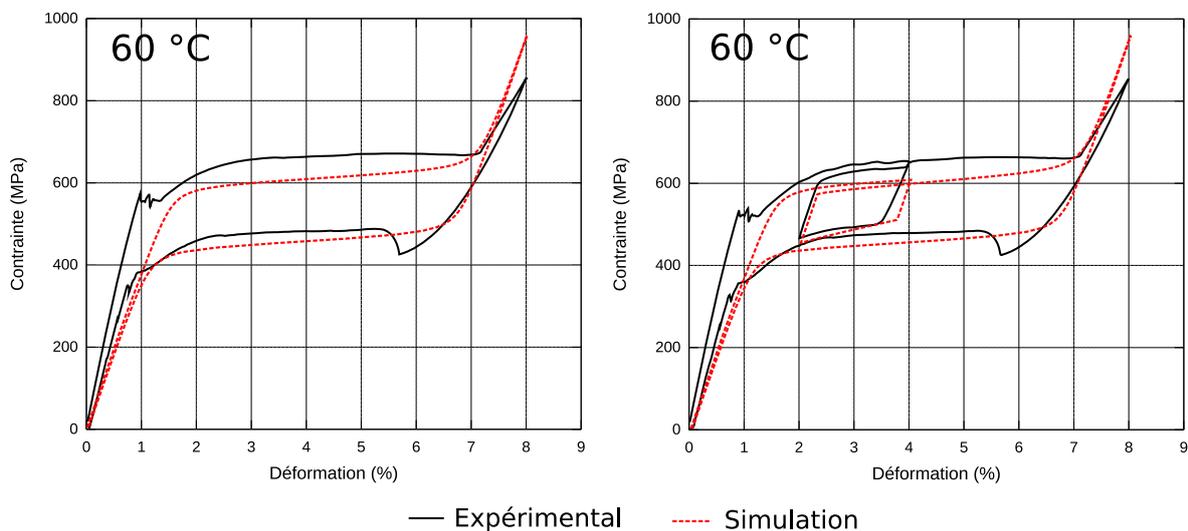


FIG. 3.16 – Simulation de chargements isothermes uniaxiaux à 60 °C et comparaison avec les résultats expérimentaux

les températures les plus élevées (40 et 60 °C). En effet, le module d'élasticité apparent observé lors des essais expérimentaux tend à augmenter avec la température. Cette différence ne peut pas être due à la présence de martensite résiduelle car le matériau est porté à une température de 120 °C avant chaque essai afin de s'assurer qu'il est bien initialement austénitique. En revanche, une transformation de l'austénite en phase R pour les températures inférieures à 40 °C est possible. De ce fait, si le module apparent lors des essais à 40 et 60 °C est bien celui de l'austénite, le module utilisé pour alimenter le modèle, mesuré à 20 °C correspond à celui d'un matériau biphasé austénite/phase R.

- Le module apparent de la martensite observé lors des essais expérimentaux est toujours plus faible que celui de l'austénite. Ceci peut s'expliquer par la mobilité des interfaces entre les variantes de martensite, qui tendent à minimiser l'énergie interne stockée lors de la transformation martensitique initiale, et s'orientent progressivement lors de l'application d'une contrainte, ou encore par le fait que le module élastique de la phase martensitique est intrinsèquement plus faible que celui de l'austénite.
- Des écarts entre la contrainte de début de transformation prédite et celle observée expérimentalement sont constatés lors de chargements à faible température (-20 et -10 °C). Ceci est dû à une mauvaise estimation de la contrainte limite de réorientation des variantes de martensite. Ce paramètre ($F_{\varepsilon T}^{max}$) n'a en effet pas pu être identifier car aucun essai de réorientation de la martensite n'était disponible.
- À haute température (60 °C), un écart important est observé au niveau de la pente d'écrouissage du plateau de transformation martensitique. Cependant, on peut noter que l'allure expérimentale de cet écrouissage ne correspond pas à la modélisation linéaire utilisée pour les simulations et permet de mettre en évidence une des limites du modèle.
- Pour les cas intermédiaires (de 0 à 40 °C), la réponse fournie par le modèle est proche des résultats expérimentaux. On peut donc en déduire que la dépendance du comportement à la température d'essai est correctement prise en compte par le modèle.

Simulation des essais thermiques à contrainte constante de l'IP ASCR

Six essais de refroidissement-chauffage à contrainte constante ont été effectués, et ce pour différents niveaux de contrainte. Les résultats expérimentaux ainsi que ceux des simulations effectuées sont présentés sur la figure 3.17.

On peut noter que les essais réalisés à basse contrainte présentent une très faible déformation inélastique. Ceci est dû à l'apparition de phase R, non prise en compte par le présent modèle, dans les échantillons testés. Ceci explique donc l'absence de déformation de transformation dans les prédictions du modèle. En revanche, pour des niveaux de contrainte plus élevés (de 400 à 500 MPa), le comportement observé expérimentalement est bien reproduit par le modèle. Les températures de transformation sont correctement prédites ainsi que le niveau de déformation de transformation atteint. Seules les températures de transformation directe sont légèrement surévaluées (écart de l'ordre de 5 °C). On peut ainsi en conclure que le modèle est capable de simuler des chargements thermiques sous contrainte en utilisant un jeu de paramètres dont l'identification est issue d'essais purement mécaniques.

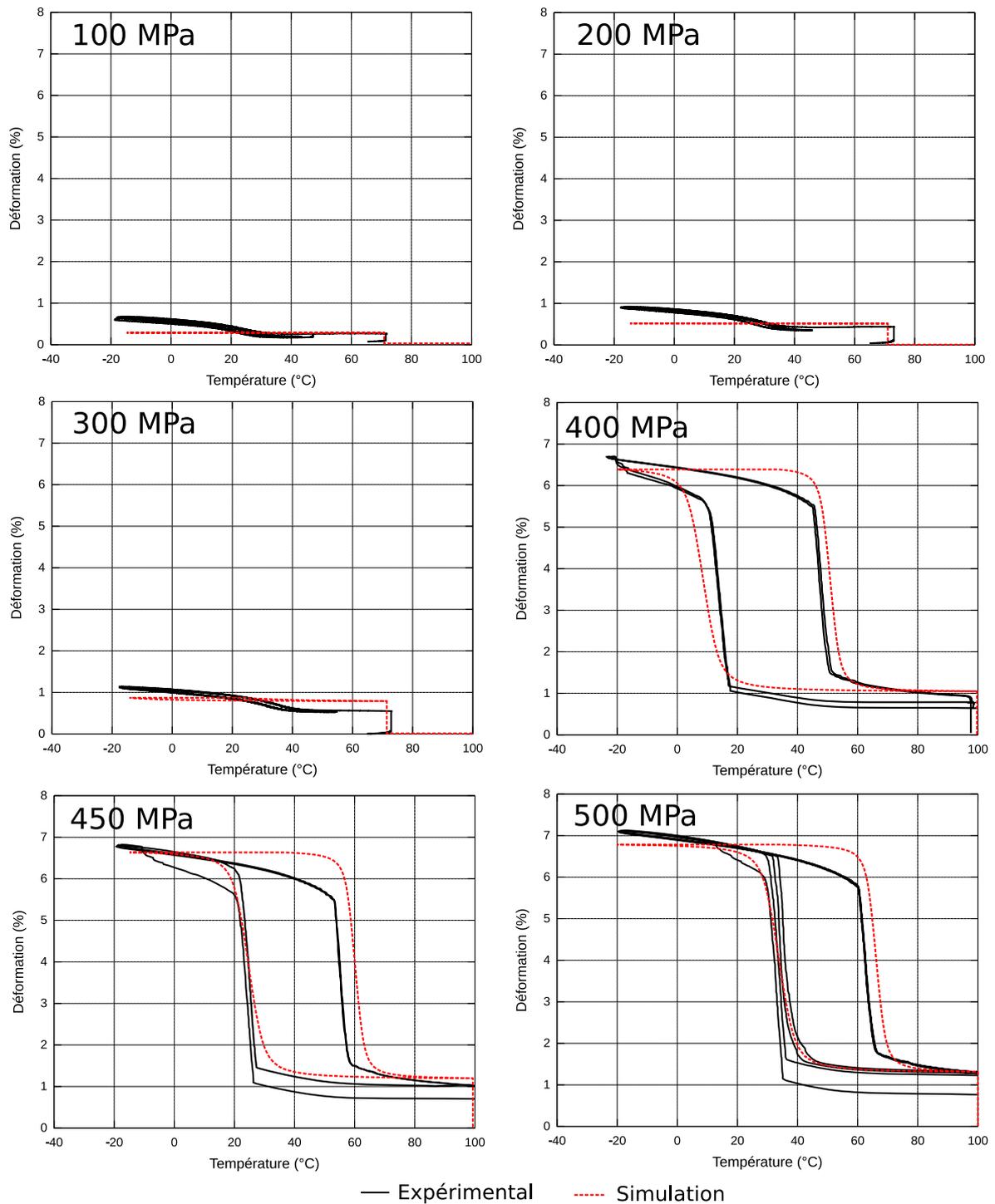


FIG. 3.17 – Simulation de chargements thermiques à contrainte constante et comparaison avec les résultats expérimentaux

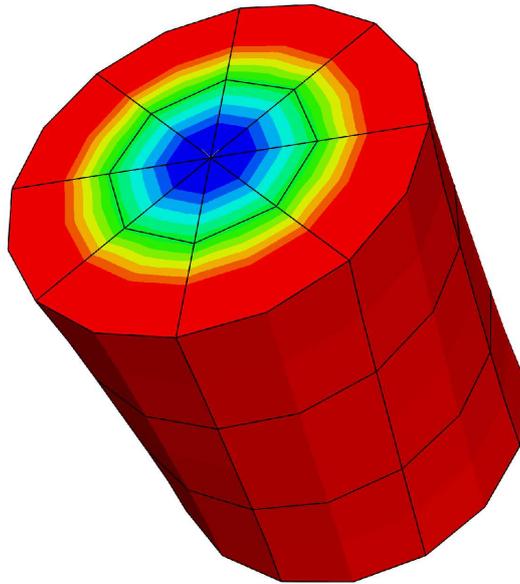


FIG. 3.18 – Maillage utilisé pour la simulation des essais de traction-torsion de l'IP ASCR. Les éléments utilisés sont des hexaèdres (20 nœuds et 27 points d'intégration) et des prismes à base triangulaire (15 nœuds et 9 points d'intégration)

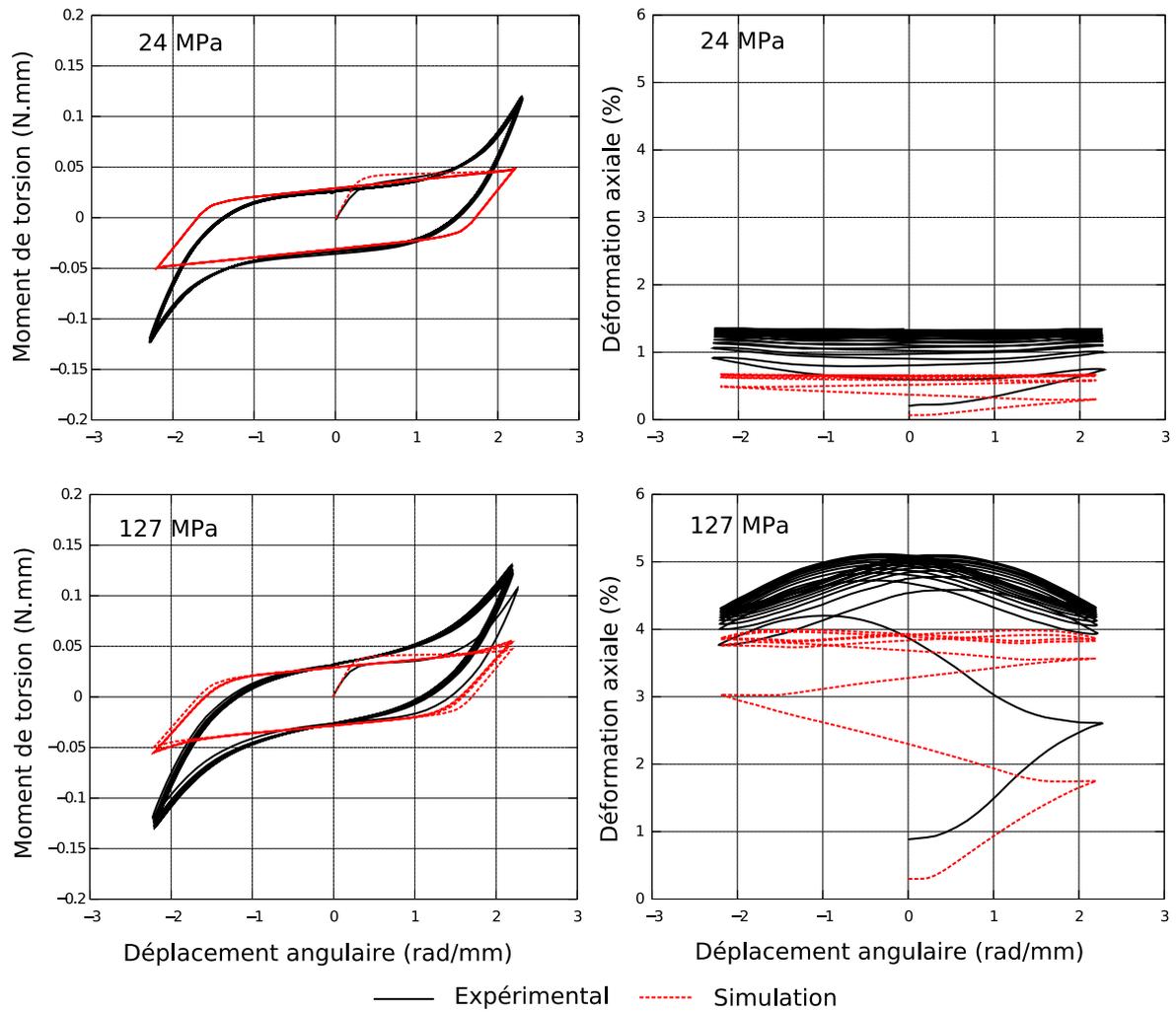
Simulation des essais isothermes de traction-torsion de l'IP ASCR

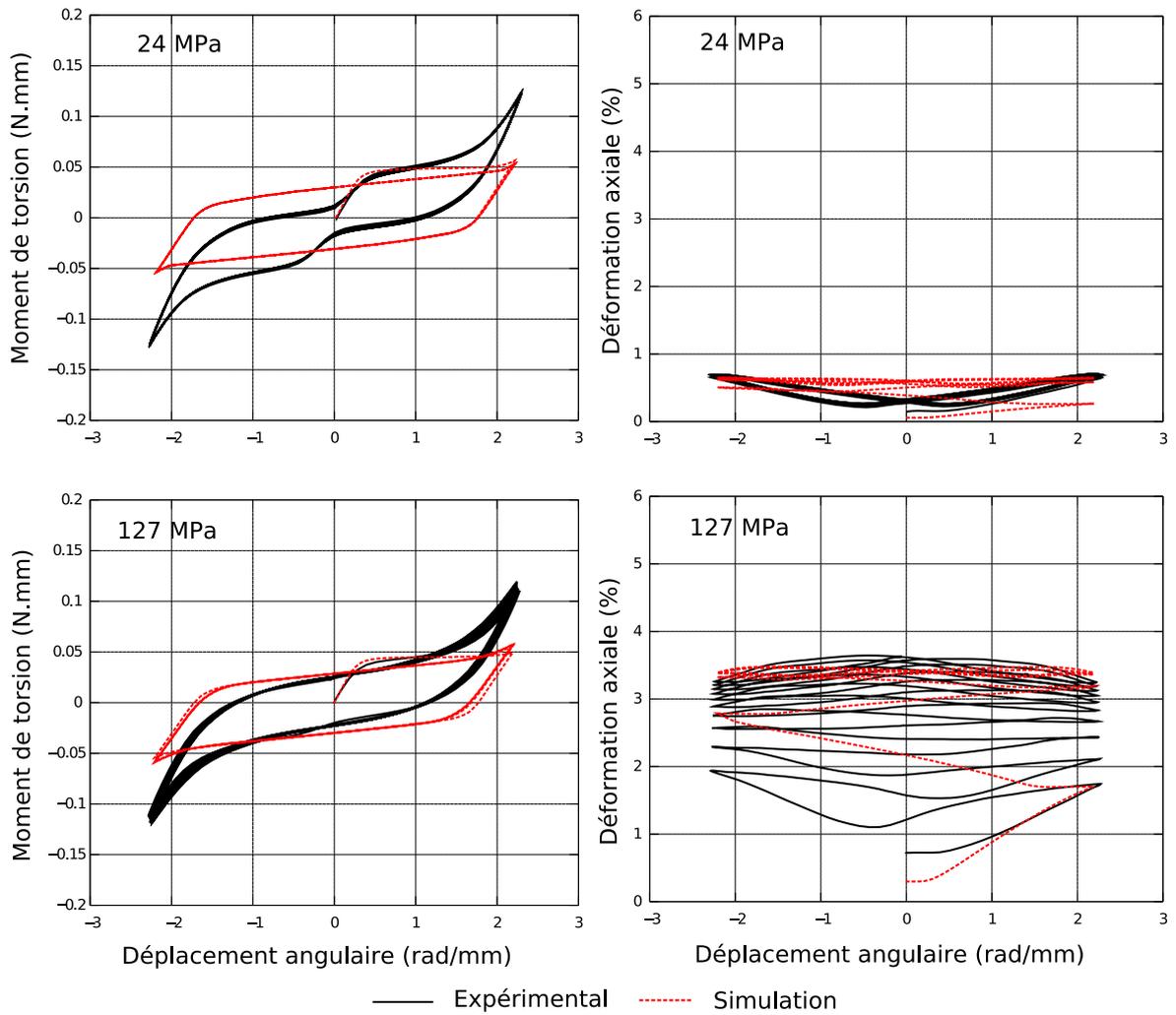
La base de données expérimentale propose une campagne d'essais isothermes en traction-torsion réalisés pour différentes températures et niveaux de contrainte axiale. Un chargement en traction est d'abord effectué pour arriver à la contrainte axiale voulue puis le fil est sollicité en torsion par un déplacement angulaire imposé de façon alternative. Dix cycles sont réalisés. Ce type de chargement présente une forte non proportionnalité à laquelle vient s'ajouter un gradient de contrainte et de déformation selon le rayon du fil. Ceci impose donc une simulation des essais *via* la méthode des éléments finis afin de prendre en compte ces gradients. Le modèle numérique utilisé pour représenter la structure est composé de 8 éléments quadratiques par section avec au total 3 sections pour aboutir à une longueur de portion de fil à simuler de 0,1 mm (voir fig. 3.18). Afin de réduire le temps de simulation numérique, seuls 4 cycles sont simulés au lieu des 10 réalisés expérimentalement.

Les simulations réalisées correspondent aux essais à -40, -20, 0 et 50 °C sous une contrainte axiale de 24 et 127 MPa. Les comparaisons entre les prédictions du modèle et les résultats expérimentaux est présentée dans les figures 3.19, 3.20, 3.21 et 3.22. Y figurent pour chaque cas le moment de torsion en fonction de l'angle de rotation ainsi que la déformation axiale en fonction du même angle de rotation.

De forts écarts entre la prédiction du modèle et la réponse expérimentale sont constatés au niveau de la prédiction du moment de torsion. En effet, la pente de pseudo-écrouissage prédite par le modèle est plus faible que celle observée expérimentalement et la valeur de saturation de la déformation de transformation est atteinte beaucoup plus rapidement sur les manipulations expérimentales. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer cet écart :

- Aucune localisation de déformation n'est observée lors de sollicitations en torsion, alors que les paramètres matériau ont été évalués sur des courbes de traction, où une forte localisation de la transformation martensitique et par extension de la déforma-

FIG. 3.19 – Cycles de traction-torsion à -40 °C

FIG. 3.20 – Cycles de traction-torsion à -20 °C

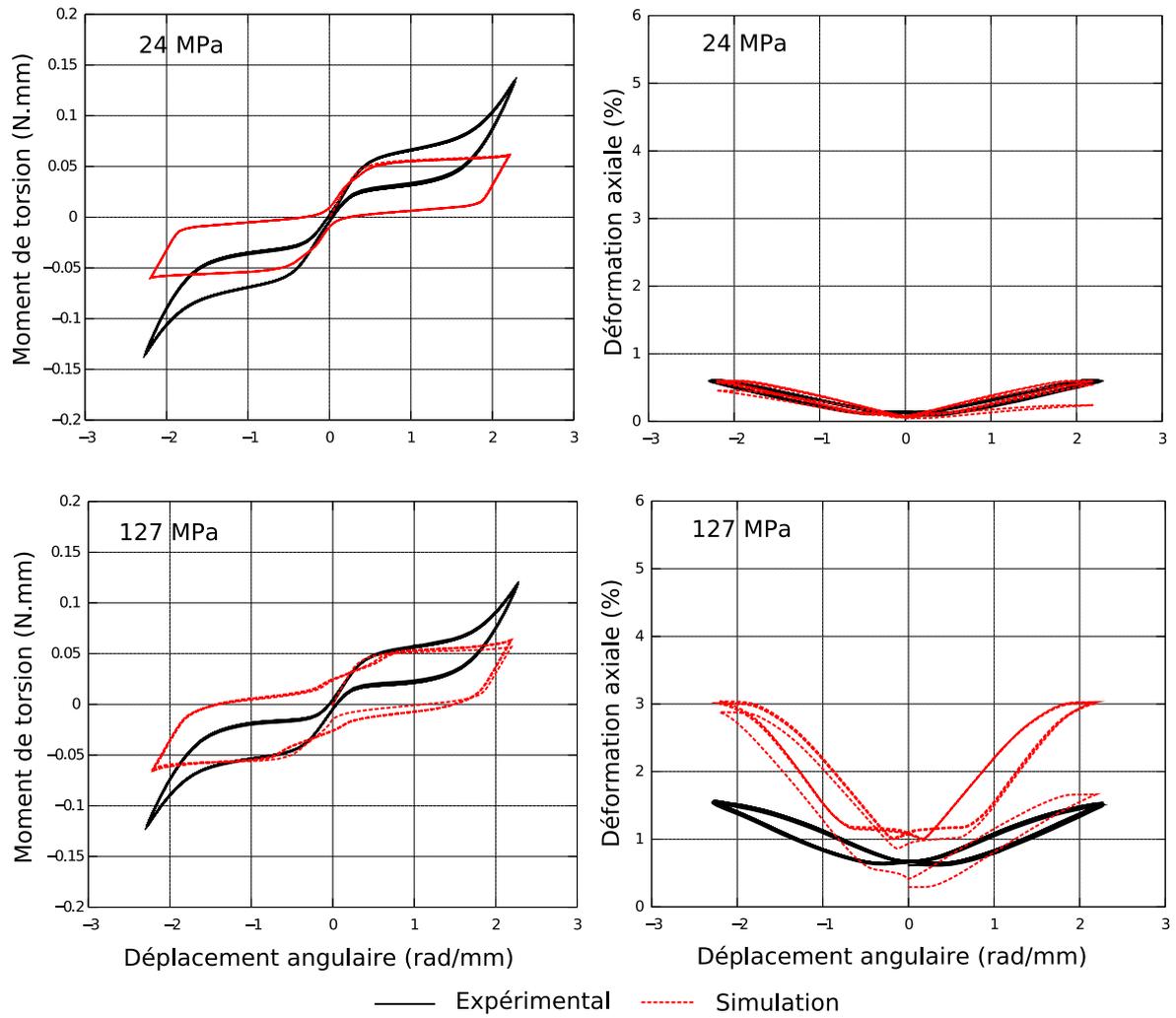


FIG. 3.21 – Cycles de traction-torsion à 0 °C

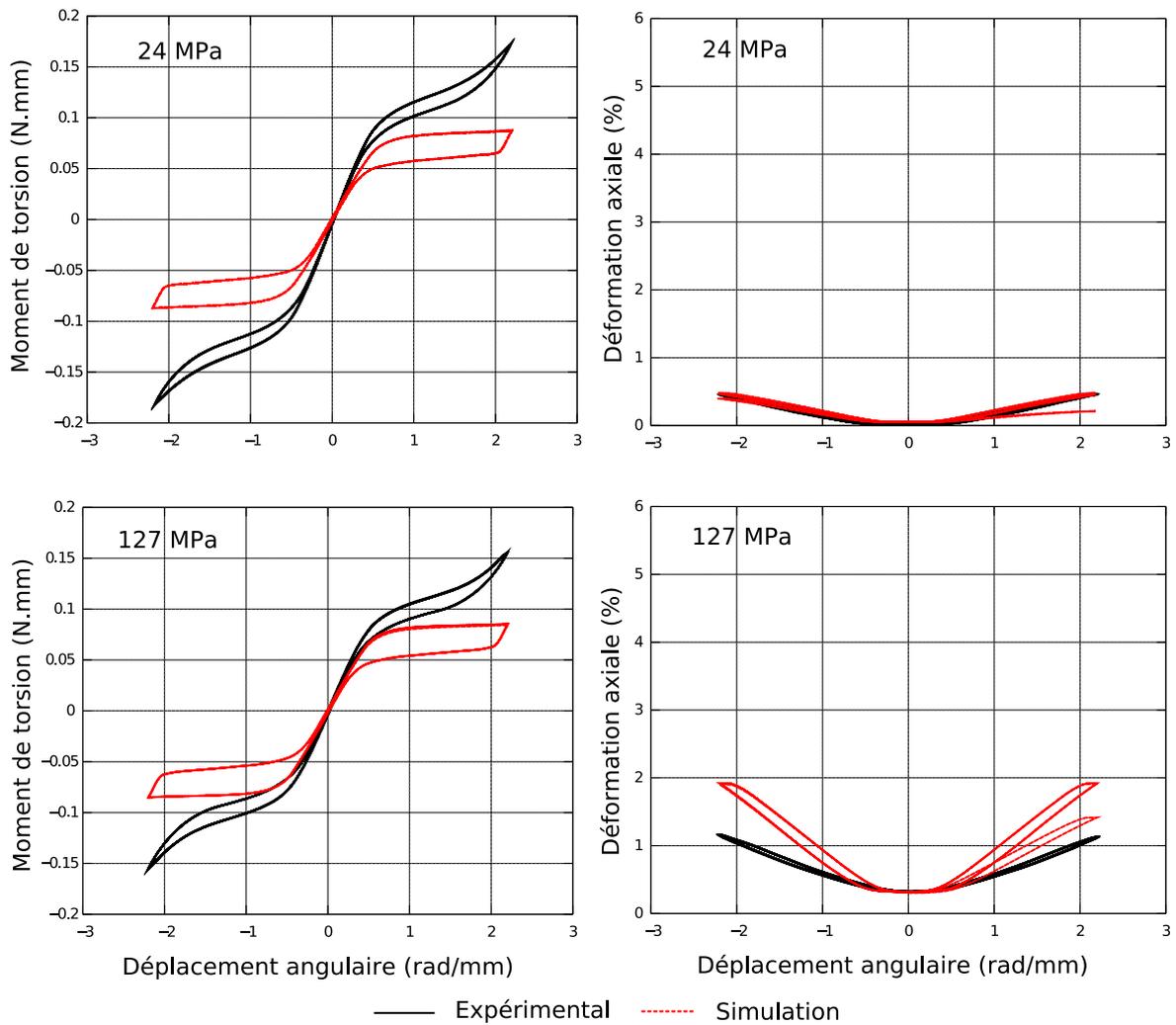


FIG. 3.22 – Cycles de traction-torsion à 50 °C

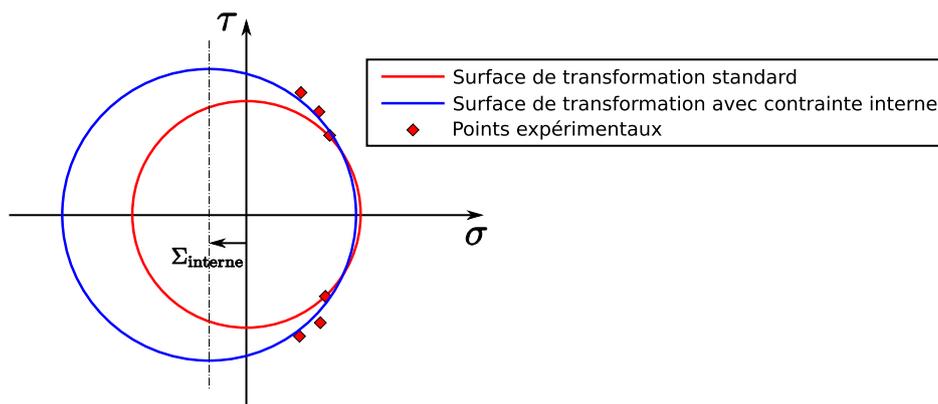


FIG. 3.23 – Prise en compte d'une contrainte interne afin de modéliser l'effet de texture du matériau [Hartl 2009].

- tion de transformation est observée. Ceci a pour effet de faire évoluer la transformation de phase à une contrainte quasi-constante et de causer une sous-évaluation des paramètres de pseudo-écrouissage.
- L'obtention de fils de faible diamètre comme celui utilisé expérimentalement induit un écrouissage important du matériau lors des opérations de tréfilage. Il en résulte une texture fortement orientée du matériau. Le critère utilisé dans le modèle pour prendre en compte la déformation de transformation à saturation en fonction de la direction de sollicitation suppose une texture isotrope. Il est donc inadapté à ce type d'échantillons. Ceci peut expliquer la déformation de transformation à saturation plus faible dans le plan transverse comme celle observée sur les échantillons utilisés. Une solution proposée par Hartl [Hartl 2009] consiste à introduire dans l'expression de la surface de charge de transformation une contrainte interne permettant de tenir compte de la texture du matériau (voir fig. 3.23). Ceci nécessite cependant l'utilisation des essais de torsion pour identifier cette contrainte interne. Nous n'avons pas utilisé cette démarche, préférant identifier les paramètres de notre modèle sur des essais de traction et tester son pouvoir prédictif sur les chargements complexes.
 - Lors de leur réalisation, les fils ont subi un traitement thermique en présence d'oxygène et ont donc pu former une couche d'oxyde en surface. Cette couche, même mince, ayant une rigidité apparente plus importante que celle observée dans le comportement d'un AMF, joue un rôle important dans la rigidité en torsion globale du fil du fait de son positionnement sur un rayon important. Cependant, le manque d'informations quant au traitement thermique réalisé ne permet pas de confirmer cette hypothèse.

De manière générale, l'évolution de la déformation axiale en fonction de l'angle de rotation est correctement prédite de façon qualitative pour tous les essais. L'erreur quantitative observée est quant à elle due à la description du modèle qui suppose une texture isotrope du matériau. Ce point pourrait être enrichi en incorporant des éléments dépendants du mode d'obtention du matériau (texture anisotrope). Ceci implique cependant l'ajout de nombreux paramètres matériau qui alourdiront en conséquence la procédure d'identification de ces derniers. Cependant, cette campagne d'essais permet de valider la capacité du modèle à prédire le comportement induit par une non proportionnalité du chargement.

Simulation des essais de retour contraint de l'IP ASCR

Six essais de retour contraint ont été effectués à une température ambiante de 23 °C, température pour laquelle le matériau présente un comportement superélastique. Trois sont réalisés sur le plateau de transformation directe et les trois autres sur le plateau de transformation inverse. Dans chaque cas, une déformation donnée (2, 3,5 et 5 %) est imposée et un chauffage est effectué jusqu'à 100 °C. Les résultats de simulation et les essais expérimentaux sont présentés dans les figures 3.24 et 3.25 avec, pour chaque cas, une courbe mécanique dans le diagramme (Σ, E) et les pentes de transformation dans le diagramme (Σ, T) .

Outre les remarques déjà formulées dans la partie 3.4.3, il faut observer, dans cette campagne d'essais et de simulations, le niveau de contrainte atteint lors du chauffage. On peut noter que la prédiction du modèle est bonne et que les pentes de transformation dans le diagramme (Σ, T) sont correctement représentées. On peut donc en conclure que le modèle est adapté au dimensionnement d'actionneurs unidimensionnels. Les remarques formulées dans la partie 3.4.3 sont à prendre en compte dans le cadre du dimensionnement d'un actionneur faisant apparaître un comportement multiaxial et non proportionnel.

Essais multiaxiaux effectués par Grabe et Bruhns [Grabe et Bruhns 2009]

Les essais effectués par Grabe et Bruhns portent sur la traction-torsion de tube minces de NiTi. Contrairement aux essais effectués par l'équipe de Prague sur des fils de NiTi, la géométrie particulière des tubes (rapport épaisseur / diamètre supérieur à 5) fait que l'on peut raisonnablement supposer un état de contrainte homogène suivant le rayon de l'éprouvette et ainsi simuler le comportement du matériau en superposant un chargement en traction pure et un chargement en cisaillement pur. De fait, il n'est pas nécessaire de procéder à une résolution par la méthode des éléments finis car le comportement de la structure peut être décrit par un seul point matériel (état homogène des contraintes).

Les trajets de chargements sont imposés par les déformations axiale et de cisaillement et décrivent suivant les essais un carré ou un papillon parcourus dans les deux sens possibles dans le diagramme (ε, γ) . Le matériau utilisé est superélastique à la température de l'essai (27 °C). Les essais effectués ne permettant pas d'identifier les paramètres matériau par la méthode décrite dans la partie 3.4.1, les paramètres utilisés sont issus de la bibliographie [Panico et Brinson 2007] et les températures de transformation ont été identifiées à partir des essais de Grabe et Bruhns. La comparaison entre les résultats expérimentaux et la prédiction du modèle ne pourra cependant se faire que de manière qualitative. Les résultats pour les trajets carrés et papillon sont présentés respectivement dans les figures 3.26 et 3.27.

Malgré le fait que les paramètres matériaux n'aient pas été identifiés complètement à partir du matériau utilisé pour les tests expérimentaux, une bonne concordance peut être observée de manière qualitative entre la prédiction du modèle et les résultats de Grabe et Bruhns. Ainsi, la dissymétrie de comportement entre la traction et la compression induit pour les deux types de chargement une réponse différente suivant le sens de parcours du trajet de chargement. Il est ainsi possible de valider l'aspect non proportionnel et multiaxial du modèle dans ce cas.

3.4.4 Validation de l'hypothèse des contraintes planes

Le modèle bidimensionnel développé pour le dimensionnement de structures minces *via* des éléments finis de coque fait appel à l'hypothèse d'un état plan de contrainte, ainsi que la prise en compte au niveau de la structure d'une rigidité en cisaillement transverse *via* un facteur de correction calculé *a priori*. Afin de valider ces deux hypothèses de modélisation,

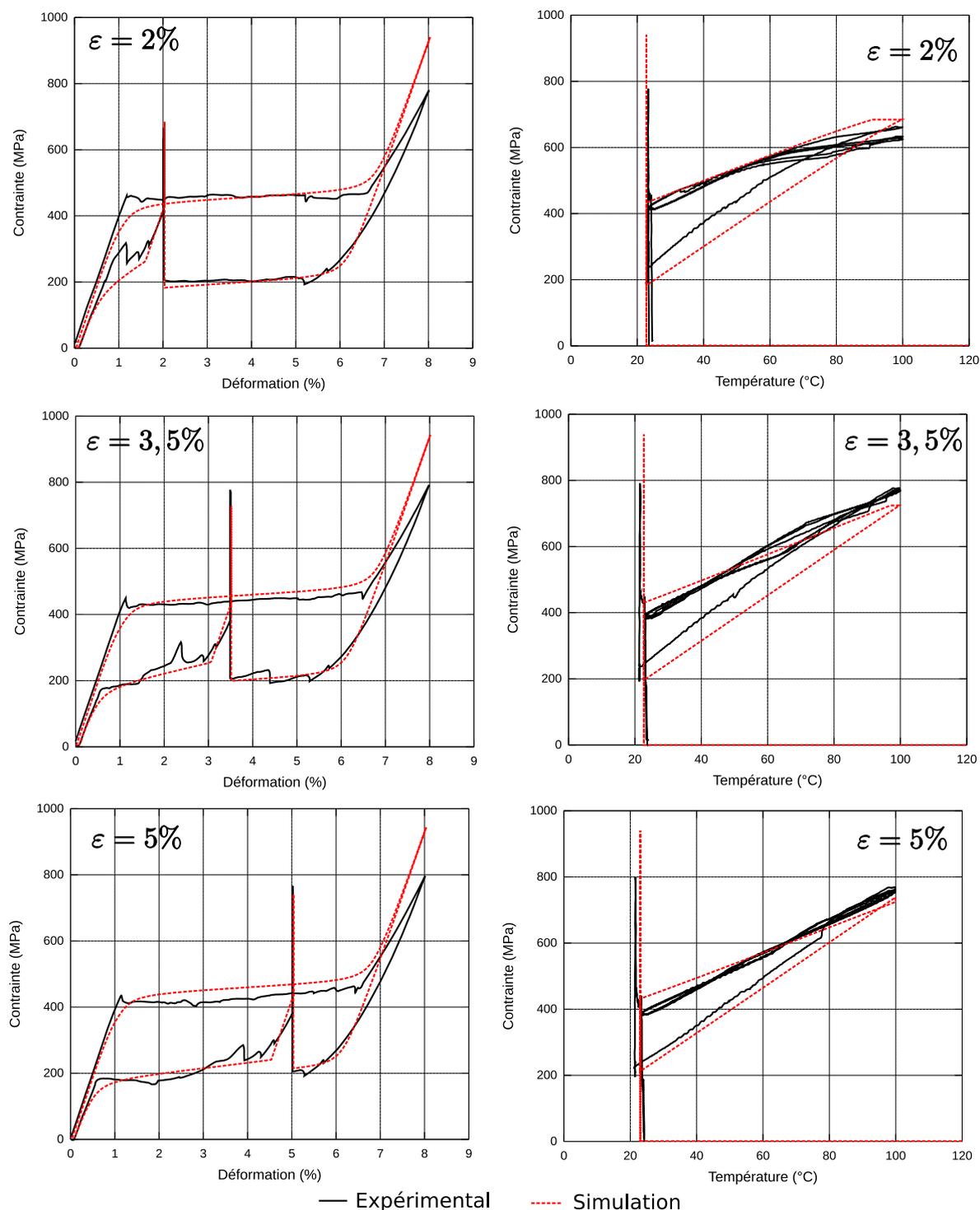


FIG. 3.24 – Essais de retour contraint sur le plateau supérieur.

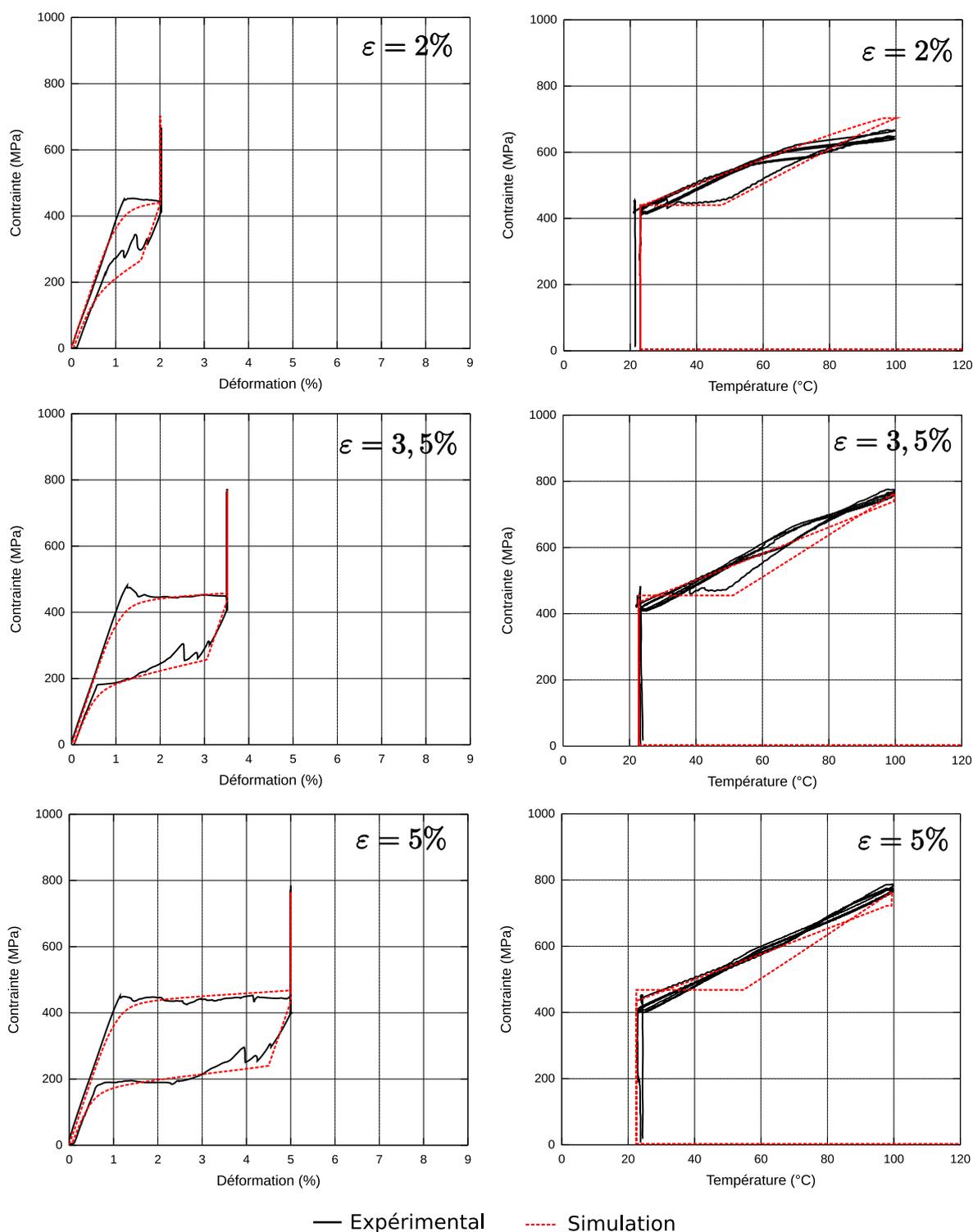


FIG. 3.25 – Essais de retour contraint sur le plateau inférieur.

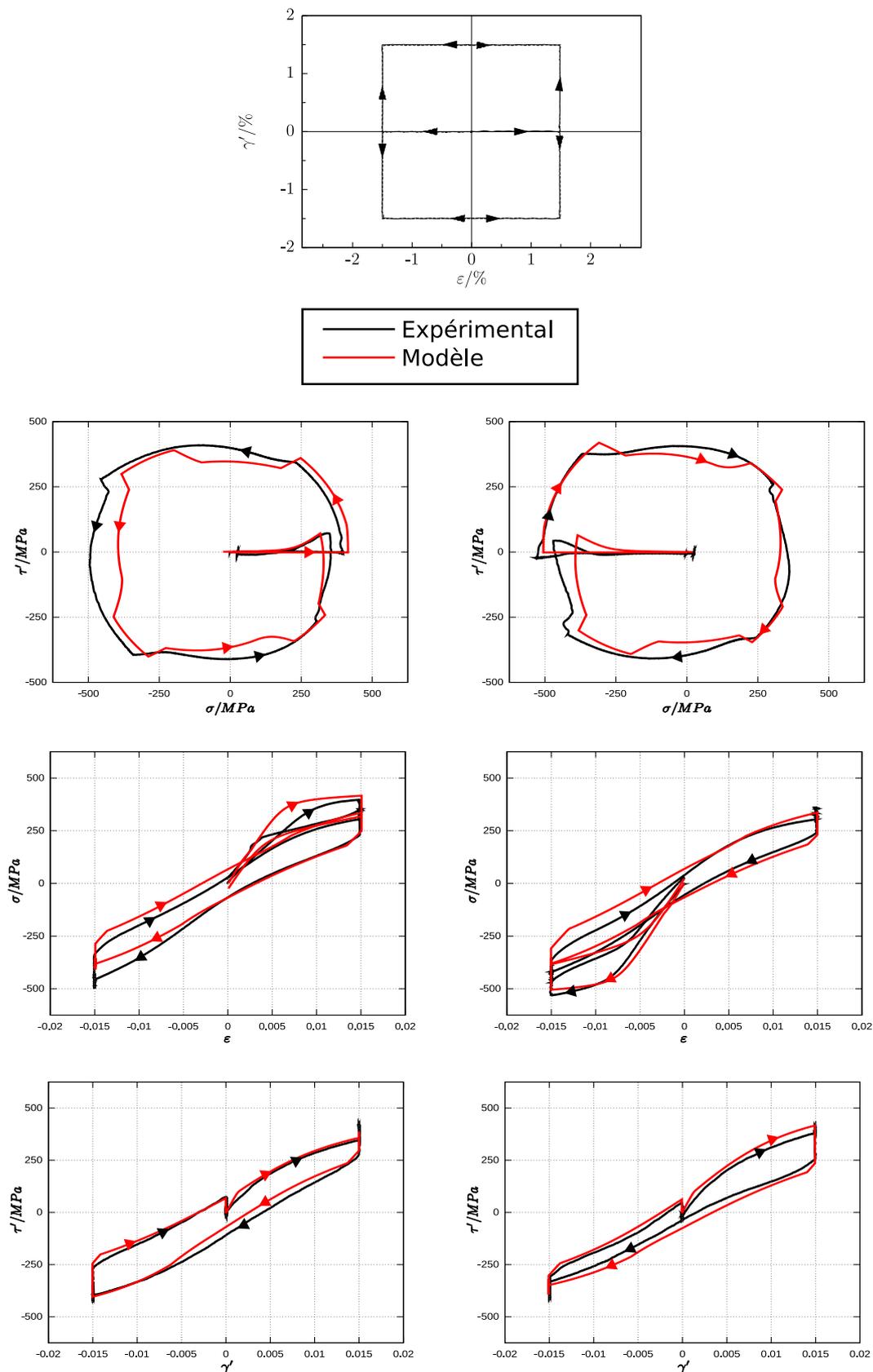


FIG. 3.26 – Trajets de chargement carrés dans l'espace des déformations axiale et de cisaillement. Comparaison des résultats expérimentaux [Grabe et Bruhns 2009] et numérique pour les deux sens de parcours.

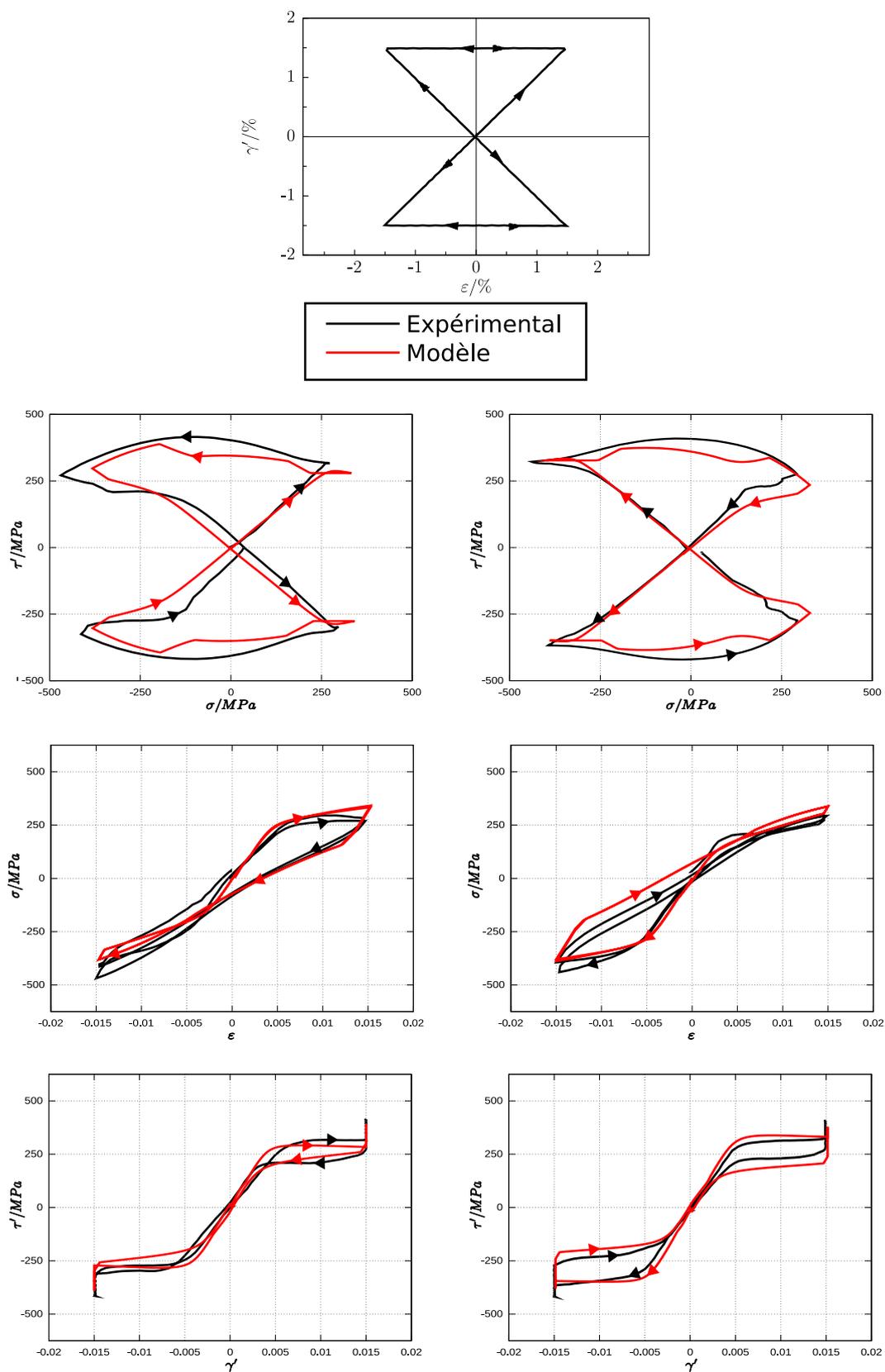


FIG. 3.27 – Trajets de chargement « papillon » dans l'espace des déformations axiale et de cisaillement. Comparaison des résultats expérimentaux [Grabe et Bruhns 2009] et numérique pour les deux sens de parcours.

E (MPa)	ν	α ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	ε_{trac}^T	ε_{trac}^{TFA}	ε_{comp}^T
39 500	0,3	8.10^{-6}	0,056	0,053	0,044
$b_{d\,trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	$b_{r\,trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	M_s ($^{\circ}\text{C}$)	A_f ($^{\circ}\text{C}$)	r_f	
4,2	7	-80	-2	0,25	
F_{ε}^{max} (MPa)	H_f (MPa)	$H_{\varepsilon T}$ (MPa)	H_{twin} (MPa)	H_s (MPa)	
220	2	1 635	25 000	68,5	

TAB. 3.4 – Paramètres matériau utilisés pour les essais de gonflement de membrane.

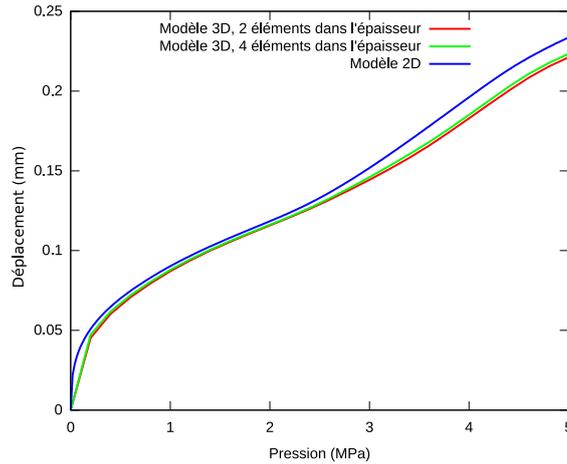


FIG. 3.28 – Débattement d'une membrane sous pression. Comparaison entre les modèles 2D et 3D.

différentes simulations ont été effectuées, afin de comparer ce modèle au modèle tridimensionnel pour des cas de chargement proches de ceux auxquels le modèle est supposé être confronté lors de son utilisation (gonflement de films minces d'AMF).

Comparatif 2D / 3D

Afin de comparer les résultats des modèles 2D et 3D, un test est effectué sur une membrane de forme circulaire, encadrée à sa périphérie et soumise à une pression. La membrane présente un diamètre de 2 mm et une épaisseur de 0,01 mm. Elle est soumise, à l'état superélastique (température ambiante de 25 $^{\circ}\text{C}$), à une pression de 5 MPa. Les paramètres matériau utilisés pour cette simulation sont indiqués dans le tableau 3.4. Un premier jeu de simulations est effectué en utilisant le modèle 3D pour différentes densités de maillage suivant l'épaisseur de la membrane. Les résultats obtenus sont ensuite comparés à ceux d'un calcul utilisant le modèle 2D avec des éléments de coque en contraintes planes. Les éléments finis utilisés lors de la modélisation 3D adoptent une formulation permettant d'éviter le blocage en flexion.

La figure 3.28 présente le déplacement observé au centre de la membrane en fonction du niveau de pression appliqué. On peut remarquer que les calculs 3D effectués avec 2 ou 4 éléments à interpolation linéaire dans l'épaisseur de la membrane donnent des résultats très proches. Ceci est un premier indicateur d'un état de contrainte faiblement non linéaire suivant l'épaisseur de la membrane. Le résultat obtenu avec le modèle 2D a quant à lui tendance à surestimer le déplacement d'environ 6 % lorsque le déplacement est le plus important. Nous considérerons cette erreur comme acceptable et pouvons donc va-

liser les résultats obtenus avec une modélisation par éléments de coque avec une loi de comportement formulée en contraintes planes.

Influence des facteurs de correction en cisaillement transverse

La simulation de structures utilisant des éléments finis de coque dans le logiciel Abaqus, couplée à l'utilisation d'une loi de comportement utilisateur *via* une subroutine UMAT, implique de négliger les contraintes de cisaillement transverse. Cependant, ces dernières sont prises en compte, dans la formulation des éléments de structure, par un facteur de correction calculé *a priori* avec des hypothèses élastiques (voir section 3.3.3). Le comportement des alliages à mémoire de forme étant par nature non-linéaire, nous allons étudier ici l'influence de la correction utilisée sur les prédictions obtenues dans un calcul de structure simulant le gonflement d'une membrane. Des simulations sont réalisées, en se basant sur une matrice de correction $[H_c]$ des cisaillements transverses calculée de la façon suivante :

$$[H_c] = \frac{5}{6}h \frac{E}{2(1+\nu)} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.95)$$

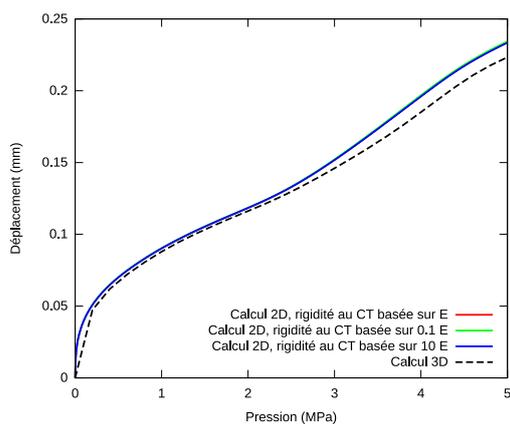
où h est l'épaisseur de la coque considérée, E et ν les coefficients d'élasticité linéaire.

Trois séries de simulations sont effectuées, en conservant une membrane de diamètre 2 mm et pour des épaisseurs de 0,01 mm, 0,1 mm et 0,2 mm. Le déplacement du sommet de la membrane en fonction de la pression appliquée est relevé. Les résultats obtenus avec la loi de comportement formulée en 2D contraintes planes et des rigidités de cisaillement transverse, basées sur le module d'Young ($E = 39\,500$ MPa) et des modules 10 fois plus grands ou plus faibles, sont comparés aux résultats d'une modélisation 3D (fig. 3.29). Pour cette dernière, l'épaisseur de la membrane est discrétisée en quatre éléments à interpolation linéaire (voir fig. 3.30) afin de tenir compte de l'hétérogénéité du champ de contraintes.

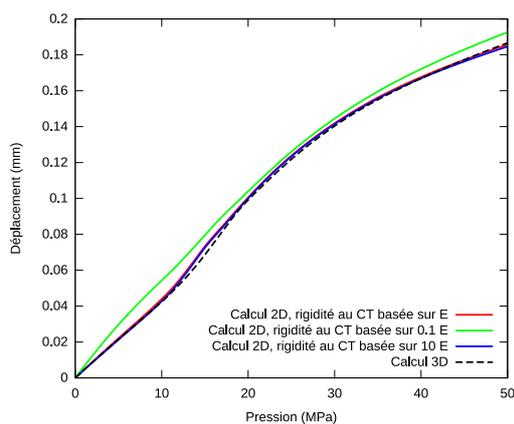
On peut remarquer que pour une faible épaisseur (0,01 mm), la rigidité de cisaillement transverse n'influe pas le résultat du calcul. Ceci s'explique par le fait que l'hypothèse de Kirchhoff ($L/h > 20$) est respectée. Pour les épaisseurs plus importantes où un cisaillement transverse est présent, la solution la plus proche du résultat de référence qu'est le calcul 3D est celle obtenue pour une rigidité de cisaillement transverse calculée à partir du module d'Young. On peut donc en conclure que la simulation de structures de type coque avec une loi de comportement formulée en 2D contraintes planes est validée. La rigidité au cisaillement transverse devra être calculée à partir du module d'Young qui est un des paramètres de la loi de comportement. Cependant, dans le cas de coques d'épaisseur importante (rapport diamètre / épaisseur de l'ordre de 10 dans le cas du gonflement d'une membrane), il est préférable de se tourner vers une modélisation à l'aide d'éléments 3D.

CONCLUSION DU CHAPITRE

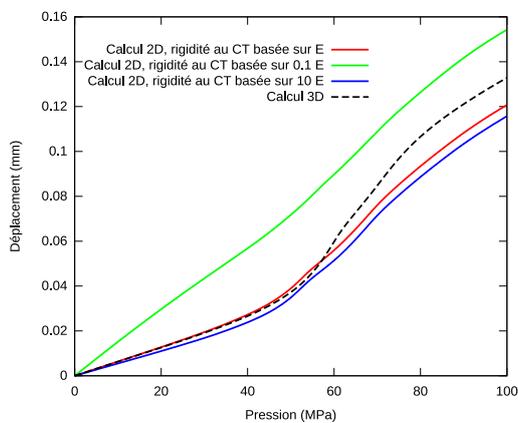
Le modèle de comportement développé dans le chapitre 2 a été implémenté avec succès dans le code de calcul par élément finis Abaqus. Sa formulation a été confrontée à des essais expérimentaux faisant intervenir des trajets de chargement complexes ainsi qu'à des essais numériques ayant pour objectif de valider son implémentation en 2D contraintes planes dans le cadre de calculs de structures faisant intervenir des éléments finis de coque. Ce dernier modèle est particulièrement intéressant pour le dimensionnement d'applications faisant intervenir des tôles ou des films minces d'AMF. Toutefois, les géométries extrêmement fines font apparaître des effets de taille qui ne peuvent être pris en compte par le présent modèle. L'objectif du chapitre suivant est d'étendre le modèle par une approche non locale dans le but de capter ces phénomènes.



(a) Épaisseur 0,01 mm.

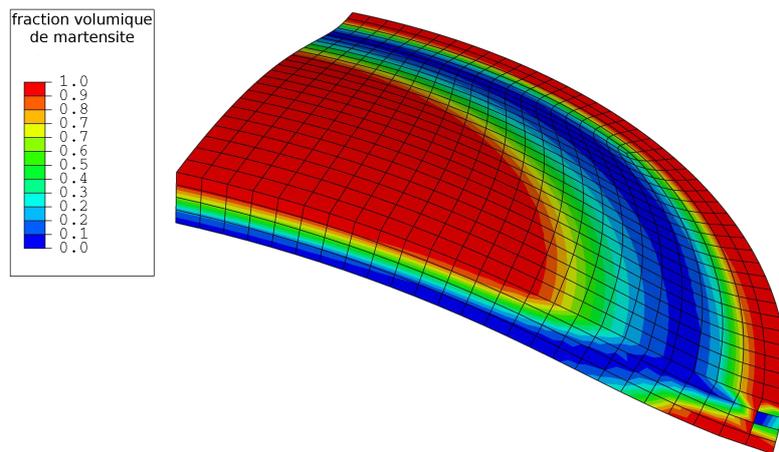


(b) Épaisseur 0,1 mm.

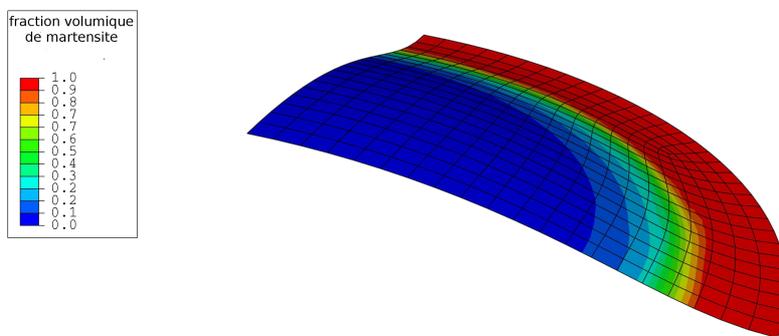


(c) Épaisseur 0,2 mm

FIG. 3.29 – Débattement d'une membrane sous pression. Étude de l'influence de la rigidité de cisaillement transverse.



(a) Modélisation 3D.



(b) Modélisation avec des éléments de coque.

FIG. 3.30 – Modélisation par éléments finis du gonflement d'une membrane. Répartition de la fraction volumique de martensite.

PRISE EN COMPTE DES EFFETS SPÉCIFIQUES AUX APPLICATIONS DE PETITE TAILLE

SOMMAIRE

4.1	DES EFFETS DE TAILLE À LA MODÉLISATION NON LOCALE	111
4.2	DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT FINI DE BARRE À APPROCHE NON LOCALE . . .	112
4.2.1	Notion de non localité	112
4.2.2	Application de l'approche non locale pour un comportement superélastique	114
4.2.3	Forme faible de l'équilibre	115
4.2.4	Discrétisation spatiale	116
4.2.5	Calcul des matrices de rigidité	118
4.2.6	Résolution numérique	119
4.2.7	Simulations et résultats	120
4.3	DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT 2D CONTRAINTES PLANES À APPROCHE NON LOCALE	124
4.3.1	Motivations	124
4.3.2	Formulation de la non localité	124
4.3.3	Formulation intégrale faible	125
4.3.4	Discrétisation spatiale	126
4.3.5	Loi de comportement	129
	CONCLUSION	130
	PERSPECTIVES	130

Les alliages à mémoire de forme sont des matériaux à fort potentiel pour des applications utilisant des dispositifs miniatures (électronique) ou microsystèmes. Ces derniers peuvent être sujets à de très importants effets de taille (voir chap. 1.6). Par ailleurs, des modèles de comportement, sans aucune référence à une quelconque longueur interne du matériau, sont incapables de capter de telles particularités. Une modélisation par une approche non locale est développée dans ce chapitre afin de pouvoir capter ce type de phénomènes.

4.1 DES EFFETS DE TAILLE À LA MODÉLISATION NON LOCALE

Selon Jirásek et Bažant [Jirásek et Bažant 2002], une partie des problèmes d'effet de taille¹ peut être reliée à un phénomène d'adoucissement. Ce dernier peut être causé par un endommagement ou entraîné par la déformation dans le cadre de la plasticité. Cependant, une formulation classique, basée sur une loi de comportement standard, perd son objectivité en présence d'adoucissement. Ceci signifie que la réponse du système matériel prédite par le modèle n'est plus unique et ne traduit pas la réalité physique de celui-ci. D'un point de vue mathématique, on parle d'une *perte d'ellipticité*². Ceci se traduit numériquement par une réponse de la structure qui dépend du maillage, une zone de localisation infinitésimale (obtenue par raffinement du maillage), une réponse force-déplacement présentant un phénomène de claquage et enfin une énergie dissipée nulle dans le cas d'un processus de rupture.

De tels problèmes peuvent être résolus en considérant une ou plusieurs imperfections (géométriques ou matérielles), présentes dans le milieu, par des approches dites non locales. Il s'agit, à travers ces techniques, d'enrichir les modèles continus standards en y introduisant des informations concernant la structure interne du matériau. On distingue deux types de stratégies non locales :

- les formulations intégrales, introduites par Eringen [Eringen 1966]
 - les formulations à gradients, apparues dans les années 1980 [Zbib et Aifantis 1988].
- C'est ce type d'approche qui va être utilisée dans ce travail.

Les modèles à gradient de variables internes sont l'équivalent différentiel de la formulation non-locale intégrale (1.3). Ainsi, au lieu d'introduire la non localité par des intégrales d'interactions spatiales, celle-ci est prise en compte par l'introduction de gradients de degrés élevés dans les équations de la loi de comportement du matériau. Deux catégories de modèles à gradient peuvent être distinguées :

Les modèles explicites qui introduisent directement dans les équations de la loi de comportement des termes faisant intervenir les gradients de variables internes.

Les modèles implicites qui introduisent un champ non local de variables internes, défini de façon implicite par une équation aux dérivées partielles à partir du champ local de variables internes.

D'un point de vue mathématique, les modèles explicites font partie de la catégorie des *théories à non localité faible* au sens où la réponse en chaque point matériel est conditionnée par un voisinage infinitésimal de celui-ci. Ceci est dû au fait que les gradients sont calculés à partir d'une distribution au sein d'un voisinage arbitrairement petit. Au contraire, les modèles à gradient implicite font partie de la catégorie des *théories à non localité forte* au sens où la réponse en chaque point est conditionnée par l'ensemble du domaine ou au moins par un voisinage fini du point considéré. Rogula [Rogula 1982] propose des définitions précises des concepts de non localité faible et forte.

Le présent travail s'intéresse de manière globale à la modélisation du comportement thermomécanique des AMF (NiTi). On envisage d'utiliser ce type de matériau sous la

¹Un effet de taille se traduit par une contrainte nominale qui dépend de la taille de la structure. Les exemples types sont :

- la contrainte ultime de cisaillement qui augmente quand le rayon du spécimen diminue dans les tests de microtorsion [Fleck et al. 1994]
- la microdureté (Rockwell) qui augmente quand la taille de l'indenteur diminue [Shu et Fleck 1998]
- la contrainte limite qui augmente quand l'épaisseur de la tôle diminue lors d'un essai de microflexion [Idiart et al. 2009]

²Dans le cas statique. Pour un problème dynamique, on parle d'hyperbolicité

forme d'une couche mince dont l'épaisseur est inférieure à 0,1 mm pour la fabrication d'une membrane utilisée comme élément actif d'une micropompe. Compte tenu de la faible épaisseur de la membrane, le modèle développé dans le cadre de la théorie locale n'est pas suffisant pour rendre compte d'éventuels phénomènes de localisation et/ou d'effet de taille. C'est pour cela que nous avons souhaité l'étendre au contexte non local.

Dans une première approche du problème, une version du modèle permettant de décrire uniquement le phénomène de superélasticité est utilisée. L'extension non locale est basée sur l'utilisation de gradients de variable interne (la fraction volumique de martensite). On considère ensuite que la structure présente une imperfection qui dégrade la contrainte critique de transformation.

La modélisation étant basée sur les gradients de variables internes, il est nécessaire d'avoir accès à cette grandeur en tout point de la structure. Aussi, dans le cadre d'un calcul de structures par éléments finis, ceci implique l'utilisation d'éléments finis spécifiques prenant en compte un champ non local de variables internes. Ce type d'élément n'étant pas disponible dans les codes de calcul, nous avons développé deux éléments finis : un élément de barre 1D et un élément bidimensionnel pour un problème en contraintes planes. Ces éléments présentent, en plus des degrés de liberté usuels que sont les déplacements aux nœuds, des degrés de liberté concernant la fraction non locale de martensite aux nœuds.

4.2 DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT FINI DE BARRE À APPROCHE NON LOCALE

4.2.1 Notion de non localité

Définition intégrale

La définition d'une quantité non locale est habituellement établie de façon intégrale [Pijaudier-Cabot et Bažant 1987, Strömberg et Ristinmaa 1996]. La variable non locale en un point de coordonnée x , la fraction non-locale de martensite \bar{f} dans le cas de la modélisation du comportement des AMF, est définie par une moyenne pondérée en tous points d'un milieu Ω :

$$\bar{f}(x) = \frac{1}{\Psi(x)} \int_{\Omega} \psi(y, x) f(y) d\Omega(y) \quad (4.1)$$

y est la position du domaine infinitésimal $d\Omega$ et $\psi(y, x)$ est la fonction de pondération qui peut être, par exemple, de type Gaussienne :

$$\psi(y, x) = \frac{1}{8\pi^{3/2}\ell^3} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4\ell^2}\right) \quad (4.2)$$

Le paramètre de longueur interne ℓ permet de déterminer la taille de la zone de contribution à la quantité non-locale. Ce paramètre est lié à une dimension caractéristique de la microstructure. Afin de retrouver le comportement local lorsque $\ell \rightarrow 0$ ($\bar{f}(x) = f(x)$), la fonction de normalisation $\Psi(x)$ est définie par :

$$\Psi(x) = \int_{\Omega} \psi(y, x) d\Omega(y) \quad (4.3)$$

Approximation explicite par un gradient

La quantité définie par l'intégrale (4.1) peut être approchée en décrivant f par un développement en séries de Taylor au voisinage de x :

$$f(y) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}(y-x) + \frac{1}{2!} \frac{d^2f(x)}{dx^2}(y-x)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3f(x)}{dx^3}(y-x)^3 + \frac{1}{4!} \frac{d^4f(x)}{dx^4}(y-x)^4 + \dots \quad (4.4)$$

L'intégrale 4.1 peut ainsi être évaluée en prenant en compte la propriété de parité de la fonction $\psi(y, x)$:

$$\bar{f}(x) = f(x) + c(\ell) f_{,xx}(x) + d(\ell) f_{,xxxx}(x) + \dots \quad (4.5)$$

En ignorant les termes de quatrième ordre et plus, on aboutit à l'approximation explicite suivante :

$$\bar{f}(x) = f(x) + c(\ell) f_{,xx}(x) \quad (4.6)$$

Le paramètre $c(\ell)$ dépend de la fonction de pondération choisie. Ici :

$$c(\ell) = \ell^2 \quad (4.7)$$

On parle ici d'une définition *explicite* car la quantité non locale \bar{f} peut être directement calculée à partir de la quantité locale f et de ses dérivées. Il faut noter que lorsque $\ell \rightarrow 0$ ou lorsque le champ de f est homogène, on retrouve le cadre de l'approche locale. De plus, bien qu'une longueur interne ℓ permette de gérer les interactions dans l'espace matériel considéré, cette approximation n'est que faiblement non locale comme montré par Peerlings *et al.* [Peerlings et al. 2001].

Approximation implicite par gradient

Le caractère faiblement non local de l'approximation par gradient (4.6) peut être amélioré en considérant des ordres plus importants du développement de Taylor. Ceci n'est cependant pas satisfaisant du point de vue de la résolution numérique. Il est toutefois possible de l'améliorer en partant de la dérivée seconde de l'équation (4.5) :

$$\bar{f}_{,xx}(x) = f_{,xx}(x) + c(\ell) f_{,xxxx}(x) + \dots \quad (4.8)$$

Cette relation est multipliée par $c(\ell)$ puis soustraite à l'équation (4.5) :

$$\bar{f}(x) - c(\ell) \bar{f}_{,xx}(x) = f(x) + (d(\ell) - c^2(\ell)) f_{,xxxx}(x) + \dots \quad (4.9)$$

Si les coefficients des termes d'ordre élevé, à commencer par $d(\ell) - c^2(\ell)$, sont ignorés, on obtient l'expression suivante :

$$\bar{f}(x) - c(\ell) \bar{f}_{,xx}(x) = f(x) \quad (4.10)$$

Cette relation est une expression par gradient implicite de l'intégrale (4.1). Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles (EDP) en terme de \bar{f} . L'approximation effectuée gagne en précision si la fonction de pondération choisie implique $d(\ell) - c^2(\ell) = 0$. Peerlings *et al.* [Peerlings et al. 2001] ont montré que la solution de cette EDP peut être déterminée par la méthode des fonctions de Green :

$$\bar{f}(x) = \int_{\Omega} G(y, x) f(y) d\Omega(y) \quad (4.11)$$

Cette expression adopte la fonction de Green $G(y, x)$ associée à l'équation (4.10) à la place de la fonction de Gauss usuelle. D'un point de vue mathématique, il s'agit d'une non localité forte (interaction avec un voisinage infini ou du moins plus large que dans le cas précédent).

Zauderer [Zauderer 1989] a proposé la fonction de Green suivante, impliquant $c(\ell) = \ell^2$:

$$G(x, y) = \frac{1}{4\pi\rho\ell^2} \exp\left(-\frac{\rho}{\ell}\right) \quad (4.12)$$

où $\rho = |x - y|$. Engelen *et al.* [Engelen et al. 2003] ont montré que cette fonction de pondération induit également que $d(\ell) - c^2(\ell) = 0$ pour un champ local arbitraire $f(x)$. On peut ainsi négliger les termes d'ordre élevé dans l'équation (4.9) lorsque la fonction de Green proposée est utilisée comme fonction de pondération. De plus, l'équation (4.10) permet de retrouver le champ local lorsque $\ell \rightarrow 0$

4.2.2 Application de l'approche non locale pour un comportement superélastique

On s'attache ici à valider l'approche non locale dans le cadre de la modélisation du comportement des AMF. Ici, un modèle simple est utilisé. Ce dernier ne modélise que l'effet superélastique et ne possède qu'une seule variable interne, la fraction volumique de martensite. Pour ce type de modèle, une seule force motrice liée à un processus de dissipation est à préciser, ici la force de transformation :

$$F_f = \Sigma - B(T - T_0) - \mathcal{F}(f, \bar{f}) \quad (4.13)$$

Où la fonction $\mathcal{F}(f, \bar{f})$ permet de prendre en compte l'influence de la non localité sur le processus de transformation martensitique. Dans le cas des alliages à mémoire de forme et de la modélisation de leur effet superélastique, la déformation inélastique de transformation de phase est liée à la fraction volumique de martensite et nécessairement bornée ($0 \leq f \leq 1$). Il est donc nécessaire d'introduire une limitation de la valeur locale de la fraction volumique de martensite. Pour ce faire, des pénalités identiques à celles utilisées pour le modèle standard sont introduites (voir chap. 2). De même, les interactions entre les différentes variantes pouvant apparaître sont prises en compte par un paramètre H_f positif portant sur la variable locale f . La dépendance à la variable non locale \bar{f} a quant à elle été reportée sur le terme dissipatif. On obtient alors l'expression de F_f :

$$F_f = \Sigma - B(T - T_0) - H_f f - \alpha_0 \frac{f-1}{f} - \alpha_1 \frac{f}{1-f} \quad (4.14)$$

Le terme dissipatif dérive de celui utilisé pour le modèle AMF exhaustif. Ici, on ne considère qu'une force critique, caractéristique d'une surface de charge analogue à celle d'un frottement sec. Cependant, la valeur de cette force critique va décroître en fonction de la valeur de la fraction volumique non locale de martensite afin de modéliser une pente locale négative de la courbe contrainte-déformation [Churchill et al. 2009]. Dans un souci de simplicité, les boucles internes ne seront pas prises en compte.

$$F_f^{crit} = F_{f_0}^{crit} \exp^{-H_{\bar{f}} \bar{f}} \quad (4.15)$$

où $H_{\bar{f}}$ et $F_{f_0}^{crit}$ sont des paramètres matériau.

L'équilibre du processus de transformation de phase s'écrit alors :

$$|F_f| \leq F_f^{crit} \quad (4.16)$$

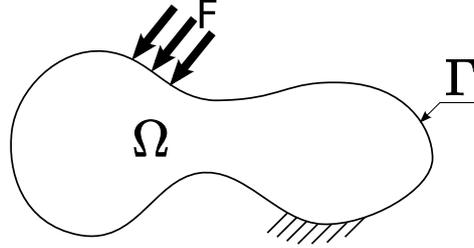


FIG. 4.1 – Schématisation du problème en un domaine Ω de frontière Γ sur laquelle s'appliquent des conditions aux limites.

Ainsi, dans un volume élémentaire représentatif pour une barre en 1D, la déformation totale s'exprime :

$$E = \frac{\Sigma}{Y} + E^T \quad (4.17)$$

où la déformation de transformation E^T s'exprime :

$$E^T = \dot{f} N \bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T \quad (4.18)$$

N représente la direction d'écoulement qui, en 1D, ne peut prendre que les valeurs -1 ou $+1$. De plus, notre modèle se limitant au cas de la superélasticité, la direction d'orientation de la martensite peut, en première approximation, être confondue avec celle de la contrainte. La loi de comportement considérée admet pour variables de contrôle la déformation totale E et la fraction non locale de martensite \bar{f} . Les inconnues sont quant à elles la contrainte Σ et la fraction locale de martensite f . La loi de comportement équilibrée peut se traduire sous une forme faisant intervenir des opérateurs tangents :

$$\begin{cases} \delta \Sigma = H^{uu} \delta E + H^{u\bar{f}} \delta \bar{f} \\ \delta f = H^{\bar{f}u} \delta E + H^{\bar{f}\bar{f}} \delta \bar{f} \end{cases} \quad (4.19)$$

4.2.3 Forme faible de l'équilibre

L'équilibre mécanique statique se traduit, en négligeant les forces internes :

$$\Sigma_{,x} = 0 \quad (4.20)$$

La relation entre les fractions locale et non locale de martensite est également introduite :

$$f = \bar{f} - \ell^2 \bar{f}_{,xx} \quad (4.21)$$

Si les conditions aux limites du problème mécanique restent classiques, la définition de la fraction non-locale de martensite fait appel à une condition aux limites de type Neumann :

$$\bar{f}_{,x} = 0 \quad \text{sur } \Gamma \quad (4.22)$$

où Γ représente la frontière du domaine Ω (voir fig. 4.1).

Ce type de condition aux limites est cohérent avec le fait que $\bar{f} = f$ pour une distribution homogène de la fraction de martensite ou pour le cas limite où $\ell \rightarrow 0$. De ce fait, la quantité totale de martensite est conservée au sein du domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \bar{f} d\Omega = \int_{\Omega} f d\Omega \quad (4.23)$$

On introduit deux espaces de champs virtuels :

$$\begin{aligned} W_u &= \{w_u \mid w_u \in [C^0]\} \\ W_{\bar{f}} &= \{w_{\bar{f}} \mid w_{\bar{f}} \in [C^0]\} \end{aligned} \quad (4.24)$$

ici, les w_u représentent les champs virtuels de déplacement cinématiquement admissibles et les $w_{\bar{f}}$ les champs associés à la fraction volumique de martensite.

En multipliant l'équation d'équilibre mécanique (4.20) par le champ virtuel w_u et en intégrant cette relation sur tout le domaine Ω , on obtient :

$$\int_{\Omega} w_u \Sigma_{,x} d\Omega = 0 \quad \forall w_u \in W_u \quad (4.25)$$

En procédant à une intégration par parties, on aboutit à l'égalité suivante :

$$\int_{\Omega} w_{u,x} \Sigma d\Omega - \int_{\Gamma} w_u T d\Gamma = 0 \quad \forall w_u \in W_u \quad (4.26)$$

T représente le vecteur contrainte appliqué à la frontière Γ du domaine Ω .

On procède de la même façon pour l'équation décrivant la fraction non locale de martensite :

$$\int_{\Omega} w_{\bar{f}} (\bar{f} - \ell^2 \bar{f}_{,xx}) d\Omega - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f d\Omega = 0 \quad (4.27)$$

L'égalité suivante est obtenue après intégration par parties en introduisant la condition aux limites de type Neumann 4.22 :

$$\int_{\Omega} (w_{\bar{f}} \bar{f} + \ell^2 w_{\bar{f},x} \bar{f}_{,x}) d\Omega - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f d\Omega = 0 \quad (4.28)$$

Ces deux équations sont ensuite linéarisées afin de faire apparaître les modules tangents définis dans (4.19) :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w_{u,x} (\Sigma^{(i-1)} + \delta \Sigma) d\Omega &= \int_{\Gamma} w_u T^{(i)} d\Gamma \\ \int_{\Omega} w_{u,x} \Sigma^{(i-1)} d\Omega + \int_{\Omega} w_{u,x} (H^{uu} \delta E + H^{u\bar{f}} \delta \bar{f}) d\Omega &= \int_{\Gamma} w_u T^{(i)} d\Gamma \\ \int_{\Omega} w_{u,x} H^{uu} \delta E d\Omega + \int_{\Omega} w_{u,x} H^{u\bar{f}} \delta \bar{f} d\Omega &= - \int_{\Omega} w_{u,x} \Sigma^{i-1} d\Omega + \int_{\Gamma} w_u T^{(i)} d\Gamma \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (w_{\bar{f}} \bar{f} + \ell^2 w_{\bar{f},x} \bar{f}_{,x}) d\Omega - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} (f^{(i-1)} + \delta f) d\Omega &= 0 \\ - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} (H^{\bar{f}u} \delta E + H^{\bar{f}\bar{f}} \delta \bar{f}) d\Omega + \int_{\Omega} (w_{\bar{f}} \delta \bar{f} + \ell^2 w_{\bar{f},x} \delta \bar{f}_{,x}) d\Omega &= 0 \\ - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f^{(i-1)} d\Omega + \int_{\Omega} (w_{\bar{f}} \bar{f}^{(i-1)} + \ell^2 w_{\bar{f},x} \bar{f}_{,x}^{(i-1)}) d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (4.30)$$

4.2.4 Discrétisation spatiale

L'élément développé est un élément barre 1D à deux noeuds. Chaque noeud comporte deux degrés de liberté : le déplacement u et la fraction non locale de martensite \bar{f} . On se rapporte à un élément isoparamétrique dont la coordonnée ζ varie entre -1 et $+1$. Le vecteur des déplacements aux noeuds est noté $\{u^N\}$ et le vecteur de fraction non locale

de martensite au noeuds $\{\bar{f}^N\}$. Par le biais des fonctions d'interpolation $[N_N^u]$ et $[N_N^{\bar{f}}]$, le déplacement et la fraction non locale de martensite peuvent être exprimés en tout point de l'élément de coordonnée ξ :

$$\begin{aligned} u &= [N_N^u] \{u^N\} & \text{avec} & \quad [N_N^u] = \begin{bmatrix} \frac{1-\xi}{2} & \frac{1+\xi}{2} \end{bmatrix} \\ \bar{f} &= [N_N^{\bar{f}}] \{\bar{f}^N\} & \text{avec} & \quad [N_N^{\bar{f}}] = \begin{bmatrix} \frac{1-\xi}{2} & \frac{1+\xi}{2} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.31)$$

On notera que les matrices d'interpolation sont les mêmes pour les deux degrés de liberté de nature différente que sont le déplacement et la fraction non locale de martensite. Ces matrices d'interpolation permettent également la calcul des champs virtuels en tout point :

$$\begin{aligned} \omega_u &= [N_N^u] \{\omega_u^N\} \\ \omega_{\bar{f}} &= [N_N^{\bar{f}}] \{\omega_{\bar{f}}^N\} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Les opérateurs $[B_N^u]$ et $[B_N^{\bar{f}}]$ permettent l'accès à la déformation et au gradient de fraction non-locale de martensite pour un point de coordonnée ξ de l'élément de référence :

$$\begin{aligned} E &= [B_N^u] \{u^N\} & \text{avec} & \quad [B_N^u] = \begin{bmatrix} -1/L & 1/L \end{bmatrix} = [N_{N,\xi}^u] \mathcal{J}^{-1} \\ \bar{f}, x &= [B_N^{\bar{f}}] \{\bar{f}^N\} & \text{avec} & \quad [B_N^{\bar{f}}] = \begin{bmatrix} -1/L & 1/L \end{bmatrix} = [N_{N,\xi}^{\bar{f}}] \mathcal{J}^{-1} \end{aligned} \quad (4.33)$$

où L représente la longueur de l'élément de structure et \mathcal{J} le jacobien de la transformation permettant de passer de l'élément de structure à l'élément de référence (voir fig. 4.2).

En introduisant les matrices d'interpolation et les opérateurs gradient dans les formes faibles des équations d'équilibre (4.29) et (4.30), on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} [B_N^u]^T H^{uu} [B_N^u] d\Omega \{\delta u^N\} + \int_{\Omega} [B_N^u]^T H^{u\bar{f}} [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\delta \bar{f}^N\} \\ &= - \int_{\Omega} [B_N^u]^T \Sigma^{(i-1)} d\Omega + \int_{\Gamma} [N_N^u]^T T^{(i)} d\Gamma \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} [N_N^{\bar{f}}]^T H^{\bar{f}u} [B_N^u] d\Omega \{\delta u^N\} - \int_{\Omega} [N_N^{\bar{f}}]^T H^{\bar{f}\bar{f}} [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\delta \bar{f}^N\} \\ & + \int_{\Omega} [N_N^{\bar{f}}]^T [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\delta \bar{f}^N\} + \int_{\Omega} \ell^2 [B_N^{\bar{f}}]^T [B_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\delta \bar{f}^N\} \\ &= \int_{\Omega} [N_N^{\bar{f}}]^T f^{(i-1)} d\Omega - \int_{\Omega} [N_N^{\bar{f}}]^T [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\bar{f}^{N(i-1)}\} \\ & - \int_{\Omega} \ell^2 [B_N^{\bar{f}}]^T [B_N^{\bar{f}}] d\Omega \{\bar{f}^{N(i-1)}\} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Les incréments des degrés de liberté aux noeuds sont reliés aux forces nodales résiduelles internes et externes par le biais d'une matrice de rigidité :

$$\begin{cases} [K^{uu}] \{\delta u^N\} + [K^{u\bar{f}}] \{\delta \bar{f}^N\} = - \{F_{\text{int}}^u\} + \{F_{\text{ext}}^u\} \\ [K^{\bar{f}u}] \{\delta u^N\} + [K^{\bar{f}\bar{f}}] \{\delta \bar{f}^N\} = - \{F_{\text{int}}^{\bar{f}}\} \end{cases} \quad (4.36)$$

Les forces et les sous-matrices de rigidité sont exprimées de façon intégrale sur le domaine de l'élément Ω_e à partir des modules tangents de la loi de comportement et des opérateurs d'interpolation :

$$\begin{aligned}
[K^{uu}] &= \int_{\Omega_e} [B_N^u]^T H^{uu} [B_N^u] d\Omega \\
[K^{u\bar{f}}] &= \int_{\Omega_e} [B_N^u]^T H^{u\bar{f}} [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \\
\{F_{\text{int}}^u\} &= \int_{\Omega_e} [B_N^u]^T \Sigma^{(i-1)} d\Omega \\
\{F_{\text{ext}}^u\} &= \int_{\Gamma_e} [N_N^u]^T T^{(i)} d\Gamma \\
[K^{\bar{f}u}] &= - \int_{\Omega_e} [N_N^{\bar{f}}]^T H^{\bar{f}u} [B_N^u] d\Omega \\
[K^{\bar{f}\bar{f}}] &= - \int_{\Omega_e} [N_N^{\bar{f}}]^T H^{\bar{f}\bar{f}} [N_N^{\bar{f}}] d\Omega + \int_{\Omega_e} [N_N^{\bar{f}}]^T [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \\
&\quad + \int_{\Omega_e} \ell^2 [B_N^{\bar{f}}]^T [B_N^{\bar{f}}] d\Omega \\
\{F_{\text{int}}^{\bar{f}}\} &= - \int_{\Omega_e} [N_N^{\bar{f}}]^T f^{(i-1)} d\Omega + \int_{\Omega_e} [N_N^{\bar{f}}]^T [N_N^{\bar{f}}] d\Omega \\
&\quad + \int_{\Omega_e} \ell^2 [B_N^{\bar{f}}]^T [B_N^{\bar{f}}] \left\{ \bar{f}^{N^{(i-1)}} \right\} d\Omega
\end{aligned} \tag{4.37}$$

4.2.5 Calcul des matrices de rigidité

Les matrices de rigidité $[K^{ij}]$ étant définies de façon intégrale, il est nécessaire de procéder à une intégration numérique sur tout le domaine défini par l'élément Ω_e . Pour ce faire, une intégration de Gauss est utilisée. Deux points de Gauss sont définis dans l'élément de référence, aux coordonnées $-1/\sqrt{3}$ et $1/\sqrt{3}$. Chacun de ces points a un poids noté ω_i . Dans le cas de l'élément de référence considéré, les poids sont de 1. Les sous-matrices de rigidité se calculent ainsi de la façon suivante :

$$[K^{uu}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{L^2} & -\frac{1}{L^2} \\ -\frac{1}{L^2} & \frac{1}{L^2} \end{bmatrix} \sum_{i=1}^2 \omega_i H^{uu}(\xi_i) \mathcal{J}(\xi_i) \tag{4.38}$$

$$[K^{u\bar{f}}] = \sum_{i=1}^2 \omega_i \begin{bmatrix} \frac{\xi_i-1}{2L} & -\frac{1+\xi_i}{2L} \\ -\frac{\xi_i-1}{2L} & \frac{1+\xi_i}{2L} \end{bmatrix} H^{u\bar{f}}(\xi_i) \mathcal{J}(\xi_i) \tag{4.39}$$

$$[K^{\bar{f}u}] = - \sum_{i=1}^2 \omega_i \begin{bmatrix} \frac{\xi_i-1}{2L} & -\frac{\xi_i-1}{2L} \\ -\frac{1+\xi_i}{2L} & \frac{1+\xi_i}{2L} \end{bmatrix} H^{\bar{f}u}(\xi_i) \mathcal{J}(\xi_i) \tag{4.40}$$

$$\begin{aligned}
[K^{\bar{f}\bar{f}}] &= \sum_{i=1}^2 \omega_i \left(\begin{bmatrix} \frac{(\xi_i-1)^2}{4} & -\frac{(\xi_i-1)(\xi_i+1)}{4} \\ -\frac{(\xi_i-1)(\xi_i+1)}{4} & \frac{(\xi_i+1)^2}{4} \end{bmatrix} (1 - H^{\bar{f}\bar{f}}(\xi_i)) \right. \\
&\quad \left. + \ell^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{L^2} & -\frac{1}{L^2} \\ -\frac{1}{L^2} & \frac{1}{L^2} \end{bmatrix} \right) \mathcal{J}(\xi_i)
\end{aligned} \tag{4.41}$$

où \mathcal{J} est le jacobien de la transformation \mathcal{F} permettant le passage de l'élément de structure à l'élément de référence (voir fig. 4.2)

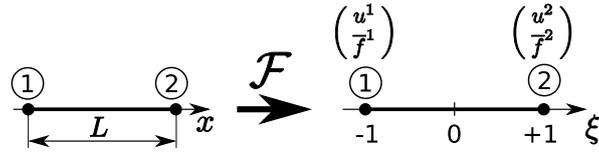


FIG. 4.2 – Passage d'un élément de structure à l'élément de référence.

Pour les forces internes , on obtient :

$$\{F_{int}^u\} = \begin{bmatrix} -1/L \\ 1/L \end{bmatrix} \sum_{i=1}^2 \omega_i \Sigma^{(i-1)}(\xi_i) \mathcal{J}(\xi_i) \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} \{F_{int}^{\bar{f}}\} &= - \sum_{i=1}^2 \omega_i \begin{bmatrix} \frac{1-\xi_i}{2} \\ \frac{1+\xi_i}{2} \end{bmatrix} f^{(i-1)}(\xi_i) \mathcal{J}(\xi_i) \\ &+ \left(\sum_{i=1}^2 \omega_i \begin{bmatrix} \frac{(\xi_i-1)^2}{4} & -\frac{(\xi_i-1)(\xi_i+1)}{4} \\ -\frac{(\xi_i-1)(\xi_i+1)}{4} & \frac{(\xi_i+1)^2}{4} \end{bmatrix} \right. \\ &\left. + \ell^2 \begin{bmatrix} 1/L^2 & -1/L^2 \\ -1/L^2 & 1/L^2 \end{bmatrix} \right) \mathcal{J}(\xi_i) \begin{bmatrix} \bar{f}^{1(i-1)} \\ \bar{f}^{2(i-1)} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.43)$$

4.2.6 Résolution numérique

Afin de calculer les grandeurs H^{uu} , $H^{u\bar{f}}$, $H^{\bar{f}u}$ et $H^{\bar{f}\bar{f}}$ dans les expressions des sous-matrices de rigidité de l'élément, il est nécessaire de résoudre les équations implicites de la loi de comportement et d'en extraire ses opérateurs tangents. Le choix des degrés de liberté de l'élément oriente la procédure numérique vers la résolution d'un problème où les variables de contrôle sont la déformation totale E et la fraction non locale de martensite \bar{f} . Ce problème aura donc pour inconnues la contrainte Σ et la fraction locale de martensite f .

Dans un premier temps, une prédiction élastique de l'état de contrainte est effectuée. Suivant cette prédiction, deux cas sont à considérer :

– Le cas élastique :

$$\begin{cases} \Sigma = YE - YfN\bar{\epsilon}_{sat}^T \\ \Delta f = 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

– La cas d'une transformation martensitique :

$$\begin{cases} \Sigma = YE - YfN\bar{\epsilon}_{sat}^T \\ \text{signe}(F_f) \left(\Sigma - B(T - T_0) - \mathcal{F}(f, \bar{f}) \right) = F_f^{crit} \end{cases} \quad (4.45)$$

Deux résidus peuvent alors être écrits, R_f pour la transformation et R_σ pour la contrainte. Dans chaque cas :

– cas élastique :

$$\begin{aligned} R_f &= \Delta f \\ R_\sigma &= \Sigma - YE + YfN\bar{\epsilon}_{sat}^T \end{aligned} \quad (4.46)$$

– cas d'une transformation de phase :

$$\begin{aligned} R_f &= \text{signe}(F_f) \left(\Sigma - B(T - T_0) - \mathcal{F}(f, \bar{f}) \right) - F_f^{crit} \\ R_\sigma &= \Sigma - YE + YfN\bar{\epsilon}_{sat}^T \end{aligned} \quad (4.47)$$

De la même manière que pour la loi de comportement 3D (voir chap. 3), les incréments des variables de contrôle sont regroupés dans un vecteur ΔY et ceux des inconnues dans un vecteur ΔX . La procédure de résolution par un algorithme de Newton-Raphson amorti est la même. Concernant le calcul des opérateurs tangents nécessaires à la construction de la matrice de rigidité, les égalités suivantes sont posées :

$$\begin{aligned} H^{uu} &= \frac{\partial \Delta \Sigma}{\partial \Delta E} & H^{u\bar{f}} &= \frac{\partial \Delta \Sigma}{\partial \Delta \bar{f}} \\ H^{\bar{f}u} &= \frac{\partial \Delta f}{\partial \Delta E} & H^{\bar{f}\bar{f}} &= \frac{\partial \Delta f}{\partial \Delta \bar{f}} \end{aligned} \quad (4.48)$$

La condition d'équilibre local s'écrit :

$$\mathcal{J}_X \delta \Delta X + \mathcal{J}_Y \delta \Delta Y = 0 \quad (4.49)$$

avec les jacobiens :

$$\mathcal{J}_X = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_\sigma}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial R_\sigma}{\partial \Delta \bar{f}} \\ \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{f}} \end{bmatrix} \quad \mathcal{J}_Y = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_\sigma}{\partial \Delta E} & \frac{\partial R_\sigma}{\partial \Delta \bar{f}} \\ \frac{\partial R_f}{\partial \Delta E} & \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{f}} \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

Les opérateurs tangents sont ensuite extraits de la matrice $\frac{\partial \Delta X}{\partial \Delta Y}$ obtenue par la relation :

$$\frac{\partial \Delta X}{\partial \Delta Y} = -\mathcal{J}_X^{-1} \mathcal{J}_Y \quad (4.51)$$

4.2.7 Simulations et résultats

Étude de l'influence du paramètre de longueur interne

Un cas simple permettant la mise en évidence de l'effet de localisation consiste à considérer une barre dont la zone centrale serait affaiblie (section où la force critique de début de transformation est plus faible) (voir fig. 4.3). Dans un premier temps, cette dernière est discrétisée en 180 éléments afin d'étudier l'influence du paramètre de longueur interne ℓ . Une extrémité de la barre est bloquée en déplacement et l'autre subit un déplacement imposé jusqu'à atteindre une élongation totale de la barre de 6 %. La transformation martensitique se propageant de façon symétrique de part et d'autre de la barre, l'origine des coordonnées est prise au centre de la zone affaiblie. Il faut noter que pour simuler ce type de structure, il n'est pas nécessaire de spécifier de condition aux limites sur les degrés de liberté \bar{f} . En effet, seul la condition aux limites de Neumann $\bar{f}_{,x} = 0$ sur Γ s'applique, et cette dernière est prise en compte de façon implicite dans la formulation de l'élément. Les paramètres géométriques et matériau de cette simulation sont présentés dans le tableau 4.1.

La réponse force-déplacement de la barre est ramenée en terme de contrainte et élongation globale. Les réponses obtenues pour différentes valeurs de ℓ sont comparées à la loi de comportement locale (obtenue pour $f = \bar{f}$) et présentées dans la figure 4.4. On peut noter que le phénomène de localisation (pic de contrainte suivi d'un plateau) est observable pour les valeurs de ℓ petites devant la taille de l'hétérogénéité. Pour ces essais ($\ell = 4$ mm et $\ell = 10$ mm), on retrouve bien le type de comportement décrit par Churchill [Churchill et al. 2009]. On notera que les simulations effectuées pour des valeurs de ℓ plus petites n'ont pas convergé. En effet, pour ces petites valeurs, la moindre hétérogénéité numérique obtenue sur la réponse de la structure provoque une localisation. Cette dernière peut alors avoir lieu hors de la zone affaiblie, provoquant ainsi une non-unicité de la solution.

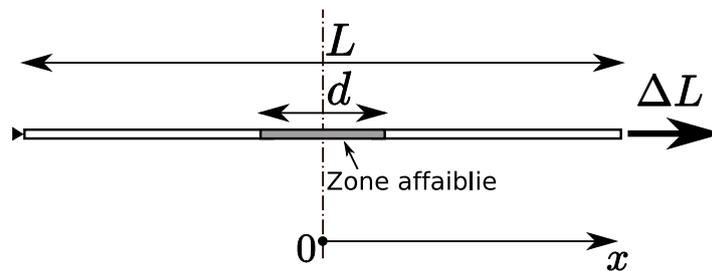


FIG. 4.3 – Essais de traction sur une barre dont la zone centrale est affaiblie.

L	200 mm
d	40 mm
S	1,3 mm ²
B	5 MPa / °C
T	25 °C
T_0	-40 °C
$F_{f_0}^{crit}$	150 MPa (nominal)
$F_{f_0}^{crit}$	140 MPa (zone affaiblie)
H_f	1 MPa
$H_{\bar{f}}$	4
γ	70 000 MPa
ε_{SAT}^T	0,05
α_0	0,1
α_1	0,1

TAB. 4.1 – Paramètres de simulation utilisés pour l'essai de traction sur une barre affaiblie.

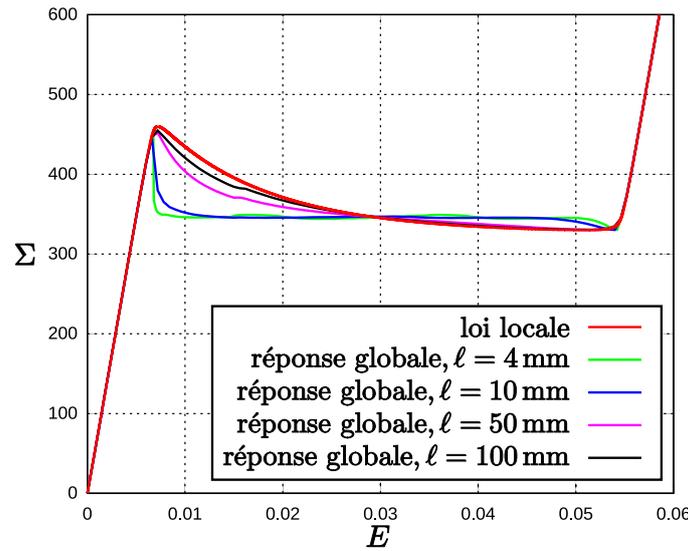
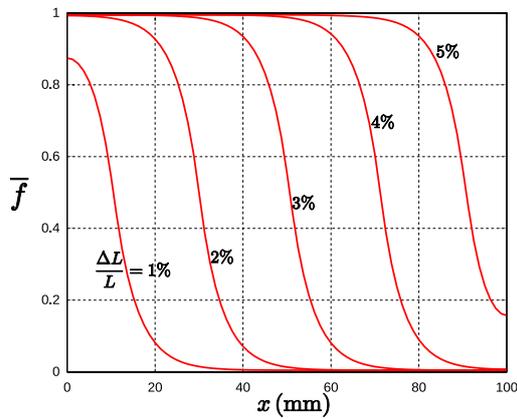


FIG. 4.4 – Réponse d'une barre affaiblie sollicitée en traction pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne ℓ .

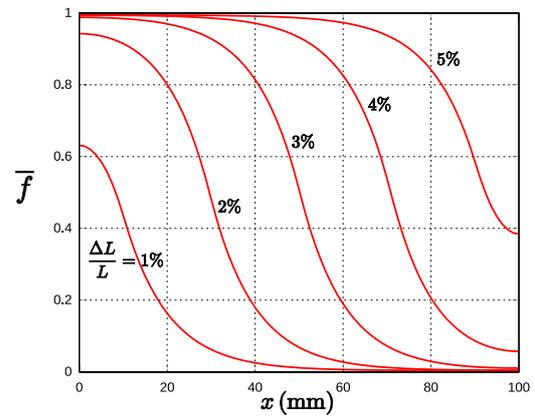
Pour des valeurs de ℓ grandes devant la taille de l'hétérogénéité, le comportement local est retrouvé. La transformation de phase ne localise que très faiblement et la réponse de la structure est globalement homogène. Ceci peut notamment être observé sur la figure 4.5 qui présente la distribution spatiale de la fraction non-locale de martensite au cours du chargement.

Étude de la sensibilité au maillage

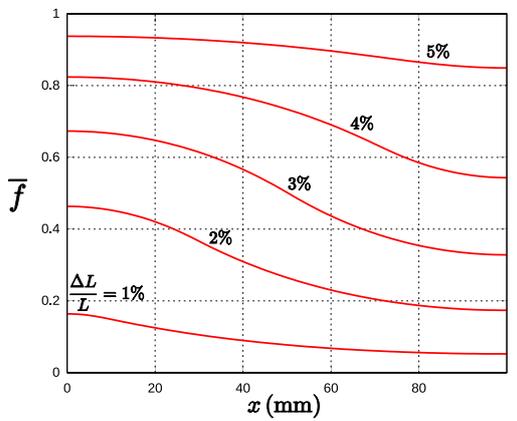
Afin de tester la stabilité de la solution par rapport à la finesse du maillage, le cas test précédent pour lequel une forte localisation de la transformation est observée ($\ell = 4$ mm) est simulé pour différentes densités de maillage. La réponse force-déplacement de la structure est présentée dans la figure 4.6. On peut remarquer que le fait de diminuer le nombre d'éléments fait apparaître des oscillations dans la réponse de la structure. Ces oscillations correspondent à la propagation brutale de la transformation martensitique d'un élément à l'autre. En effet, l'interpolation réalisée dans les éléments est linéaire, ce qui fait que le gradient de la fraction non locale de martensite $\bar{f}_{,x}$ est constant pour un élément donné. De ce fait, si la longueur de l'élément est grande devant la longueur interne, la contribution de la non localité sur la loi de comportement est altérée. On peut cependant noter que, pour un niveau de chargement donné, la répartition spatiale de la fraction non-locale de martensite reste cohérente quel que soit le type de maillage utilisé (voir fig. 4.7). Cette faiblesse de l'approche non-locale utilisée peut être résolue en adaptant, pour une structure donnée, la taille du maillage à la valeur du paramètre de longueur interne utilisé ou en adoptant des éléments finis possédant des fonctions d'interpolation de degré plus élevé.



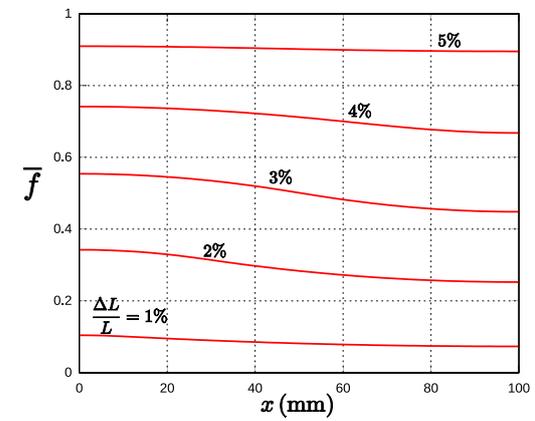
(a) $l = 4 \text{ mm}$.



(b) $l = 10 \text{ mm}$.



(c) $l = 50 \text{ mm}$.



(d) $l = 100 \text{ mm}$.

FIG. 4.5 – Distribution spatiale de la variable non locale \bar{f} au cours du chargement pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne l .

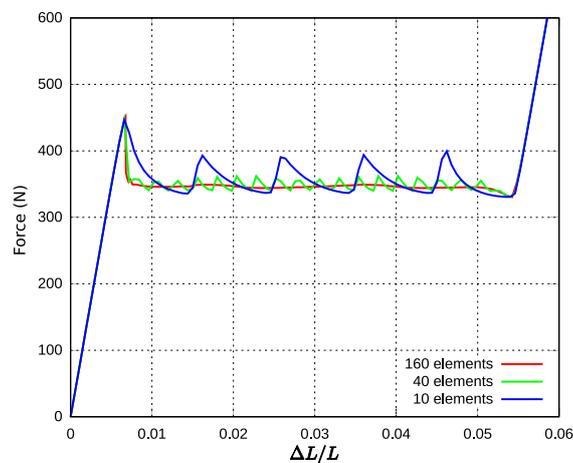


FIG. 4.6 – Influence du maillage sur la réponse force déplacement d'une poutre affaiblie.

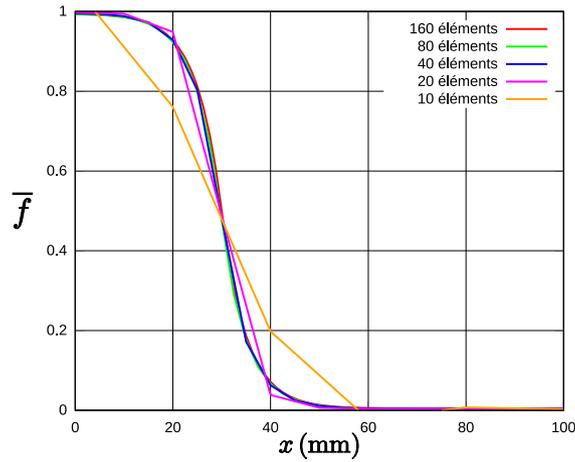


FIG. 4.7 – Répartition spatiale de la quantité \bar{f} pour différentes densités de maillage à un état de chargement correspondant à une elongation globale de 2 %.

4.3 DÉVELOPPEMENT D'UN ÉLÉMENT 2D CONTRAINTES PLANES À APPROCHE NON LOCALE

4.3.1 Motivations

La modélisation du comportement des AMF par une approche non locale 1D s'applique à des structures unidimensionnelles telles que des fils. On souhaite étendre ce type d'approche aux structures bidimensionnelles telles que les films minces. Ces derniers peuvent notamment être utilisés dans le cadre d'applications microfluidiques (micropompes) où les niveaux de déformation pouvant être atteints par les AMF sont intéressants pour des applications fonctionnant à faible fréquence et à débit élevé.

4.3.2 Formulation de la non localité

Dans le cas 2D, la formulation intégrale de la variable non locale (équation 4.1) s'écrit :

$$\bar{f}(\vec{x}) = \int_{\Omega} G(\vec{y}, \vec{x}) f(\vec{y}) d\Omega(\vec{y}) \quad (4.52)$$

avec $G(\vec{y}, \vec{x})$:

$$G(\vec{y}, \vec{x}) = \frac{1}{4\pi\rho\ell^2} \exp\left(-\frac{\rho}{\ell}\right) \quad (4.53)$$

où

$$\rho = |\vec{x} - \vec{y}| = \sqrt{\sum_{i=1}^2 (x_i - y_i)^2} \quad (4.54)$$

Le développement en séries de Taylor de $f(\vec{y})$ au voisinage du point \vec{x} est donné

par :

$$\begin{aligned}
f(\vec{y}) = & f(\vec{x}) + \frac{\partial f}{\partial x_i} (y_i - x_i) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (y_i - x_i) (y_j - x_j) \\
& + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} (y_i - x_i) (y_j - x_j) (y_k - x_k) \\
& + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k \partial x_l} (y_i - x_i) (y_j - x_j) (y_k - x_k) (y_l - x_l) \\
& + \dots
\end{aligned} \tag{4.55}$$

où la convention d'Einstein de sommation sur les indices i, j, k, l, \dots doit être appliquée. Ce développement remplace dès lors l'expression de $f(\vec{y})$ dans l'équation (4.52).

La parité de la fonction $G(\vec{y}, \vec{x})$ permet de simplifier cette relation. Les calculs sont détaillés en annexe A.3. On aboutit alors à une expression similaire à celle obtenue dans le cas 1D :

$$\bar{f}(\vec{x}) = f(\vec{x}) + c(\ell) \nabla^2 f(\vec{x}) + d(\ell) \nabla^4 f(\vec{x}) + \dots \tag{4.56}$$

où ∇^2 représente l'opérateur laplacien :

$$\nabla^2 = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \tag{4.57}$$

Afin de modéliser une non localité forte (formulation par gradient implicite ayant pour terme source la variable non locale), on pose :

$$\bar{f}(\vec{x}) - \ell^2 \nabla^2 \bar{f}(\vec{x}) = f(\vec{x}) \tag{4.58}$$

Cette équation vient s'ajouter à celle de l'équilibre mécanique statique dans le cas de forces de volume nulles. Le problème mécanique est alors régi par les équations aux dérivées partielles suivantes :

$$\begin{cases} \bar{f}(\vec{x}) - \ell^2 \bar{f}_{,ii}(\vec{x}) = f(\vec{x}) \\ \Sigma_{ij,j} = 0 \end{cases} \tag{4.59}$$

auxquelles s'ajoutent les conditions aux limites.

C'est ce système d'EDP que va devoir résoudre l'élément développé ci-après, QPS4SMANL (Quadrangle Plane Stress 4 nœuds Shape Memory Alloy Non Local).

4.3.3 Formulation intégrale faible

On admet, dans un premier temps, l'existence d'une loi de comportement faisant intervenir des opérateurs tangents, ces derniers seront développés plus loin dans le chapitre :

$$\begin{cases} \delta \Sigma_{ij} = H_{ijkl}^{uu} \delta E_{kl} + H_{ij}^{u\bar{f}} \delta \bar{f} \\ \delta f = H_{kl}^{\bar{f}u} \delta E_{kl} + H^{\bar{f}\bar{f}} \delta \bar{f} \end{cases} \tag{4.60}$$

On admet également l'existence des espaces de champs virtuels W_u et $W_{\bar{f}}$ associés respectivement aux espaces des déplacements et de la variable fraction non locale de martensite :

$$\begin{aligned}
W_u &= \{ \vec{w}_u \setminus \vec{w}_u \in [C^0]^2 \} \\
W_{\bar{f}} &= \{ w_{\bar{f}} \setminus w_{\bar{f}} \in [C^0] \}
\end{aligned} \tag{4.61}$$

La formulation faible de l'équation mécanique s'obtient en multipliant l'équation mécanique (4.59) par \vec{w}_u et en intégrant sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \vec{w}_u \cdot \vec{\nabla} \Sigma d\Omega = 0 \quad \forall \vec{w}_u \in W_u \quad (4.62)$$

En procédant à une intégration par parties, il vient :

$$\int_{\Omega} \left[\vec{\nabla} \vec{w}_u \right]^T : \Sigma d\Omega = \int_{\Gamma} \vec{w}_u \cdot \vec{T} d\Gamma \quad \forall \vec{w}_u \in W_u \quad (4.63)$$

où $\vec{T} = \Sigma \cdot \vec{n}$ représente le vecteur contrainte à la frontière Γ du domaine Ω .

De la même façon, une formulation intégrale faible est écrite pour l'équation implicite de la fraction non locale de martensite, faisant intervenir cette fois-ci le champ virtuel $w_{\bar{f}}$:

$$\int_{\Omega} w_{\bar{f}} \left(\bar{f} - \ell^2 \nabla^2 \bar{f} \right) d\Omega = \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f d\Omega \quad (4.64)$$

On procède à nouveau à une intégration par parties en prenant en compte la condition aux limites de type Neumann ($\vec{\nabla} \bar{f} = \vec{0}$ sur Γ) :

$$\int_{\Omega} w_{\bar{f}} \bar{f} + \ell^2 \vec{\nabla} w_{\bar{f}} \cdot \vec{\nabla} \bar{f} d\Omega = \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f d\Omega \quad (4.65)$$

Les équations (4.63) et (4.65) sont ensuite linéarisées en faisant intervenir les opérateurs tangents de la loi de comportement :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\vec{\nabla} \vec{w}_u \right]^T : (H^{uu} : \delta E) d\Omega + \int_{\Omega} \left[\vec{\nabla} \vec{w}_u \right]^T : (H^{u\bar{f}} \delta \bar{f}) d\Omega \\ & = \int_{\Gamma} \vec{w}_u \cdot \vec{T}^{(i)} d\Gamma - \int_{\Omega} \left[\vec{\nabla} \vec{w}_u \right]^T : \Sigma^{(i-1)} d\Omega \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} H^{\bar{f}u} : \delta E d\Omega + \int_{\Omega} w_{\bar{f}} \left(1 - H^{\bar{f}\bar{f}} \right) \delta \bar{f} + \ell^2 \vec{\nabla} w_{\bar{f}} \cdot \vec{\nabla} \delta \bar{f} d\Omega \\ & = - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} \bar{f}^{(i-1)} + \ell^2 \vec{\nabla} w_{\bar{f}} \cdot \vec{\nabla} \bar{f}^{(i-1)} d\Omega + \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f^{(i-1)} d\Omega \end{aligned} \quad (4.67)$$

4.3.4 Discrétisation spatiale

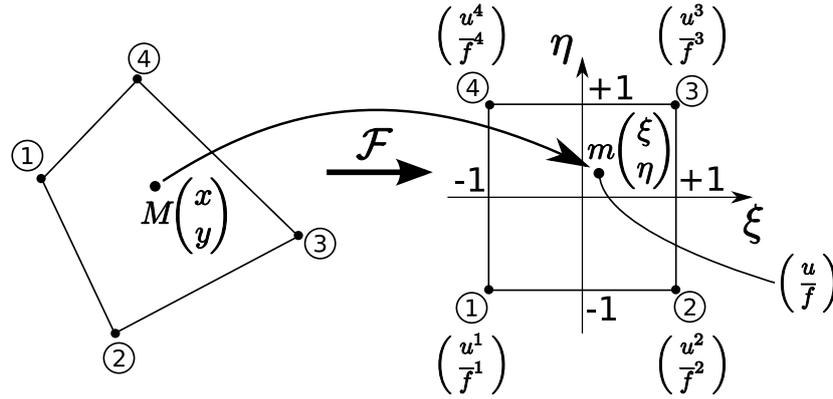
La résolution des équations aux dérivées partielles régissant l'équilibre est effectuée par la méthode des éléments finis. Dans le cadre du calcul en deux dimensions, nous nous attacherons à la définition d'un élément de forme quadrangulaire à quatre noeuds et quatre points d'intégration. Cet élément peut être ramené à un élément de référence ayant pour coordonnées ξ et η , représenté sur la figure 4.8.

Il est ainsi possible, pour un point de cet élément de coordonnées (ξ, η) , de connaître son vecteur déplacement en fonction des déplacements aux noeuds :

$$\begin{aligned} \vec{u} &= \frac{1}{4} (1 - \xi) (1 - \eta) \vec{u}^1 + \frac{1}{4} (1 + \xi) (1 - \eta) \vec{u}^2 \\ &+ \frac{1}{4} (1 + \xi) (1 + \eta) \vec{u}^3 + \frac{1}{4} (1 - \xi) (1 + \eta) \vec{u}^4 \end{aligned} \quad (4.68)$$

Cette expression peut être reformulée en faisant intervenir le vecteur des déplacements aux noeuds $\{u^N\}$ et la matrice d'interpolation des déplacements $[N_N^u]$:

$$\vec{u}(\xi, \eta) = [N_N^u] \{u^N\} \quad (4.69)$$

FIG. 4.8 – Passage d'un élément quadrangle de structure à un élément de référence par la transformation \mathcal{F} .

où :

$$\{u^N\} = \begin{Bmatrix} u^1 \\ v^1 \\ u^2 \\ v^2 \\ u^3 \\ v^3 \\ u^4 \\ v^4 \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{u}(\xi, \eta) = \begin{Bmatrix} u(\xi, \eta) \\ v(\xi, \eta) \end{Bmatrix} \quad (4.70)$$

On peut alors en déduire l'expression de la matrice d'interpolation des déplacements $[N_N^u]$:

$$[N_N^u(\xi, \eta)] = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

où les fonction N_i sont définies par :

$$\begin{aligned} N_1(\xi, \eta) &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)}{4} \\ N_2(\xi, \eta) &= \frac{(1+\xi)(1-\eta)}{4} \\ N_3(\xi, \eta) &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)}{4} \\ N_4(\xi, \eta) &= \frac{(1-\xi)(1+\eta)}{4} \end{aligned} \quad (4.72)$$

La même procédure est appliquée à la fraction volumique non locale de martensite :

$$\bar{f}(\xi, \eta) = [N_N^{\bar{f}}] \{\bar{f}^N\} \quad (4.73)$$

avec les valeurs nodales de la fraction non locale :

$$\{\bar{f}\} = \begin{Bmatrix} \bar{f}^1 \\ \bar{f}^2 \\ \bar{f}^3 \\ \bar{f}^4 \end{Bmatrix} \quad (4.74)$$

D'où la matrice d'interpolation qui fait intervenir les mêmes expressions que pour les déplacements :

$$[N_N^f(\xi, \eta)] = [N_1 \ N_2 \ N_3 \ N_4] \quad (4.75)$$

Le vecteur représentant le tenseur des déformations est exprimé à partir du gradient des déplacements en faisant intervenir l'opérateur matriciel de déformation $[M^{def}]$:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (4.76)$$

$$\begin{Bmatrix} E_{xx} \\ E_{yy} \\ 2E_{xy} \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}}^{[M^{def}]} \begin{Bmatrix} u_{,x} \\ u_{,y} \\ v_{,x} \\ v_{,y} \end{Bmatrix} \quad (4.77)$$

Pour travailler avec l'élément de référence, on fait intervenir le jacobien $[\mathcal{J}]$:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{Bmatrix} = [\mathcal{J}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{Bmatrix} \quad (4.78)$$

et la relation inverse :

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{Bmatrix} = [\mathcal{J}]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{Bmatrix} \quad (4.79)$$

Le jacobien se calcule ensuite à partir des fonctions d'interpolation de la manière suivante :

$$[\mathcal{J}] = \begin{bmatrix} N_{1,\xi} & N_{2,\xi} & N_{3,\xi} & N_{4,\xi} \\ N_{1,\eta} & N_{2,\eta} & N_{3,\eta} & N_{4,\eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^1 & y^1 \\ x^2 & y^2 \\ x^3 & y^3 \\ x^4 & y^4 \end{bmatrix} \quad (4.80)$$

D'où l'expression du gradient de déplacement dans l'élément spatial où la matrice $[M^{trans}]$ permet de tenir compte de la transformation de l'élément réel vers l'élément de référence :

$$\begin{Bmatrix} u_{,x} \\ u_{,y} \\ v_{,x} \\ v_{,y} \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} [\mathcal{J}]^{-1} & [0] \\ [0] & [\mathcal{J}]^{-1} \end{bmatrix}}^{[M^{trans}]} \begin{Bmatrix} u_{,\xi} \\ u_{,\eta} \\ v_{,\xi} \\ v_{,\eta} \end{Bmatrix} \quad (4.81)$$

avec la matrice des gradients de fonctions d'interpolation M^{grad} :

$$\begin{Bmatrix} u_{,\xi} \\ u_{,\eta} \\ v_{,\xi} \\ v_{,\eta} \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} N_{1,\xi} & 0 & N_{2,\xi} & 0 & N_{3,\xi} & 0 & N_{4,\xi} & 0 \\ N_{1,\eta} & 0 & N_{2,\eta} & 0 & N_{3,\eta} & 0 & N_{4,\eta} & 0 \\ 0 & N_{1,\xi} & 0 & N_{2,\xi} & 0 & N_{3,\xi} & 0 & N_{4,\xi} \\ 0 & N_{1,\eta} & 0 & N_{2,\eta} & 0 & N_{3,\eta} & 0 & N_{4,\eta} \end{bmatrix}}^{[M^{grad}]} \begin{Bmatrix} u^1 \\ v^1 \\ u^2 \\ v^2 \\ u^3 \\ v^3 \\ u^4 \\ v^4 \end{Bmatrix} \quad (4.82)$$

L'opérateur matriciel $[B_N^u]$ permet de calculer les déformations en un point de coordonnées (ξ, η) à partir des déplacements nodaux. Il s'écrit en faisant intervenir les matrices explicitées dans les équations (4.77), (4.81) et (4.82) :

$$\{E\} = [B_N^u] \{u^N\} = [M^{def}] [M^{trans}] [M^{grad}] \{u^N\} \quad (4.83)$$

En suivant la même démarche, le vecteur gradient de fraction non locale de martensite s'exprime :

$$\left\{ \begin{array}{c} \bar{f}_{,x} \\ \bar{f}_{,y} \end{array} \right\} = [\mathcal{J}]^{-1} \left[\begin{array}{cccc} N_{1,\xi} & N_{2,\xi} & N_{3,\xi} & N_{4,\xi} \\ N_{1,\eta} & N_{2,\eta} & N_{3,\eta} & N_{4,\eta} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \bar{f}^1 \\ \bar{f}^2 \\ \bar{f}^3 \\ \bar{f}^4 \end{array} \right\} \quad (4.84)$$

ou plus simplement :

$$\{\bar{\nabla} \bar{f}\} = [B_N^{\bar{f}}] \{\bar{f}^N\} \quad (4.85)$$

4.3.5 Loi de comportement

Principe

Pour établir les expressions (4.60), la loi de comportement doit être formulée de manière à aboutir à un système d'équations faisant intervenir des opérateurs tangents. En guise de première approche, la modélisation se limitera à l'effet superélastique observé dans les AMF. Ainsi, la seule variable interne nécessaire à la description du comportement est la fraction volumique de martensite f . La force thermodynamique associée F_f s'écrit :

$$F_f = \Sigma_{eq} - B(T - T_0) - \mathcal{F}(\bar{f}, f) \quad (4.86)$$

Le critère à respecter concernant la transformation martensitique est :

$$|F_f| \leq F_f^{crit} \quad (4.87)$$

De la même manière que pour le modèle unidimensionnel utilisé au sein de l'élément barre, la limitation physique de la quantité de martensite porte sur la variable locale par le biais de pénalités et l'instabilité de comportement du matériau est représentée par une force critique qui décroît lorsque la quantité non locale de martensite augmente :

$$F_f = \Sigma_{eq} - B(T - T_0) - H_f f - \alpha_0 \frac{f-1}{f} - \alpha_1 \frac{f}{1-f} \quad (4.88)$$

$$F_f^{crit} = F_{f_0}^{crit} \exp^{-H_{\bar{f}} \bar{f}}$$

Concernant la déformation de transformation, celle-ci est supposée être dans la direction de la contrainte et proportionnelle à la fraction volumique de martensite présente au sein du VER considéré :

$$E_{ij}^T = \frac{3}{2} \frac{\Sigma_{ij}^D}{\Sigma_{eq}} f \bar{\epsilon}_{sat}^T \quad (4.89)$$

La déformation total E_{ij} s'écrit alors :

$$E_{ij} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + \frac{3}{2} \frac{\Sigma_{ij}^D}{\Sigma_{eq}} f \bar{\epsilon}_{sat}^T \quad (4.90)$$

Hypothèse d'un état plan de contraintes

L'élément développé ayant pour but de modéliser des structures bidimensionnelles présentant un état plan de contraintes, cette dernière hypothèse doit être appliquée à la loi de comportement utilisée. Pour ce faire, les conventions ainsi que les différents opérateurs matriciels développés dans la section 3.3 sont utilisés. Un exemple de simulation bidimensionnelle utilisant l'élément à approche non locale développé est présenté au chapitre suivant.

CONCLUSION DU CHAPITRE

À l'issue de ce chapitre, deux éléments de structure (barre et quadrilatère contraintes planes) ont été développés et implémentés dans le code calcul par éléments finis Abaqus³ via une subroutine UEL. Si le premier a eu pour but, dans un premier temps, de valider l'approche non locale via une formulation à gradients implicite, il s'avère très limité pour une application en calcul de structures. L'élément quadrilatère peut quant à lui être utilisé pour le dimensionnement de structures minces à géométrie complexe pour des cas de chargement plans. Pour ces deux éléments, les développements futurs devront porter sur l'amélioration de la loi de comportement locale du matériau afin de représenter les phénomènes décrits par le modèle local générique. De plus, la formulation et l'implémentation numérique de ces deux éléments a été faite par « modules », et pourra de ce fait être conservée telle quelle. Le chapitre suivant a pour objectif de présenter différents exemples de calcul de structures réalisés avec les modèles développés dans le cadre de cette thèse.

PERSPECTIVES CONCERNANT LA MODÉLISATION PAR DES APPROCHES NON LOCALES

Selon Jirásek et Bažant [Jirásek et Bažant 2002] et Engelen [Engelen 2005], il existe des modèles qui sont davantage dédiés aux effets de taille, et ce, même sans considérer d'adoucissement. Ces derniers sont basés sur les travaux pionniers de Fleck et Hutchinson [Fleck et Hutchinson 1993; 1997] et affinés par Gao et al. [Gao et al. 1999] et Gao et Huang [Gao et Huang 2001]. Ces modèles phénoménologiques utilisent les gradients de déformation comme une extension non linéaire de la théorie de Toupin [Toupin 1962] et Mindlin [Mindlin 1964; 1965]. Ces auteurs ont développé une généralisation de l'élasticité linéaire, pour les milieux avec microstructure, qui utilise le gradient de déformation (tenseur d'ordre 3) comme une variable additionnelle. Ainsi, les équations d'équilibre en statique sont modifiées par des termes faisant intervenir des hypercontraintes ou double-contraintes. Les relations entre contrainte et déformation ou, à un ordre plus élevé, entre hypercontrainte et gradient de déformation, doivent être pourvues afin de compléter le modèle.

La prise en compte des gradients de déformation pour des matériaux cristallins est justifiée par les effets des dislocations (statistiquement stockées et géométriquement nécessaire). Huang et al. [Huang et al. 2000] ou encore Acharya et Bassani [Acharya et Bassani 2000] tentent de développer des modèles basés sur les gradients à partir de la cinématique des dislocations.

Tout ceci permet d'entrevoir des pistes pour la modélisation de l'effet de taille (sans adoucissement) de structures minces en AMF.

³De la même manière que pour la loi de comportement décrite dans les chapitres 2 et 3, l'ensemble des développements numériques a été réalisé en langage C++. L'approche utilisée reste suffisamment générale pour être étendue à d'autres codes de calcul.

APPLICATION AU CALCUL DE STRUCTURES

5

SOMMAIRE

5.1	INTRODUCTION	133
5.2	TEST DE FLEXION SUR UNE LIME ENDODONTIQUE SUPERÉLASTIQUE	133
5.2.1	Description	133
5.2.2	Simulations et résultats	134
5.2.3	Perspectives	135
5.3	DIMENSIONNEMENT D'UNE MICROPOMPE	137
5.3.1	Principe	137
5.3.2	Simulation et résultats	137
5.3.3	Perspectives	138
5.4	ÉTUDE DES EFFETS DE LOCALISATION LORS D'UN ESSAI DE TRACTION SUR UNE PLAQUE TROUÉE	140
5.4.1	Description	140
5.4.2	Résultats et discussion	140
	CONCLUSION	141

LES différents modèles développés dans les chapitres précédents (modèles locaux 3D et 2D, modèle non local) ont pour point commun d'être destinés à effectuer des calculs de structures avec pour objectif de dimensionner des applications exploitant les propriétés des alliages à mémoire de forme. Les différentes études présentées ici permettent de mettre en évidence le champ d'application des modèles développés.

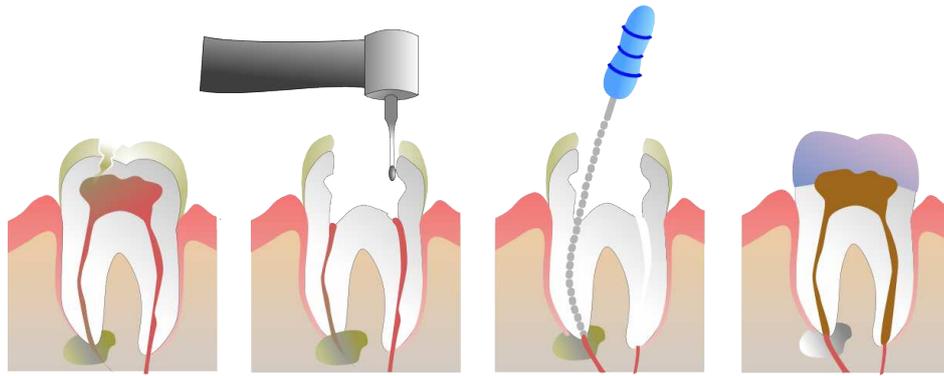


FIG. 5.1 – Schéma de principe d'un traitement endodontique sur une molaire. De gauche à droite : dent dont la pulpe est infectée ou nécrosée, retrait de la partie supérieure de la dent, grattage de la surface intérieure du canal pulpaire à l'aide d'une lime en NiTi, obturation du canal [Kemp 2005].

5.1 INTRODUCTION

L'objectif du présent travail est de proposer des outils numériques (lois de comportement implantées dans un code de calcul par éléments finis ou éléments spécifiques modélisant la transformation martensitique par une approche non locale) visant à dimensionner des applications utilisant des alliages à mémoire de forme. Le concepteur de telles applications pourra alors utiliser ces outils de la même manière que ceux correspondant à des matériaux classiques. Nous développerons ici l'étude de dispositifs exploitant les effets superélastique et mémoire à l'aide du modèle exhaustif décliné en description 3D et 2D contraintes planes. De plus, l'élément bidimensionnel à approche non locale sera utilisé dans le cadre d'une simulation de chargement sur une éprouvette dont la géométrie particulière met en évidence un phénomène de localisation de la transformation martensitique.

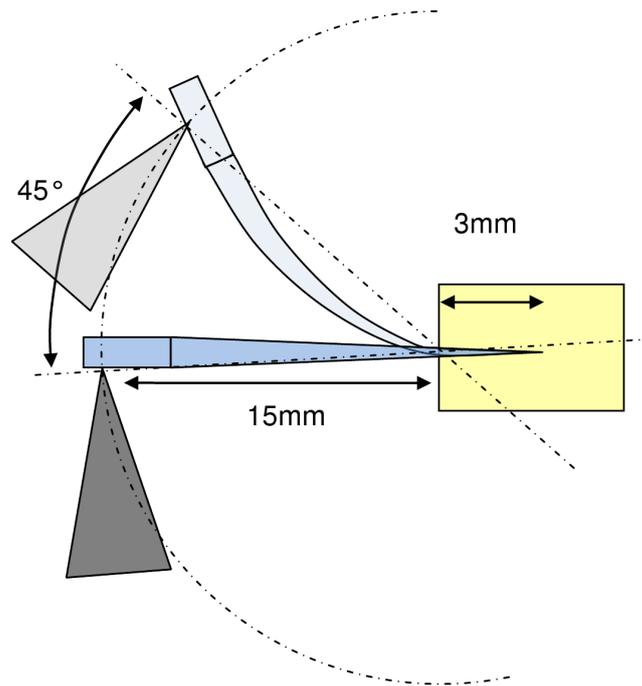
5.2 TEST DE FLEXION SUR UNE LIME ENDODONTIQUE SUPERÉLASTIQUE

5.2.1 Description

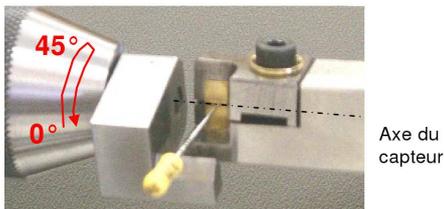
L'effet superélastique des alliages à mémoire de forme se montre fort adapté pour des applications nécessitant l'obtention de niveaux de déformation élevés. C'est le cas des limes utilisées lors de traitements endodontiques. Ce type d'opération vise à retirer les tissus nécrosés à l'intérieur du canal pulpaire (voir fig. 5.1). Pour ce faire, une lime manuelle ou mécanique est utilisée. La géométrie tortueuse du canal entraîne une déformation importante de la partie utile de la lime lors de ce type d'opération, c'est pourquoi un alliage à mémoire de forme Nickel-Titane est utilisé. De plus, la biocompatibilité du NiTi est un atout important si une partie de la lime ne peut pas être retirée de la dent (notamment en cas de casse de l'instrument).

La simulation réalisée ici reprend une étape de test effectuée lors de la conception des limes endodontiques. Il s'agit d'un test de flexion qui vise à comparer différentes géométries de lime entre elles et qui permet également la calibration des modèles numériques utilisés. Ce test, réalisé selon la norme 3630-1 (voir fig. 5.2) est mené de la façon suivante :

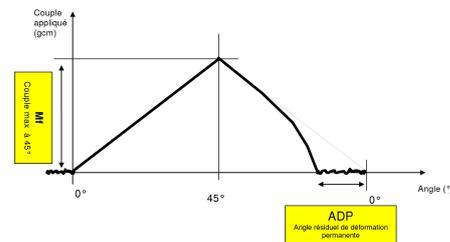
- Les 3 premiers mm de l'instrument sont encastrés dans des mors en laiton ;
- Un appui ponctuel est placé à 15mm de la sortie des mors et effectue un mouvement rotatif centré sur la sortie des mors de 45° aller et 45° retour ;



(a) Schéma de principe.



(b) Dispositif expérimental.



(c) Courbe présentant le couple appliqué en fonction de l'angle de rotation.

FIG. 5.2 – Test de flexion des limes endodontiques selon la norme 3630-1.

- Mesure du couple maximum appliqué à 45° et de l'angle de déformation permanent à la fin du test.

5.2.2 Simulations et résultats

Les paramètres matériau sont identifiés à partir d'un unique essai de traction. Afin d'obtenir le jeu de paramètres complet du modèle, les valeurs manquantes sont extrapolées des paramètres standard constatés pour les NiTi. La figure 5.3 présente la courbe de traction expérimentale superposée à celle prédite par le modèle. On notera que les tests expérimentaux prennent en compte une déformation rémanente de la lime, due à une déformation plastique ou à une irréversibilité d'une partie de la transformation martensitique. Le modèle utilisé ne prenant pas en compte ce type de mécanisme de déformation, les comparaisons se baseront uniquement sur le couple maximal atteint, correspondant à une rotation de 45° . Différentes densités de maillage (voir fig. 5.4) et types d'éléments (tétraèdres à formulation quadratique ou linéaire) ont été testés. Les résultats sont présentés dans la figure 5.5 et comparés à la valeur de couple obtenue expérimentalement.

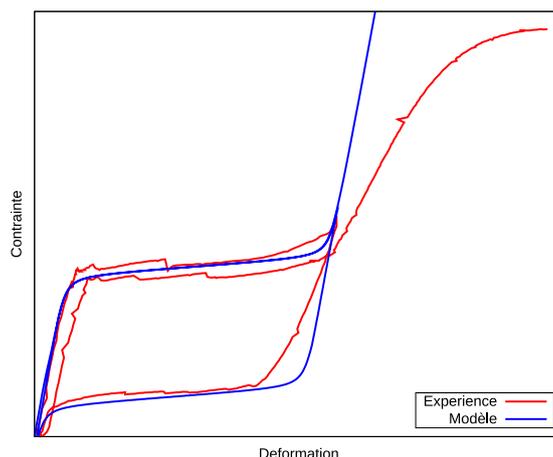


FIG. 5.3 – Courbes de traction expérimentale et prédite par le modèle suite à l'identification des paramètres. Par soucis de confidentialité, les valeurs numériques ne sont pas indiquées.

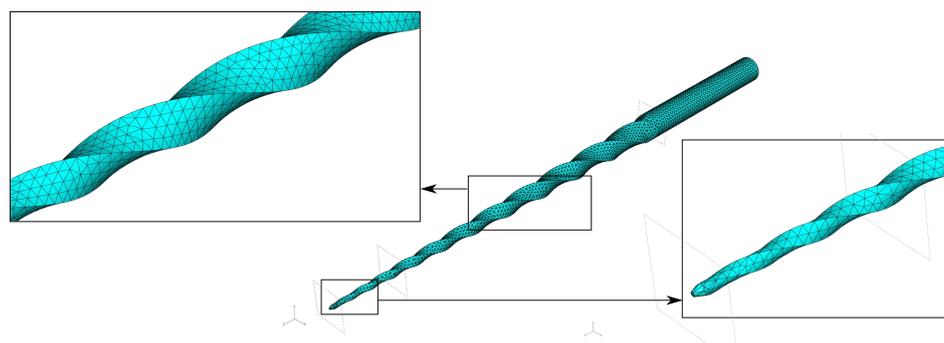
Les simulations effectuées permettent de dresser plusieurs conclusions :

- Le raffinement du maillage ou l'utilisation d'éléments à fonctions d'interpolation quadratiques font converger la solution vers une même valeur, ce qui démontre la stabilité numérique du problème. Cependant, le moment maximal prédit par le modèle est 20 % plus faible que celui observé expérimentalement. On notera de plus que le modèle de comportement ne prend pas en compte le module élastique apparent plus faible de l'austénite observé lors du test de traction expérimental (voir fig. 5.3), ce qui a tendance à surestimer le niveau de contrainte prédit.
- La figure 5.6 montre que la transformation de phase est très localisée au niveau de l'encastrement. De plus, ce dernier est modélisé dans le calcul par éléments finis par un blocage en déplacement de tous les nœuds situés sur la surface externe de l'extrémité de la lime. Dans la réalité, la lime est simplement pincée entre deux mors en laiton (voir fig. 5.2b). Il semble que cette différence soit la principale raison de l'écart entre le moment prédit et la mesure expérimentale.

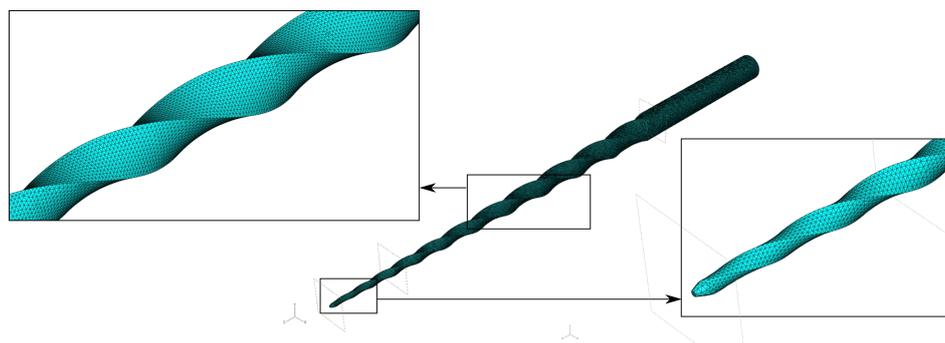
5.2.3 Perspectives

L'outil numérique développé permet de simuler de façon correcte le test de flexion normalisé d'une lime endodontique. Si des écarts de résultat ont été observés, principalement en raison des difficultés à modéliser le protocole de test expérimental, divers travaux peuvent être entrepris afin d'optimiser les géométries de lime :

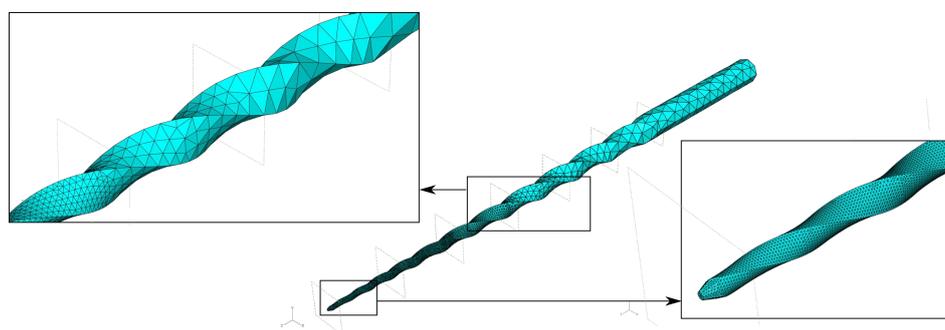
- La simulation de la rotation d'une lime dans le canal pulpaire. Ce type de calcul peut dans un premier temps ne considérer qu'un canal indéformable et étudier les niveaux de contrainte dans la lime afin d'en améliorer sa tenue en service ;
- La prise en compte de l'enlèvement de matière. Un modèle d'endommagement de la dentine doit alors être pris en compte pour simuler son usinage. Ce type de travail pourrait s'inspirer ce de qui se fait dans le domaine de la simulation d'usinage.



(a) Maillage grossier.



(b) Maillage fin.



(c) Maillage progressif.

FIG. 5.4 – Différentes finesses de maillage utilisées pour les simulations de flexion de lime endodontique.

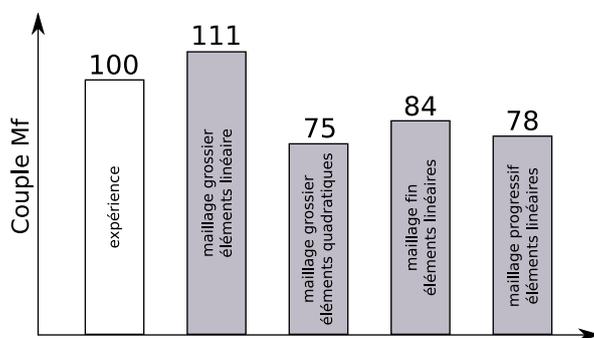


FIG. 5.5 – Valeur de couple maximale obtenue expérimentalement et par simulation. La référence 100 est utilisée pour le résultat expérimental.

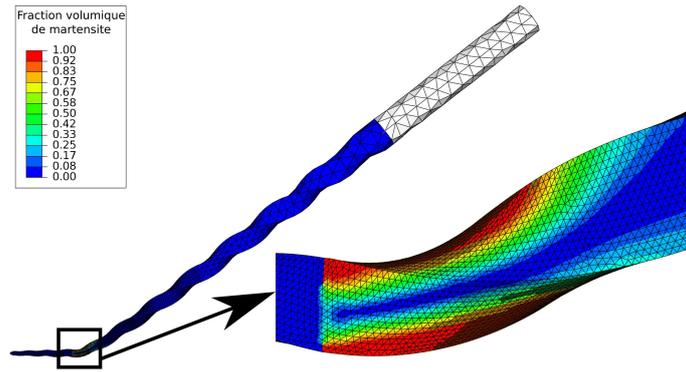


FIG. 5.6 – Répartition de la fraction volumique de martensite pour une lime fléchée à 45° .

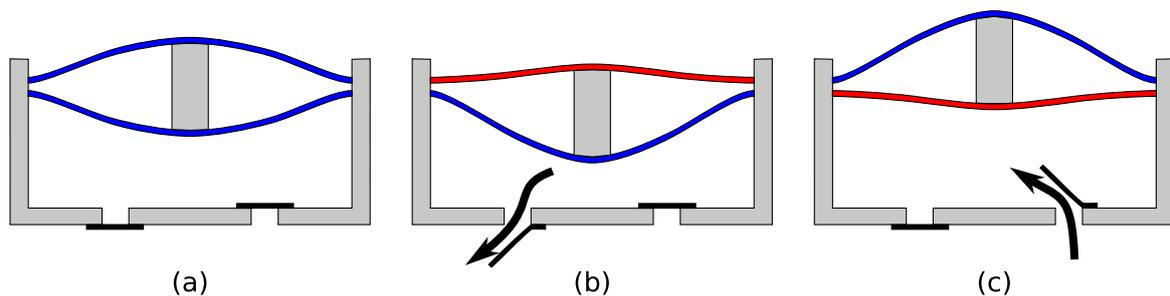


FIG. 5.7 – Vue en coupe d'une micropompe fluïdique faisant intervenir deux membranes en AMF antagonistes. (a) État au repos, (b) Mise en position basse, (c) Mise en position haute.

5.3 DIMENSIONNEMENT D'UNE MICROPOMPE

5.3.1 Principe

L'utilisation des alliages à mémoire de forme se montre intéressante au sein d'actionneurs, et plus particulièrement lorsque ces derniers présentent de faibles dimensions. En effet, dans ce cas, la quantité de chaleur nécessaire pour chauffer l'élément actif est très réduite en raison de son faible volume. Malgré cela, le travail mécanique pouvant être obtenu en retour est relativement élevé (déplacement et/ou force importants).

Nous allons ainsi étudier le fonctionnement d'un micro-système fluïdique (micropompe) dont l'actionneur est composé de deux membranes minces, en alliage à mémoire de forme, antagonistes (voir fig. 5.7). Les deux membranes sont martensitiques à température ambiante et préalablement déformées avant d'être fixées dans le bâti et maintenues écartées par un élément rigide. Le chauffage d'une des membranes fait déplacer le piston d'un côté afin d'éjecter le fluide hors de la pompe (on peut ici utiliser un clapet en AMF superélastique utilisé en guise de limiteur de pression). Le chauffage de l'autre membrane réalisé en même temps que le refroidissement naturel de la première membrane remet le piston en position haute tout en faisant pénétrer un nouveau volume de fluide à l'intérieur du corps de la pompe. Cette dernière est alors prête à réaliser un nouveau cycle.

5.3.2 Simulation et résultats

La simulation de la micropompe par éléments finis se fait à vide, l'objectif étant de valider le principe de fonctionnement et d'utiliser le modèle développé dans une étude de cas réel. L'étude des conditions d'écoulement du fluide pourra être réalisée ultérieurement par le

E (MPa)	ν	α ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	ε_{trac}^T	ε_{trac}^{TFA}	ε_{comp}^T
39 500	0,3	8.10^{-6}	0,056	0,053	0,044
$b_{d\ trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	$b_{r\ trac}$ (MPa / $^{\circ}\text{C}$)	M_s ($^{\circ}\text{C}$)	A_f ($^{\circ}\text{C}$)	r_f	
4,2	7	40	60	0,25	
F_{ε}^{max} (MPa)	H_f (MPa)	$H_{\varepsilon T}$ (MPa)	H_{twin} (MPa)	H_s (MPa)	
100	2	1 635	25 000	68,5	

TAB. 5.1 – Paramètres matériau utilisés pour les membranes de la micropompe.

biais d'un couplage de code fluide/structure. Le bâti et l'élément séparateur sont considérés comme non déformables et les membranes sont modélisées *via* l'implémentation 2D contraintes planes du modèle local (voir partie 3.3). Les paramètres matériau utilisés sont notés dans le tableau 5.1. Les membranes présentent un diamètre de 10 mm et une épaisseur de 0,01 mm. Les éléments finis utilisés sont des quadrangles à 4 noeuds et 4 points d'intégration (interpolation linéaire des déplacements et températures aux noeuds) formulés en contraintes planes. Les corrections utilisées pour la prise en compte du cisaillement transverse sont basées sur un calcul élastique à partir du module d'Young de l'austénite.

Le calcul se déroule de la façon suivante :

- début du calcul avec des membranes austénitiques à 100 $^{\circ}\text{C}$;
- refroidissement à 30 $^{\circ}\text{C}$, les membranes sont alors martensitiques (voir fig. 5.8a) ;
- mise en position des membranes sur le bâti et autour de l'élément séparateur (voir fig. 5.8b) ;
- chauffage d'une membrane à 100 $^{\circ}\text{C}$ (voir fig. 5.8c) ;
- chauffage de l'autre membrane à 100 $^{\circ}\text{C}$ pendant que la première membrane est ramenée à 30 $^{\circ}\text{C}$ (voir fig. 5.8d) ;
- répétition du cycle de chauffage-refroidissement.

La figure 5.9 représente l'évolution des températures respectives des membranes et du déplacement vertical du piston en fonction du temps. Les températures ayant été supposées uniformes dans les membranes, le problème du transfert thermique n'a pas été pris en compte, c'est pourquoi l'unité de temps adoptée est arbitraire.

On peut remarquer que le premier déplacement du piston est plus faible que les suivants. Ceci est dû au fait qu'il intervient immédiatement après le conditionnement des membranes. Celles-ci étant issues d'un refroidissement sans application de contrainte, la martensite qui les compose présente une structure auto-accommodée qui induit une déformation de transformation à saturation plus faible que dans le cas de martensite formée sous contrainte. Pour les cycles suivants, bien qu'il s'agisse toujours de martensite formée thermiquement (suite au refroidissement des membranes), celle-ci est soumise à une contrainte induite par le déplacement de la membrane antagoniste. Elle apparaît alors directement sous forme orientée et bénéficie ainsi d'une déformation de transformation à saturation plus élevée.

5.3.3 Perspectives

Si la simulation effectuée valide le principe de conception de la micropompe présentée, différentes pistes sont à étudier pour poursuivre le développement de ce type d'applications :

- La prise en compte des effets de taille au niveau de la membrane AMF, qui présente une faible épaisseur. Si les effets de taille et la localisation de la déformation de transformation peuvent être pris en compte par des approches non locales, il est nécessaire

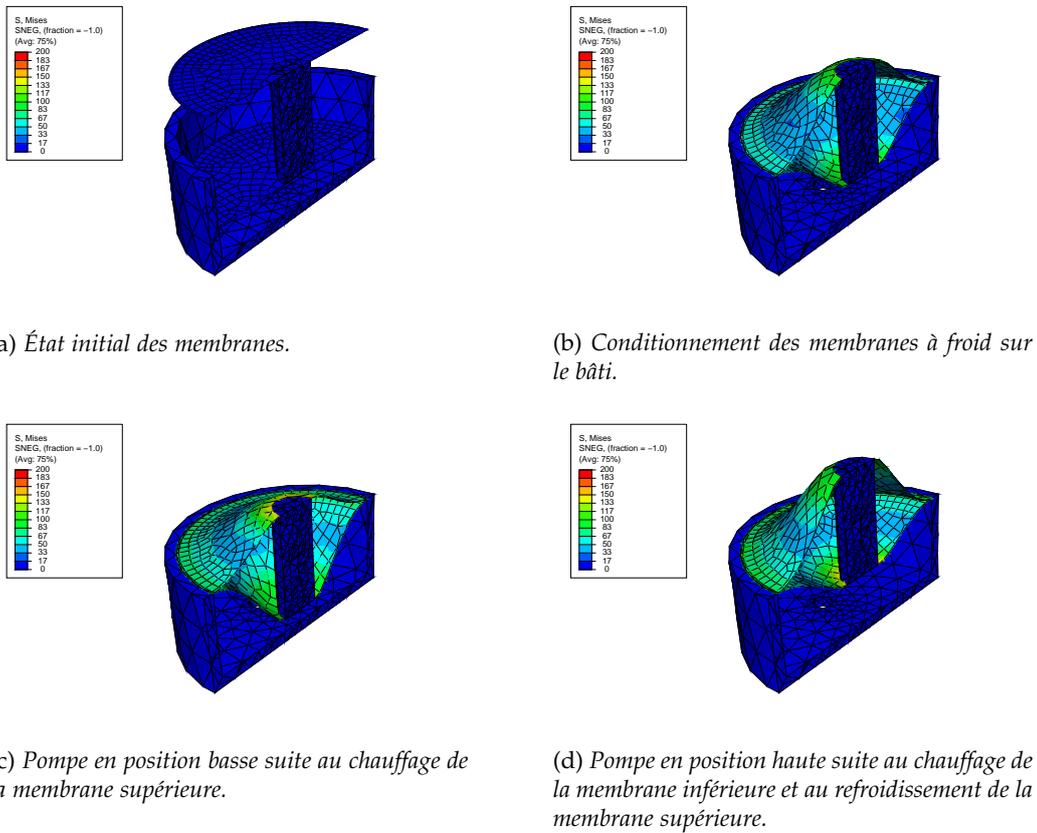


FIG. 5.8 – Simulation d'une micropompe à membranes AMF antagonistes.

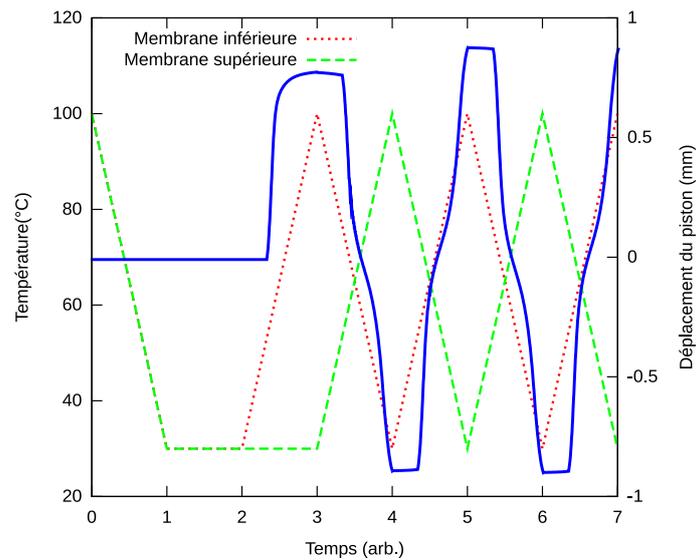


FIG. 5.9 – Simulation d'une micropompe : évolution du déplacement du piston et de la température de membranes antagonistes en fonction du temps.

B	5 MPa / °C
T	25 °C
T_0	-40 °C
$F_{f_0}^{crit}$	150 MPa
H_f	1 MPa
$H_{\bar{f}}$	4
Y	70 000 MPa
ε_{SAT}^T	0,05
α_0	0,1
α_1	0,1

TAB. 5.2 – Paramètres de simulation utilisés pour l'essai de traction sur une plaque trouée.

d'étendre le développement de l'élément présenté au chapitre 4 à des structures de type coque et d'y introduire des degrés de liberté additionnels tels que l'orientation de la martensite ou la température afin de pouvoir modéliser l'effet mémoire de forme.

- La prise en compte des effets d'échelle, notamment au niveau des transferts thermiques. En effet, les membranes utilisées présentent un rapport volume/surface très faible, ce qui induit des pertes thermiques très importantes par conduction vers le fluide transporté par exemple. L'étude de tels phénomènes passe par l'utilisation d'éléments de structure avec des degrés de liberté en température.
- Les interactions du fluide sur le fonctionnement de la micropompe. Ici, le couplage avec un code de calcul en mécanique des fluides s'avère nécessaire.
- La problématique de la commande d'un tel dispositif. Différentes approches ont été développées afin de contrôler des actionneurs en AMF [Shameli et al. 2005, Ahn et Kha 2007; 2008]. En tenant compte de l'évolution des caractéristiques du matériau au cours du chargement (variation d'hystérésis, cyclage, fatigue ...)

5.4 ÉTUDE DES EFFETS DE LOCALISATION LORS D'UN ESSAI DE TRACTION SUR UNE PLAQUE TROUÉE

5.4.1 Description

Une simulation de traction est effectuée sur une plaque trouée d'épaisseur 0,1 mm dont les dimensions sont précisées dans la figure 5.10. En raison de la symétrie de la géométrie et du chargement, seul un quart de la structure sera modélisé. Ici, contrairement aux simulations effectuées sur une barre en traction dans le chapitre 4, la localisation du début de transformation n'est pas provoquée par une hétérogénéité des paramètres matériau mais simplement par une géométrie particulière visant à induire une concentration de contrainte. La plaque est soumise à un déplacement imposé jusqu'à obtenir un allongement nominal de 5,7 %. Les paramètres matériau utilisés pour cette simulation sont listés dans le tableau 5.2. Le modèle adopté est celui présenté dans le chapitre 4, pour lequel la localisation de la transformation de phase est prise en compte *via* une approche non locale.

5.4.2 Résultats et discussion

La figure 5.11 montre la répartition de la fraction volumique de martensite au cours du chargement pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne ℓ . Pour rappel, le

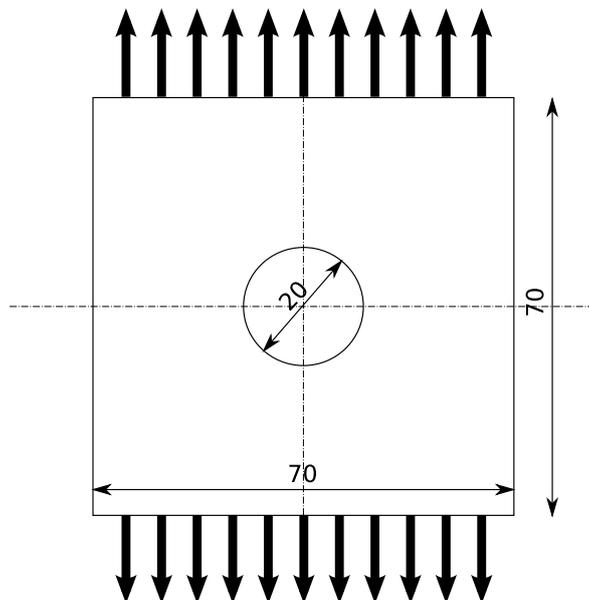


FIG. 5.10 – Essai de traction sur une plaque trouée. Les pointillés représentent les axes de symétrie.

diamètre du trou au centre de la plaque est de 20 mm. On peut ainsi remarquer que pour un paramètre de longueur interne faible ($\ell = 5$ mm), la transformation martensitique a lieu de façon hétérogène, pour devenir de plus en plus homogène lorsque ℓ augmente (10 mm et 50 mm). La modélisation du comportement des AMF par une approche non locale permet donc bien de prendre en compte l'effet de la taille d'un défaut sur le résultat d'un calcul de structures. Ainsi, si la simulation avait porté sur un matériau aux paramètres constants (notamment le paramètre de longueur interne qui est lié à la microstructure du matériau) et une plaque de taille plus importante tout en conservant le même ratio diamètre du trou / dimensions extérieures, une réponse différente dans chaque cas aurait été relevée, caractéristique d'un effet de taille.

En ce qui concerne la réponse force-déplacement de la structure (voir fig. 5.12), celle-ci n'est que faiblement influencée par le paramètre de longueur interne ℓ . On remarque toutefois que la transformation de phase se produit plus tôt pour la valeur la plus faible, $\ell = 5$ mm, en raison d'un fort effet de localisation. À l'opposé, le niveau de force final atteint juste avant que la structure ne soit totalement martensitique est plus élevé pour les cas présentant une localisation importante de la transformation de phase. Ceci est dû à une forte hétérogénéité du champ de contrainte au sein du domaine considéré qui, par effet de structure, résulte en une force globale appliquée plus importante que dans le cas d'un état de contrainte homogène. On notera toutefois que, partant d'un même état de départ (matériau totalement austénitique) pour arriver au même état final (matériau totalement martensitique), la quantité d'énergie mécanique nécessaire est la même dans chaque cas.

CONCLUSION DU CHAPITRE

Les différents outils numériques développés (2D et 3D à approche locale et 2D à approche non locale) ont montré qu'ils pouvaient être utilisés de façon concrète afin de réaliser des calculs de structure. Ils peuvent dès lors être utilisés dans le cadre du dimensionnement d'applications exploitant les comportements des alliages à mémoire de forme. De fait, ils peuvent être employés comme éléments de base de simulations plus complexes tels que

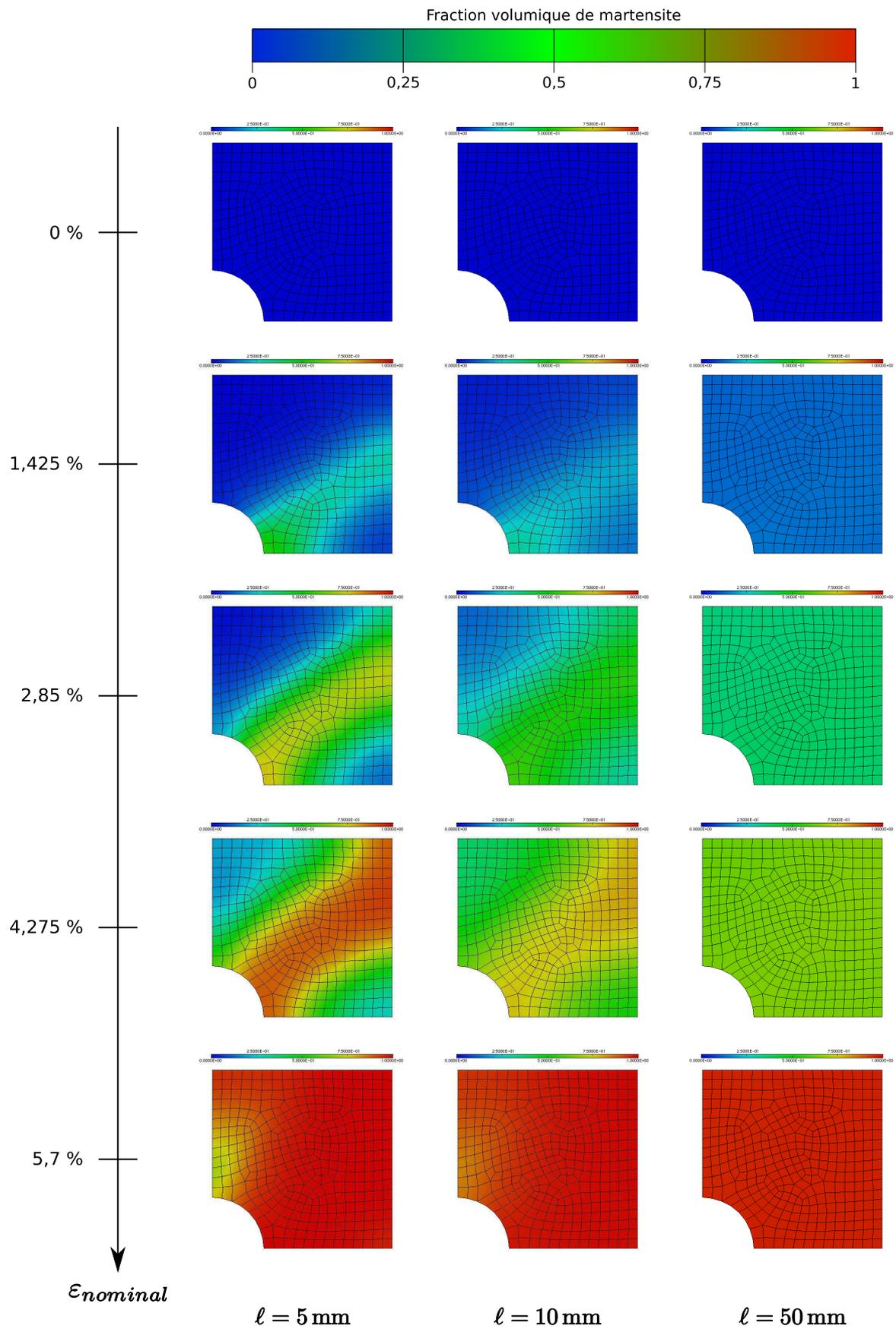


FIG. 5.11 – Mise en évidence d'un effet de taille sur la localisation de la transformation martensitique.

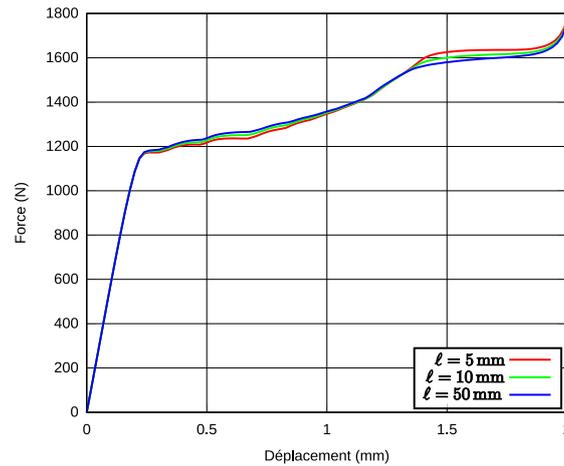


FIG. 5.12 – Réponse force-déplacement d'une plaque trouée lors d'un essai de traction pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne.

des calculs faisant intervenir des couplages fluide-structure ou des problèmes de contact. L'élément non local a montré l'intérêt d'une telle approche dans le cadre de calculs de structure faisant intervenir des effets de taille. Les futurs développements dans ce domaine auront pour objectif de donner un sens physique au paramètre de longueur interne de façon à pouvoir le déterminer par une connaissance de la structure interne du matériau.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce travail de recherche s'inscrit dans un cadre plus général visant à développer les applications exploitant les caractéristiques des alliages à mémoire de forme. Il se focalise sur la modélisation du comportement de ces matériaux et le développement d'outils numériques permettant le dimensionnement d'applications. La complexité de ces alliages nécessite une approche transversale afin d'appréhender de façon correcte les différents phénomènes physiques qui s'y déroulent.

Une étude des mécanismes microstructuraux a mis en évidence un manque dans les modèles existants de la prise en compte du comportement de la martensite et notamment la formation et l'accommodation de macles dans les alliages à base de Nickel-Titane. Ce phénomène a ainsi été ajouté à un modèle développé initialement par Peultier [Peultier 2005]. Ce dernier a également été reformulé afin de prendre en compte différents comportements thermomécaniques tels que la dépendance des températures de transformation à l'orientation des variantes de martensite ou encore la variation de la déformation de transformation à saturation par rapport à la structure de la martensite. Le modèle présenté dans le cadre du présent travail est ainsi plus à même de représenter les particularités de comportement de alliages NiTi, qui sont les plus utilisés actuellement.

L'originalité du présent modèle réside dans le choix des variables internes utilisées, qui sont chacune liée à un mécanisme physique clairement identifié tel que la transformation de phase, l'orientation des variantes ou encore l'accommodation des macles. L'utilisation de variables internes tensorielles couplées à des lois d'évolution permet de prédire les chargements non proportionnels. Le phénomène de boucles internes est modélisé à l'aide de points mémoire évalués de façon discrète lors des changements de trajet de chargement. La dissymétrie traction-compression est introduite par une expression de la valeur de saturation de la déformation de transformation fonction des deuxième et troisième invariants du tenseur définissant l'orientation des variantes de martensite. Enfin, l'introduction d'une variable définissant la structure selon laquelle la martensite présente dans un VER a été formée permet de simuler plus finement le comportement de la martensite.

Le modèle a été implémenté numériquement dans le code de calcul par élément finis Abaqus à l'aide de la librairie Simula+ [Sim] qui permet d'assurer une lisibilité et une facilité de compréhension indispensables aux prochaines évolutions du modèle. La robustesse du schéma d'intégration a pu être démontrée lors de la simulation de chargements non proportionnels tels que les essais de traction-torsion. Le modèle a été décliné en différentes versions afin de pouvoir être utilisé avec des éléments finis de solide ou de coque.

La qualité de prédiction du modèle a pu être comparée à des essais expérimentaux effectués par l'IP ASCR de Prague. Les résultats s'avèrent concluants mais remettent en question certaines des hypothèses utilisées lors de la formulation du modèle telle que l'isotropie du comportement qui n'est pas valable pour des échantillons fortement écrouis tels que des fils. Les différentes observations réalisées lors de ce comparatif permettent de dégager des pistes pour la poursuite de ce travail :

- Le modèle présenté ici ne prend pas en compte la phase R qui apparaît sous certaines conditions de température et de contrainte. Cependant, celle-ci peut entraîner

jusqu'à 1 % de déformation supplémentaire. La formulation d'un modèle triphasé (austénite, R, martensite) est donc une des perspectives d'évolution du modèle

- La texture du matériau est supposée isotrope, ce qui n'est pas le cas pour des géométries telles que les fils ou les tôles qui sont soumises à un fort écrouissage. Il est nécessaire pour prendre en compte ces particularités, d'introduire une formulation des surfaces de charge prenant en compte une contrainte interne liée au procédé de fabrication des pièces considérées.
- L'hétérogénéité des propriétés du matériau peut également être prise en compte en vue d'améliorer la modélisation des AMF. Des travaux^{1 2} ont notamment été réalisés pour prendre en compte la présence de précipités plastiques de Niobium ou de précipités de Ni_4Ti_3 induisant une chute de la concentration en Nickel et donc une modification des caractéristiques du matériau.

Le modèle développé a été adopté pour l'étude d'applications telles qu'une micro-pompe ou une lime endodontique. Il permet, à partir d'une même formulation, de simuler des structures exploitant l'effet mémoire de forme ou l'effet superélastique. Ces différentes études ont fait ressortir qu'un modèle de comportement pour les alliages à mémoire de forme constitue une des briques de base du dimensionnement d'applications et qu'à plus grande échelle, il pourrait être utilisé dans le cadre de couplages fluide-structure ou en simulation d'usinage.

La dernière partie du présent travail porte sur une extension du modèle développé par une approche non locale. L'objectif était une prise en compte des effets de taille et de localisation. L'approche adoptée consiste à considérer une variable non locale dont la valeur est déterminée par le gradient des variables internes. Ce type de problématique induisant des degrés de liberté non pris en compte de façon standard par les codes de calcul de structures industriels, des éléments finis spécifiques ont été développés où la fraction non locale de martensite est traitée comme un degré de liberté additionnel. L'étude de quelques cas comme la traction sur une plaque perforée a mis en évidence qu'une telle approche permet de traiter des problèmes qui seraient numériquement instables s'ils étaient traités par une approche locale classique. Toutefois, le modèle non local développé reste basique dans le sens où il ne prend pas en compte les particularités de comportement développées en première partie. Il permet de démontrer qu'une telle approche, initialement développée pour les comportements plastiques, peut être translatée aux matériaux à couplages multiphysiques.

La modélisation des alliages à mémoire de forme reste un sujet très ouvert tant les domaines d'étude sont nombreux et complémentaires (micromécanique, dimensionnement, contrôle, ...). Il reste toutefois intimement lié au domaine expérimental dont les récentes et futures avancées permettront de comprendre encore plus finement les phénomènes impliqués et ainsi d'alimenter les modèles de comportement.

¹Thèse en cours, B. Piotrowski, LEMTA, Nancy

²[Chemisky 2009]

ANNEXES



SOMMAIRE

A.1	CHOIX D'UN SCHÉMA D'INTÉGRATION	149
A.1.1	Du continu vers l'incrémental	149
A.1.2	Intégration explicite	149
A.1.3	Intégration implicite	150
A.1.4	Intégration semi-implicite	150
A.1.5	Choix du schéma d'intégration pour le modèle AMF	150
A.2	CALCULS SPÉCIFIQUES AU MODÈLE 2D CONTRAINTES PLANES	151
A.2.1	Calcul des matrices de compliance et de souplesse	151
A.2.2	Expression de la déformation de transformation à saturation	153
A.2.3	Résidu d'écoulement et d'orientation avec notation vectorielle	153
A.3	PONDÉRATION NON-LOCALE PAR UNE FONCTION DE GREEN	154

A.1 CHOIX D'UN SCHÉMA D'INTÉGRATION

A.1.1 Du continu vers l'incrémental

Les équations différentielles constituant l'ensemble $\mathcal{M}^{continu}$ font intervenir la différentielle dX (voir éq. 3.2). Pour remplacer cette dernière par l'incrément des variables inconnues ΔX , il convient d'établir une relation par rapport à ΔY du type :

$$\Delta X = fct(\mathcal{G}(X_\alpha, Y_\alpha), \Delta Y) \quad (\text{A.1})$$

où α prend les valeurs n , $n + \theta$ ou $n + 1$ suivant le type de formulation choisie.

La méthode d'Euler suppose une variation linéaire des variables inconnues au voisinage du point (X_α, Y_α) , d'où :

$$\Delta X \approx \mathcal{G}(X_\alpha, Y_\alpha) \Delta Y \quad (\text{A.2})$$

Cette hypothèse n'est toutefois valable que localement autour du point (X_α, Y_α) et l'utilisation d'incrément de temps de taille très faible est alors nécessaire pour assurer la précision de la solution, au détriment du temps de calcul. Les différentes approches d'intégration (implicite, explicite et semi-implicite) sont présentées par la suite et comparées afin de dégager le meilleur compromis temps de calcul / stabilité du résultat.

A.1.2 Intégration explicite

Dans cette méthode, le système est mis sous la forme :

$$\Delta X = fct(\mathcal{G}(X_n, Y_n), \Delta Y) \quad \text{à l'incrément } n \quad (\text{A.3})$$

Toutes les grandeurs de cette relation sont connues puisque le point (X_n, Y_n) correspond à l'état initial et que l'incrément des variables de pilotage ΔY suit le trajet de chargement donné. Ainsi, le calcul de ΔX et par extension la connaissance de l'état final $(X_n + \Delta X, Y_n + \Delta Y)$ est direct. L'inconvénient de cette méthode est que la précision de la solution dépend de la taille d'incrément choisie.

Pour appliquer cette technique d'intégration à un problème de type $\mathcal{F}(X, Y) = 0$, il faut transformer ce problème en un système d'équations différentielles. Ainsi, en partant d'un état d'équilibre initial $\mathcal{F} = 0$, l'état d'équilibre suivant se traduit par $\mathcal{F} + d\mathcal{F} = 0$ ou plus simplement $d\mathcal{F} = 0$. Le système \mathcal{F} est différencié :

$$d\mathcal{F} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial X} dX + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Y} dY = 0 \quad \Leftrightarrow \quad dX = \mathcal{G}(X, Y) dY \quad (\text{A.4})$$

avec :

$$\mathcal{G}(X, Y) = - \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial X} \right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Y} \quad (\text{A.5})$$

Cependant, lorsque l'équation différentielle dérive d'une équation intégrale, l'équilibre en fin d'incrément n'est pas nécessairement vérifié. Dans le cas de l'intégration explicite, la stabilité numérique est directement liée à la taille d'incrément. Pour de grands incréments, on va observer une solution qui oscille autour de la solution exacte et il existe une valeur critique de la taille d'incrément au delà de laquelle ces oscillations divergent. Il est possible de s'affranchir de cette taille d'incrément critique en utilisant une intégration implicite.

A.1.3 Intégration implicite

Cette méthode est présentée ici pour la résolution d'un problème formé d'équations intégrales définissant un état d'équilibre $\mathcal{F}(X, Y) = 0$. Pour ce faire, en partant de l'état initial (X_n, Y_n) , on recherche l'état final (X_{n+1}, Y_{n+1}) assurant l'équilibre en fin d'incrément $\mathcal{F}(X_{n+1}, Y_{n+1}) = 0$. Il faut cependant résoudre un problème qui dépend de variables qui ne sont pas encore connues. C'est pourquoi on parle de problème *implicite*.

La recherche de la solution X_{n+1} pour un incrément passe généralement par plusieurs itérations $X_{n+1}^0, X_{n+1}^1, \dots, X_{n+1}^i, \dots, X_{n+1}^l$. Pour chaque itération, une estimation de l'erreur obtenue par le calcul de $\mathcal{F}(X_{n+1}^i, Y_{n+1})$ est réalisée, suivie d'une correction de l'état estimé X_{n+1}^{i+1} permettant de réduire l'erreur $\|\mathcal{F}(X_{n+1}^{i+1}, Y_{n+1})\| < \|\mathcal{F}(X_{n+1}^i, Y_{n+1})\|$. L'estimation X_{n+1}^i converge vers la solution exacte du problème X_{n+1} après plusieurs itérations. La difficulté de l'implémentation de ce type de schéma d'intégration réside dans le type de fonction de correction à utiliser pour assurer la convergence de la série itérative.

L'intérêt de ce type de schéma d'intégration est d'assurer la stabilité de la solution obtenue. Ceci permet l'emploi d'incrément de temps importants avec toutefois une limite de taille afin d'assurer la convergence de la boucle itérative et d'éviter les cas de bifurcation entraînant une non-unicité de la solution du problème.

Pour appliquer une résolution implicite à une équation différentielle $dX = \mathcal{G}(X, Y) dY$, il est nécessaire de la réécrire sous la forme d'une fonction à annuler :

$$\mathcal{F}(\Delta X, \Delta Y) = \Delta X - \text{fct}(\mathcal{G}(X_n + \Delta X, Y_n + \Delta Y), \Delta Y) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Cette formulation permet d'introduire uniquement les variables à l'état initial et leur incrément. L'utilisation d'une méthode implicite pour résoudre un système d'équations différentielles n'enlève toutefois pas le problème de la qualité de l'approximation différentiel \rightarrow incrémental. Une telle méthode assure toutefois que la solution calculée est stable.

Pour pallier ce problème, l'intégration semi-implicite permet d'améliorer la précision de résolution d'un système d'équations différentielles tout en conservant la stabilité du schéma implicite.

A.1.4 Intégration semi-implicite

Cette méthode d'intégration est généralement appelée θ -méthode et est particulièrement adaptée à la résolution d'équations différentielles. Elle se base sur le fait que l'incrément exact des inconnues est encadré par la valeur d'incrément estimée à partir de l'état initial et la valeur d'incrément estimée à partir de l'état final :

$$\Delta X_{\text{explicite}} = \text{fct}(\mathcal{G}(X_n, Y_n), \Delta Y) < \Delta X_{\text{exact}} < \Delta X_{\text{implicite}} = \text{fct}(\mathcal{G}(X_{n+1}, Y_{n+1}), \Delta Y) \quad (\text{A.7})$$

Il est donc possible de considérer un état intermédiaire $(X_{n+\theta}, Y_{n+\theta})$ avec $\theta \in [0, 1]$, généralement $\theta = 0,5$. Cet état est par définition plus précis que les incréments issus d'un calcul purement explicite ou purement implicite. L'expression de ΔX_θ faisant intervenir des grandeurs en fin d'incrément, il est nécessaire de procéder à une résolution itérative pour la déterminer.

A.1.5 Choix du schéma d'intégration pour le modèle AMF

Le problème issu de la modélisation du comportement des AMF se présente sous la forme de fonctions de charge à équilibrer et d'équations différentielles pour les directions d'écoulement (orientation des variantes et accommodation inélastique des macles). L'intégration

implicite est la plus adaptée pour résoudre les équations des fonctions de charge. Le problème se pose toutefois pour la résolution des équations différentielles issues des lois de normalité. En effet, une prédiction élastique ne permet pas de déterminer *a priori* les directions d'écoulement et il est donc nécessaire d'introduire ces équations dans le système à résoudre. Pour intégrer ces équations, un changement de variable d'Euler est utilisé et la direction d'écoulement est exprimée en fin d'incrément comme cela se fait pour des modèles de comportement plastique [Chaboche et Cailletaud 1996] [Souza et al. 1998]. De plus, les équations étant connues analytiquement, notre choix se porte sur une méthode de Newton-Raphson pour la résolution itérative.

Pour chaque incrément, le système $\mathcal{F}(X, Y)$ est considéré comme équilibré. On peut ainsi trouver une forme de \mathcal{F} , notée \mathcal{R} qui vérifie :

$$\mathcal{R}(X, Y) = 0 \quad (\text{A.8})$$

La perturbation du système est provoquée par l'ajout d'un incrément des variables de pilotage, aboutissant à l'inégalité suivante :

$$\mathcal{R}(X, Y + \Delta Y) \neq 0 \quad (\text{A.9})$$

La résolution itérative de Newton-Raphson consiste à trouver la valeur ΔX de l'incrément des variables inconnues telle que :

$$\mathcal{R}(X + \Delta X, Y + \Delta Y) = 0 \quad (\text{A.10})$$

Dans le cas de l'implémentation d'un modèle de comportement pour un code de calcul par éléments finis, les incréments de déformation ΔE_{ij} et de température ΔT sont connus à l'incrément $n + 1$, E_{ij} et T étant les variables de pilotage pour un calcul faisant intervenir des éléments finis couplant des degrés de liberté en déplacement et en température. Par la suite, et sachant que c'est une approche implicite qui a été retenue, la mention de l'incrément $n + 1$ pour les différentes valeurs sera omise afin d'alléger les notations.

A.2 CALCULS SPÉCIFIQUES AU MODÈLE 2D CONTRAINTES PLANES

A.2.1 Calcul des matrices de compliance et de souplesse

Matrice de souplesse

L'objectif est de déterminer une matrice de souplesse \tilde{S} , équivalente au tenseur de souplesse élastique d'ordre 4 dans le cas d'un état plan de contraintes où les déformations et contraintes sont exprimées sous forme vectorielle par le biais de la notation de Voigt. Une telle matrice s'exprime :

$$E_i^{el} = \tilde{S}_{ij} \Sigma_j \quad (\text{A.11})$$

où Σ et E^{el} sont les vecteurs représentant respectivement le tenseur des contraintes et des déformations, notés de la façon suivante :

$$\{\Sigma\} = \left\{ \begin{array}{c} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{12} \end{array} \right\} \quad \text{et} \quad \{E^{el}\} = \left\{ \begin{array}{c} E_{11}^{el} \\ E_{22}^{el} \\ 2E_{12}^{el} \end{array} \right\} \quad (\text{A.12})$$

Afin de déterminer \tilde{S} , il est nécessaire de partir de l'expression tensorielle de la déformation élastique correspondant à un état plan de contraintes (les cisaillement transverses

sont négligés) :

$$E^{el} = \begin{pmatrix} E_{11}^{el} & E_{12}^{el} & 0 \\ E_{12}^{el} & E_{22}^{el} & 0 \\ 0 & 0 & E_{33}^{el} \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

S'agissant d'élasticité isotrope, on peut écrire :

$$E_{ij}^{el} = \frac{1+\nu}{E} \Sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} \Sigma_{kk} \delta_{ij} \quad (\text{A.14})$$

Ce qui donne , en introduisant l'hypothèse des contraintes planes :

$$\begin{aligned} E_{11}^{el} &= \frac{1}{E} \Sigma_{11} - \frac{\nu}{E} \Sigma_{22} \\ E_{22}^{el} &= \frac{1}{E} \Sigma_{22} - \frac{\nu}{E} \Sigma_{11} \\ E_{33}^{el} &= -\frac{\nu}{E} (\Sigma_{11} + \Sigma_{22}) \\ &= -\frac{\nu}{1-\nu} (E_{11}^{el} + E_{22}^{el}) \\ E_{12}^{el} &= \frac{1+\nu}{E} \Sigma_{12} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

En utilisant la notation vectorielle de Voigt pour la déformation élastique (la composante de cisaillement est comptée deux fois), la matrice de souplesse \tilde{S} s'écrit :

$$\tilde{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (\text{A.16})$$

Matrice de compliance

En suivant le même principe que pour la matrice de souplesse, une matrice de compliance \tilde{C} peut être définie telle que :

$$\Sigma_i = \tilde{C}_{ij} E_j^{el} \quad (\text{A.17})$$

Pour définir cet opérateur, il faut partir de la définition de la déformation élastique :

$$\begin{aligned} E_{11}^{el} &= \frac{1}{E} \Sigma_{11} - \frac{\nu}{E} \Sigma_{22} \\ E_{22}^{el} &= \frac{1}{E} \Sigma_{22} - \frac{\nu}{E} \Sigma_{11} \\ E_{12}^{el} &= \frac{1+\nu}{E} \Sigma_{12} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

En inversant ces relations, on obtient l'expression de la contrainte en fonction de la déformation élastique :

$$\begin{aligned} \Sigma_{11} &= \frac{E}{1-\nu^2} (E_{11}^{el} + \nu E_{22}^{el}) \\ \Sigma_{22} &= \frac{1}{1-\nu^2} (\nu E_{11}^{el} + E_{22}^{el}) \\ \Sigma_{12} &= \frac{E}{1-\nu} E_{12}^{el} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

D'où la matrice \tilde{C} :

$$\tilde{C} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1+\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.20})$$

A.2.2 Expression de la déformation de transformation à saturation

L'expression de la déformation de transformation à saturation ε_{SAT}^T est la suivante :

$$\varepsilon_{SAT}^T = \varepsilon_{MAX}^T \left(1 + \beta \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \right)^{1/n} \quad (\text{A.21})$$

où J_2 et J_3 sont respectivement les deuxième et troisième invariants du tenseur $\bar{\varepsilon}^T$.

On peut donc en déduire sa dérivée par rapport au vecteur $\bar{\varepsilon}^T$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_{SAT}^T}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} &= \varepsilon_{MAX}^T \left(1 + \beta \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \right)^{1/n} \frac{\beta \left(2J_2 \frac{\partial J_3}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} - 3J_3 \frac{\partial J_2}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} \right)}{n \left(\beta J_3 + J_2^{3/2} \right) 2J_2} \\ &= \varepsilon_{SAT}^T \frac{\beta \left(2J_2 \frac{\partial J_3}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} - 3J_3 \frac{\partial J_2}{\partial \bar{\varepsilon}_i^T} \right)}{n \left(\beta J_3 + J_2^{3/2} \right) 2J_2} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

A.2.3 Résidu d'écoulement et d'orientation avec notation vectorielle

La direction d'écoulement est fonction de la force thermodynamique d'orientation :

$$\eta_i = \eta_i^{\sigma dev} \left(F_{\bar{\varepsilon}_j^T} \right) \quad (\text{A.23})$$

Les résidus d'orientation et d'écoulement s'expriment respectivement :

$$\begin{aligned} R_{\bar{\varepsilon}^T} &= \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev} - F_{\bar{\varepsilon}^T}^{max} \\ R_{\Delta \bar{\varepsilon}_i^T} &= \Delta \bar{\varepsilon}_i^T - \lambda_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{3}{2} P_{2ij} \eta_j \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

avec les matrices de passage et de multiplication :

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad M_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.25})$$

La norme de Von Mises au sens des contraintes d'un tenseur déviatorique exprimé sous forme vectorielle en convention « contrainte » s'exprime :

$$\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(M_{2ij} F_{\bar{\varepsilon}_j^T} \right) F_{\bar{\varepsilon}_i^T}} \quad (\text{A.26})$$

et sa direction, qui est la direction d'écoulement de la déformation de transformation :

$$\eta_i^{\sigma dev} \left(F_{\bar{\varepsilon}_j^T} \right) = \frac{F_{\bar{\varepsilon}_i^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}} \quad (\text{A.27})$$

Ainsi, si on dérive la norme $\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}$ par une grandeur quelconque X :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}}{\partial X} &= \frac{3}{2} \frac{M_{2ij} F_{\bar{\varepsilon}_j^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}} \frac{\partial F_{\bar{\varepsilon}_i^T}}{\partial X} \\ &= \frac{3}{2} M_{2ij} \eta_j^{\sigma dev} \frac{\partial F_{\bar{\varepsilon}_i^T}}{\partial X} \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Ce résultat peut ensuite être utilisé pour calculer les dérivées du résidu d'écoulement $R_{\Delta\bar{\varepsilon}_i^T}$ par rapport aux inconnues des équations d'équilibre de la loi de comportement :

$$\frac{\partial R_{\Delta\bar{\varepsilon}_i^T}}{\partial \Delta\Sigma_j} = -\frac{3}{2}\lambda_{\bar{\varepsilon}^T} P_{2,ik} \left(\frac{\frac{\partial F_{\bar{\varepsilon}_k^T}}{\partial \Delta\Sigma_j} \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev} - F_{\bar{\varepsilon}_k^T} \frac{\partial \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}}{\partial \Delta\Sigma_j}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}^2} \right) \quad (\text{A.29})$$

$$= -\frac{3}{2} \frac{\lambda_{\bar{\varepsilon}^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}} P_{2,ik} \left(\frac{\partial F_{\bar{\varepsilon}_k^T}}{\partial \Delta\Sigma_j} - \eta_k \cdot \frac{\partial \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}}{\partial \Delta\Sigma_j} \right)$$

$$\frac{\partial R_{\Delta\bar{\varepsilon}_i^T}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}_j^T} = -\frac{3}{2} \frac{\lambda_{\bar{\varepsilon}^T}}{\left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}} P_{2,ik} \left(\frac{\partial F_{\bar{\varepsilon}_k^T}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}_j^T} - \eta_k \cdot \frac{\partial \left| F_{\bar{\varepsilon}_i^T} \right|_{\sigma dev}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}_j^T} \right) \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{\partial R_{\Delta\bar{\varepsilon}_i^T}}{\partial \Delta p} = -\frac{3}{2} P_{2,ij} \eta_j \quad (\text{A.31})$$

A.3 PONDÉRATION NON-LOCALE PAR UNE FONCTION DE GREEN

La fraction non locale de martensite est donnée par l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} \bar{f}(\vec{x}) &= \int_{\Omega} G(\vec{y}, \vec{x}) f(\vec{y}) d\Omega(\vec{y}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} G(\vec{y}, \vec{x}) f(\vec{y}) dy_1 dy_2 \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

La fonction $G(\vec{y}, \vec{x})$ est donnée par :

$$G(\vec{y}, \vec{x}) = \frac{1}{4\pi\rho\ell^2} \exp\left(-\frac{\rho}{\ell}\right) \quad (\text{A.33})$$

où

$$\rho = |\vec{x} - \vec{y}| = \sqrt{\sum_{i=1}^2 (x_i - y_i)^2} \quad (\text{A.34})$$

$f(\vec{y})$ peut être approximée au voisinage de \vec{x} par un développement de Taylor :

$$\begin{aligned} f(\vec{y}) &= f(\vec{x}) + \frac{\partial f}{\partial x_i} (y_i - x_i) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (y_i - x_i) (y_j - x_j) \\ &\quad + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} (y_i - x_i) (y_j - x_j) (y_k - x_k) \\ &\quad + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k \partial x_l} (y_i - x_i) (y_j - x_j) (y_k - x_k) (y_l - x_l) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

En introduisant cette approximation dans l'intégrale (A.32), on obtient :

$$\begin{aligned}
\bar{f}(\vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^2} G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 f(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 \frac{\partial f}{\partial x_i} \\
&+ \frac{1}{2!} \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \\
&+ \frac{1}{3!} \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j)(y_k - x_k) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} \\
&+ \frac{1}{4!} \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j)(y_k - x_k)(y_l - x_l) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 \frac{\partial^4 f}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k \partial x_l} \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{A.36}$$

On peut noter que la fonction $G(\vec{y}, \vec{x})$ est symétrique par rapport à $y_i - x_i = 0$ et que les termes $(y_i - x_i)$ sont antisymétriques. Les propriétés suivantes peuvent alors être écrites :

$$\begin{aligned}
I_i &= \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 = 0 \quad \forall i \\
I_{ij} &= \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 = 0 \quad \forall i \neq j \\
I_{ijk} &= \int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j)(y_k - x_k) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 = 0 \quad \forall i, j, k
\end{aligned} \tag{A.37}$$

L'intégrale facteur du terme d'ordre 4,

$$\int_{\mathbb{R}^2} (y_i - x_i)(y_j - x_j)(y_k - x_k)(y_l - x_l) G(\vec{y}, \vec{x}) dy_1 dy_2 \tag{A.38}$$

est non nulle pour les cas suivants :

$$\begin{aligned}
i &= j = k = l \\
i &= j \quad \text{et} \quad k = l \quad \text{et} \quad i \neq k \\
i &= k \quad \text{et} \quad j = l \quad \text{et} \quad i \neq j \\
i &= l \quad \text{et} \quad j = k \quad \text{et} \quad i \neq j
\end{aligned} \tag{A.39}$$

En effectuant le changement de variable $\vec{z} = \vec{y} - \vec{x}$ et en utilisant la propriété $\int_{\mathbb{R}^2} G(\vec{z}) d\vec{z} = 1$, l'équation (A.36) se simplifie en :

$$\bar{f}(\vec{x}) = f(\vec{x}) + \frac{1}{2!} I_m^{(2)} \frac{\partial^2 f}{\partial x_m^2} + \frac{3}{4!} I_{mn}^{(2)} \frac{\partial^4 f}{\partial x_m^2 \partial x_n^2} + \frac{1}{4!} I_m^{(4)} \frac{\partial^4 f}{\partial x_m^4} + \dots \tag{A.40}$$

avec :

$$\begin{aligned}
I_m^{(2)} &= \int_{\mathbb{R}^2} z_m^2 G(\vec{z}) dz_1 dz_2 = 2\ell^2 \quad \forall m = 1, 2 \\
I_{mn}^{(2)} &= \int_{\mathbb{R}^2} z_m^2 z_n^2 G(\vec{z}) dz_1 dz_2 = 8\ell^4 \quad \forall m, n = 1, 2 \\
I_m^{(4)} &= \int_{\mathbb{R}^2} z_m^4 G(\vec{z}) dz_1 dz_2 = 24\ell^2 \quad \forall m = 1, 2
\end{aligned} \tag{A.41}$$

L'équation A.40 s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
\bar{f}(\vec{x}) &= f(\vec{x}) + \ell^2 \nabla^2 f(\vec{x}) + \ell^4 \nabla^4 f(\vec{x}) + \dots \\
&= f(\vec{x}) + c(\ell) \nabla^2 f(\vec{x}) + d(\ell) \nabla^4 f(\vec{x}) + \dots
\end{aligned} \tag{A.42}$$

L'utilisation de la fonction de poids $G(\vec{y}, \vec{x})$ entraîne $d(\ell) - c^2(\ell) = 0$.

BIBLIOGRAPHIE

- Nimesis - alliage à mémoire de forme / shape memory alloy. URL <http://www.nimesis.com>.
- Simula+. URL <http://www.univ-valenciennes.fr/lamav/Simula%2B/>.
- Abaqus. *Abaqus Analysis User's Manual - Prescribed Conditions, Constraints & Interactions*.
- A. Acharya et J. L. Bassani. Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :1565–1595, 2000.
- K. Kwan Ahn et N. Bao Kha. Internal model control for shape memory alloy actuators using fuzzy based Preisach model. *Sensors and Actuators A*, 163 :730–741, 2007.
- K. Kwan Ahn et N. Bao Kha. Modeling and control of shape memory alloy actuators using Preisach model, genetic algorithm and fuzzy logic. *Mechatronics*, 18 :141–152, 2008.
- J. Ahola. Model Based Control of SMA Actuators with a Concurrent Neural Network in the Shape Control of an Airfoil, MAFESMA meeting, 2008. URL <http://www.fzu.cz/departments/metals/sma/mafesma/>.
- J. L. Batoz et G. Dhatt. *Modélisation des structures par éléments finis*, volume 2. Hermès, 1990.
- O. W. Bertacchini, D. C. Lagoudas, et E. Patoor. Thermomechanical transformation fatigue of TiNiCu SMA actuators under a corrosive environment - Part I : Experimental results. *International Journal of Fatigue*, 31 :1571–1578, 2009.
- Z. Bo et D. C. Lagoudas. Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part I : theoretical derivations. *International Journal of Engineering Science*, (37) : 1089–1140, 1999a.
- Z. Bo et D. C. Lagoudas. Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part IV : modeling of minor hysteresis loops. *International Journal of Engineering Science*, (37) :1205–1249, 1999b.
- E. Bollé. Contribution au problème linéaire de flexion d'une plaque élastique. *Bulletin Technique de la Suisse Romande*, 73 :281–285 et 293–298, 1947.
- C. Bouvet, S. Calloch, et C. LExcellent. A phenomenological model for pseudoelasticity of shape memory alloys under multiaxial proportional and nonproportional loadings. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 23(1) :37–61, 2004.
- J. Bowles et J. Mackenzie. The crystallography of martensite transformations. *Acta Metall.*, (2) :129–137, 1954.
- J. G. Boyd et D. C. Lagoudas. Thermomechanical response of shape memory composites. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, (5) :333–346, 1994.

- L. C. Brinson. One dimensional constitutive behaviour of shape memory alloys : thermo-mechanical derivation with non-constant material functions. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, (4) :229–242, 1993.
- J. L. Chaboche et G. Cailletaud. Integration methods for complex plastic constitutive equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 133 :125–155, 1996.
- Y. Chemisky. *Modélisation du comportement macroscopique des alliages à mémoire de forme - Application aux matériaux composites*. Thèse de Doctorat, Université Paul Verlaine de Metz, Juillet 2009.
- Y. Chemisky, A. Duval, E. Patoor, et T. Ben Zineb. Modeling behavior of shape memory alloys, including phase transformation and twinning inside martensite effects. *en cours*, 2009.
- C.B. Churchill, J.A. Shaw, et M.A. Iadicola. Tips and tricks for characterizing shape memory alloy wire : Part2 - Fundamental isothermal responses. *Experimental Techniques*, 33 :51–62, 2009.
- M. Dolce et D. Cardone. Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications - 1. Martensite and austenite NiTi bars subjected to torsion. *International Journal of Mechanical Sciences*, (23) :2631–2656, 2001a.
- M. Dolce et D. Cardone. Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications - 2. Austenite NiTi wires subjected to tension. *International Journal of Mechanical Sciences*, (43) :2657–2677, 2001b.
- R.A.B. Engelen. *Plasticity-induced Damage in Metals - nonlocal modelling at finite strains*. Thèse de Doctorat, Technische Universiteit Eindhoven, 2005.
- R.A.B. Engelen, M.G.D. Geers, et F.P.T. Baaijens. Nonlocal implicit gradient-enhanced elastoplasticity for the modelling of softening behaviour. *International Journal of Plasticity*, 19 : 403–433, 2003.
- D. Entemeyer, E. Patoor, A. Eberhardt, et M. Berveiller. Strain rate sensitivity in superelasticity. *International Journal of Plasticity*, 16 :1269–1288, 2000.
- D. Entemeyer, E. Patoor, A. Eberhardt, et M. Berveiller. Erratum to “strain rate sensitivity in superelasticity” [international journal of plasticity, 16(2000) 1269–1288]. *International Journal of Plasticity*, 17, 2001.
- A. C. Eringen. A unified theory of thermomechanical materials. *International Journal of Engineering Science A*, 4(2) :179–202, 1966.
- N. A. Fleck et J. W. Hutchinson. A phenomenological theory for strain gradient next term effects in plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(12) :1825–1857, 1993.
- N. A. Fleck et J. W. Hutchinson. Strain Gradient Plasticity. *Advances in Applied Mechanics*, 33, 1997.
- N. A. Fleck, G. M. Muller, M. F. Ashby, et J. W. Hutchinson. Strain gradient plasticity : Theory and experiment. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42 :475–487, 1994.
- C. P. Frick, S. Orso, et E. Arzt. Loss of pseudoelasticity in nickel-titanium sub-micron compression pillars. *Acta Materialia*, 55 :3845–3855, 2007.

- Y. Q. Fu, Sam Zhang, M. J. Wu, W. M. Huang, H. J. Du, J. K. Luo, A. J. Flewitt, et W. I. Milne. On the lower thickness boundary of sputtered NiTi films for shape memory application. *Thin Solid Films*, 515 :80–86, 2006.
- H. Gao et Y. Huang. Taylor-based nonlocal theory of plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :2615–2637, 2001.
- H. Gao, Y. Huang, W. D. Nix, et J. W. Hutchinson. Mechanism-based strain gradient plasticity - I. Theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47 :1239–1263, 1999.
- X. Gao, M. Huang, et L. C. Brinson. A multivariant micromechanical model for SMAs Part 1. Crystallographic issues for single crystal model. *International Journal of Plasticity*, 16 (10-11) :1345–1369, 2000.
- P. Goetgheluck. Métaux à mémoire. URL <http://www.goetgheluck.com>.
- C. Grabe et O.T. Bruhns. Path dependence and multiaxial behavior of a polycrystalline NiTi alloy within the pseudoelastic and pseudoplastic temperature regimes. *International Journal of Plasticity*, 25(3) :513–545, 2009.
- D. Hartl. S3t roundrobin session. Dans *ESOMAT*, 2009.
- D. Hartl, J. Mooney, et D.C. Lagoudas. Numerically implemented constitutive model for SMA applications experiencing general loads resulting in plastic deformations and large rotations. Dans *Proceeding of ASME SMASIS*, 2008.
- R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11 :357–372, 1963.
- M. Huang et L. C. Brinson. A multivariant model for single crystal shape memory alloy behavior. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8) :1379–1409, 1998.
- M. Huang, X. Gao, et L. C. Brinson. A multivariant micromechanical model for SMAs Part 2. Polycrystal model. *International Journal of Plasticity*, 16(10-11) :1371–1390, 2000.
- T. Hugues et J. Winget. Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *Journal for Numerical Methods in Engineering*, (51) :1862–1897, 1980.
- M. I. Idiart, V. S. Deshpande, N. A. Fleck, et J. R. Willis. Size effect in the bending of thin foils. *International Journal of Engineering Science*, in press, 2009.
- M. Jirásek et Z.P. Bažant. Inelastic analysis of structures. Chapitre 26, pages 517–539. Wiley, 2002.
- J. Kemp. Root canal illustration with molars, 2005. URL http://fr.wikipedia.org/wiki/Fichier:Root_Canal_Illustration_Molar.svg.
- Y. Kim, G. Cho, S. Hur, S. Jeong, et T. Nam. Nanocrystallization of a Ti-50.0Ni(at%) alloy by cold working and stress/strain behavior. *Materials Science and Engineering : A*, (438–440) : 531–553, 2006.
- D.C. Lagoudas. *Shape Memory Alloys - Modeling and Engineering Applications*. Springer US, 2008. ISBN 978-0-387-47685-8.

- Dimitris C. Lagoudas et Pavlin B. Entchev. Modeling of transformation-induced plasticity and its effect on the behavior of porous shape memory alloys. part i : constitutive model for fully dense smas. *Mechanics of Materials*, 36(9) :865–892, 2004.
- J. Lemaitre et J. L. Chaboche. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, 2e édition, 2001.
- C. LExcellent, A. Vivet, C. Bouvet, S. Calloch, et P. Blanc. Experimental and numerical determinations 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.
- C. Liang et C. Rogers. One dimensional thermomechanical constitutive relations for shape memory materials. *journal of Intelligent Material Systems and Structures*, (1) :207–234, 1990.
- C. Liang et C. Rogers. A multi dimensional constitutive model for shape memory alloys. *Journal of Engineering Mathematics*, (26) :429–443, 1992.
- Y. Liu et D. Favier. Stabilisation of martensite due to shear deformation via variant reorientation in polycrystalline NiTi. *Acta Materialia*, 48(13) :3489–3499, 2000.
- Y. Liu, Z. Xie, J. Van Humbeeck, et L. Delaey. Some results on the detwinning process in NiTi shape memory alloys. *Scripta Materialia*, 41(12) :1273–1281, 1999.
- Z. K. Lu et G. J. Weng. A self-consistent model for the stress-strain behavior of shape-memory alloy polycrystals. *Acta Materialia*, 46(15) :5423–5433, 1998.
- R. D. Mindlin. Influence of rotatory inertia and shear on flexural motions of isotropic, elastic plates. *Journal of Applied Mechanics*, 18 :31–38, 1951.
- R. D. Mindlin. Microstructure in linear elasticity. *Archive of Rational Mechanics and Analysis*, 16 :51–78, 1964.
- R. D. Mindlin. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 1(4) :417–438, 1965.
- F. C. Müller. Zwei stents von schräg vorne mit zentimetermaß, 2008. URL http://fr.wikipedia.org/wiki/Fichier:Stent4_fcm.jpg.
- L. Orgéas et D. Favier. Stress-induced martensitic transformation of a NiTi alloy in isothermal shear, tension and compression. *Acta Materialia*, 46(15) :5579–5591, 1998.
- M. Panico et L. C. Brinson. A three-dimensional phenomenological model for martensite reorientation in shape memory alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55 (11) :2491–2511, 2007.
- M. Panico et L. C. Brinson. Computational modeling of porous shape memory alloys. *International Journal of Solids and Structures*, 45 :5613–5626, 2008.
- E. Patoor, M. El Amrani, A. Eberhardt, et M. Berveiller. Determination of the origin for the dissimetry observed between tensile and compression tests on shape memory alloys. *Journal de Physique IV*, (5) :495–500, 1995.
- E. Patoor et M. Berveiller. *Technologie des alliages à mémoire de forme*. Hermès, 1994. ISBN 2-86601-426-X.
- E. Patoor, A. Eberhardt, et M. Berveiller. Micromechanical modelling of superelasticity in shape memory alloys. *Journal de Physique. IV*, C1(6) :277–292, 1996.

- R.H.J. Peerlings, R. De Borst, et W.A.M. Brekelmans. Wave propagation and localisation in non-local gradient enhanced damage models. *Journal de Physique IV*, 8 :293–300, 1998.
- R.H.J. Peerlings, M.G.D. Geers, R. De Borst, et W.A.M. Brekelmans. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :7723–7746, 2001.
- B. Peultier. *Alliages à mémoire de forme : modélisation et calcul de structures*. Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Centre de Metz, 07 2005.
- B. Peultier, T. Ben Zineb, et E. Patoor. Macroscopic constitutive law of shape memory alloy thermomechanical behaviour. Application to structure computation by FEM. *Mechanics of Materials*, 38(5-6) :510–524, 2006.
- B. Peultier, T. Ben Zineb, et E. Patoor. A simplified micromechanical constitutive law adapted to the design of shape memory applications by finite element methods. *Materials Science and Engineering : A*, 481-482 :384–388, 2008. Proceedings of the 7th European Symposium on Martensitic Transformations, ESOMAT 2006.
- M. Piao, K. Otsuka, S. Miyazaki, et H. Horikawa. Mechanism of the A_s temperature increase by pre-deformation in thermoelastics alloys. *Mater. Trans. JIM*, 34 :919, 1993.
- G. Pijaudier-Cabot et Z.P. Bažant. Nonlocal damage theory. *Journal of Engineering Mechanics-ASCE*, 113 :1512–1533, 1987.
- R. Plietsch et K. Ehrlich. Strength differential effect in pseudoelastic NiTi shape memory alloys. *Acta Materialia*, 45(6) :2417–2424, 1997.
- P. Popov et D. C. Lagoudas. A 3-d constitutive model for shape memory alloys incorporating pseudoelasticity and detwinning of self-accommodated martensite. *International Journal of Plasticity*, 23(10-11) :1679–1720, 2007.
- M. A. Qidwai et D. C. Lagoudas. On thermomechanics and transformation surfaces of polycrystalline NiTi shape memory alloy material. *International Journal of Plasticity*, 16 :1309–1343, 2000.
- B. Raniecki et C. Lexcellent. R-I models of pseudoelasticity and their applications for some shape memory alloys. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 12(1) :21–50, 1994.
- B. Raniecki et C. Lexcellent. Thermodynamics of isotropic pseudoelasticity in shape memory alloys. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 17(2) :185–205, 1998.
- E. Reissner. The effect of transverse shear deformation on the bending of elastic plates. *Journal of Applied Mechanics*, 12 :A69–A77, 1945.
- G. Rio, D. Favier, et H. Desplats. Finite Elements Simulation of Mechanical Behaviour of Shape Memory Alloys Coupled with a Non-Stationary Thermal Field. *Journal de Physique IV*, 5 :C8–215–C8–220, 1995.
- G. Rio, H. Laurent, et G. Blès. Asynchronous interface between a finite element commercial software ABAQUS and an academic research code HERZHZH++. *Advances in Engineering Software*, 39 :1010–1022, 2008.
- D. Rogula. *Nonlocal theory of material media*. Springer Berlin, 1982.

- E. Shameli, A. Alasty, et H. Salaarieh. Stability analysis and nonlinear control of a miniature shape memory alloy actuator for precise applications. *Mechatronics*, 15 :471–486, 2005.
- J. A. Shaw et S. Kyriakides. On the nucleation and propagation of phase transformation fronts in a NiTi alloy. *Acta Materialia*, 45(2) :683–700, 1997.
- J. Y. Shu et N. A. Fleck. The prediction of a size effect in micro-indentation. *International Journal of Solids and Structures*, 35(13) :1363–1383, 1998.
- N. Siredey, E. Patoor, M. Berveiller, et A. Eberhardt. Constitutive equations for polycrystalline thermoelastic shape memory alloys. : Part i. intragranular interactions and behavior of the grain. *International Journal of Solids and Structures*, 36(28) :4289–4315, 1999.
- P. Sittner. RoundRobin SMA modelling, 2008.
- A. C. Souza, E. N. Mamiya, et N. Zouain. Three-dimensional model for solids undergoing stress-induced phase transformations. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 17 :789–806, 1998.
- L. Strömberg et M. Ristinmaa. FE-formulation of a nonlocal plasticity theory. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 136 :127–144, 1996.
- Q.P. Sun et Y.J. He. A multiscale continuum model of the grain-size dependence of the stress hysteresis in shape memory alloy polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*, 45(13) :3868–3896, 2008.
- H. Svensson. Brackets for orthodontics, 2005. URL <http://fr.wikipedia.org/wiki/Fichier:Brackets06.jpg>.
- K. Tanaka. A thermomechanical sketch of shape memory effect : One dimensional tensile behavior. *Res Mechanica*, (18) :251–263, 1986.
- F. Thiébaud. *De l'étude dynamique des alliages à mémoire de forme à l'optimisation de leur effet amortissant*. Thèse de Doctorat, Université de Franche-Comté, Décembre 2007.
- F. Thiebaud, C. LExcellent, M. Collet, et E. Foltete. Implementation of a model taking into account the asymmetry between tension and compression, the temperature effects in a finite element code for shape memory alloys structures calculations. *Computational Materials Science*, 41(2) :208–221, 2007.
- W. Tirry et D. Schryvers. In situ transmission electron microscopy of stress-induced martensite with focus on martensite twinning. *Materials Science and Engineering : A*, (481–182) : 420–425, 2008.
- R. A. Toupin. Elastic materials with couple-stress. *Archive of Rational Mechanics and Analysis*, 11 :385–414, 1962.
- K. Tsuchiya, M. Inuzuka, D. Tomus, A. Hosokawa, H. Nakayama, K. Morii, Y. Todaka, et M. Umemoto. Martensitic transformation in nanostructured thin shape memory alloy formed via severe plastic deformation. *Materials Science and Engineering : A*, (438–440) : 643–648, 2006.
- J. Van Humbeeck. Non-medical applications of shape memory alloys. *Materials Science and Engineering : A*, 273–275 :134–148, 1999.

- B. Wack, J.-M. Terriez, et P. Guelin. A hereditary type, discrete memory, constitutive equation with applications to simple geometries. *Acta Mechanica*, 50 :9–37, 1983.
- M. Weschler, D. Lieberman, et T. Read. On the theory of the formation of martensite. *Trans. AIME*, 197 :1503, 1953.
- Z. Xie, Y. Liu, et J. Van Humbeeck. Microstructure of NiTi shape memory alloy due to tension-compression cyclic deformation. *Acta Materialia*, 46(6) :1989–2000, 1998.
- W. Zaki et Z. Moumni. A three-dimensional model of the thermomechanical behavior of shape memory alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(11) :2455–2490, 2007.
- E. Zauderer. *Partial differential equations of applied mathematics*. Wiley, Chichester, UK, 2nd edition édition, 1989.
- H. M. Zbib et E. C. Aifantis. A gradient-dependent model for the Portevin-Le Chatelier effect. *Scripta Metallurgica*, 22(8) :1331–1336, 1988.

NOTATIONS

\mathbb{R}, \mathbb{R}_+	ensembles des réels et des réels positifs
$\sigma(r)$	contrainte locale
$\varepsilon(r)$	déformation locale
$\varepsilon^{el}(r)$	déformation élastique locale
$\varepsilon^{th}(r)$	déformation par dilatation thermique locale
$\varepsilon^T(r)$	déformation de transformation locale
$\varepsilon^{tw}(r)$	déformation locale d'accommodation des macles
Σ	contrainte macroscopique (supposée constante dans un VER)
Σ^D	déviateur des contraintes
E	déformation macroscopique (supposée constante dans un VER)
E^{el}	déformation élastique macroscopique (supposée constante dans un VER)
E^{th}	déformation macroscopique par dilatation thermique (supposée constante dans un VER)
E^T	déformation de transformation macroscopique (supposée constante dans un VER)
E^{tw}	déformation macroscopique par accommodation des macles (supposée constante dans un VER)
$\mathcal{S}(r)$	tenseur de souplesse local d'ordre 4
S	tenseur de souplesse élastique d'ordre 4
f	fraction volumique de martensite
$\bar{\varepsilon}^T$	déformation moyenne de transformation au sein du volume de martensite
f^{FA}	fraction volumique de martensite formée sous forme auto-accommodée
$\bar{\varepsilon}^{tw}$	déformation moyenne par accommodation des macles au sein du volume de martensite formée auto-accommodée
V	volume du VER
V_M	volume de martensite au sein du VER
V_{twin}	volume de martensite présentant des macles au sein du VER
α	coefficient de dilatation thermique
T	température
U^A	énergie interne de l'austénite
U^M	énergie interne de la martensite
S^A	entropie de l'austénite
S^M	entropie de la martensite
C_v^A	chaleur à volume constante de l'austénite
C_v^M	chaleur à volume constante de la martensite
G^A	enthalpie libre de Gibbs de l'austénite

G^M	enthalpie libre de Gibbs de la martensite
G^{ext}	contribution du chargement extérieur à l'enthalpie libre de Gibbs
G^{int}	contribution des incompatibilités de déformation à l'enthalpie libre de Gibbs
ΔG	variation d'enthalpie libre de Gibbs entre un état initial austénite et un état biphasé austénite-martensite
$T_0 = \frac{\Delta U}{\Delta S}$	température d'équilibre de la transformation martensitique
$B = -\Delta S$	variation linéaire de l'entropie autour de la température d'équilibre
B_d	valeur de B constatée lors d'une transformation directe austénite vers martensite
B_r	valeur de B constatée lors d'une transformation inverse martensite vers austénite
V_k	notation générique d'une variable interne
A_k	force thermodynamique associée à la variable interne V_k
A_f	force thermodynamique associée à la transformation de phase
$A_{\bar{\varepsilon}^T}$	force thermodynamique associée à l'orientation des variantes de martensite
$A_{\bar{\varepsilon}^{tw}}$	force thermodynamique associée à l'accommodation inélastique des macles
F_f^{crit}	valeur critique de la force thermodynamique associée à la transformation de phase
F_f^{min}	valeur minimale de F_f^{crit}
F_f^{max}	valeur maximale de F_f^{crit}
$F_{\bar{\varepsilon}^T}^{crit}$	valeur critique de la force thermodynamique associée à l'orientation des variantes de martensite
$F_{\bar{\varepsilon}^{tw}}^{crit}$	valeur critique de la force thermodynamique associée à l'accommodation inélastique des macles
γ_f	variable d'évolution décrivant l'avancement de la transformation de phase en cours
f^{mem}	valeur de fraction volumique de martensite constatée lors du dernier changement de sens de transformation
f^{obj}	valeur de fraction volumique de martensite qui sera observée si la transformation de phase en cours arrive à saturation
Γ_f	rayon de la surface de charge en transformation de phase
κ_f	position du centre de la surface de charge en transformation de phase
H_f	paramètre d'interaction lié à la transformation de phase
$H_{\bar{\varepsilon}^T}$	paramètre d'interaction lié à l'orientation des variantes de martensite
$H_{\bar{\varepsilon}^{tw}}$	paramètre d'interaction lié à l'accommodation inélastique des macles
H_s	paramètre d'interaction lié au décalage des températures de transformation
ε_{SAT}^T	valeur de saturation de l'orientation des variantes de martensite pour une direction d'orientation donnée
ε_{MAX}^T	valeur de saturation de l'orientation des variantes de martensite avec prise en compte de la structure de la martensite (formée auto-accommodée ou non)

ε_{trac}^T	valeur de saturation de la déformation de transformation mesurée lors d'un chargement superélastique en traction
ε_{comp}^T	valeur de saturation de la déformation de transformation mesurée lors d'un chargement superélastique en compression
ε_{trac}^{TFA}	valeur de saturation de la déformation de transformation mesurée lors d'un chargement en traction sur de la martensite formée auto-accommodée
M_1	métrique de l'espace vectorielle défini par la notation de Voigt
\tilde{S}	matrice de souplesse élastique en notation de Voigt
\tilde{C}	matrice de rigidité élastique en notation de Voigt
$ X_{ij} _\sigma$	norme de Von Mises d'un tenseur d'ordre 2 au sens des contraintes : $ X_{ij} _\sigma = \sqrt{\frac{3}{2} X_{ij} X_{ij}}$
$ X_{ij} _\varepsilon$	norme de Von Mises d'un tenseur d'ordre 2 au sens des déformations : $ X_{ij} _\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{3} X_{ij} X_{ij}}$
VER	volume élémentaire représentatif
$X : Y$	produit tensoriel doublement contracté : $X : Y = X_{ij} Y_{ji}$
$\{X\}$	vecteur colonne
$[Y]$	matrice

Ce document a été préparé à l'aide de l'éditeur de texte GNU Kile et du logiciel de composition typographique \LaTeX 2 ϵ . Compilé le 6 janvier 2010

Titre Modélisation du comportement thermomécanique d'alliages à mémoire de forme. Application au dimensionnement de microsystèmes et extension en non local

Résumé Un modèle de comportement thermomécanique pour les alliages à mémoire de forme est présenté. Il prend en compte la transformation de phase martensitique, l'orientation des variantes de martensite ainsi que l'accommodation inélastique des macles au sein de la martensite formée sous une structure auto-accommodée. Un potentiel thermodynamique pour un volume élémentaire représentatif est proposé. Il est décrit à l'aide de trois variables internes définies à l'échelle macroscopique. Des forces thermodynamiques sont dérivées de ce potentiel et équilibrées en faisant intervenir des phénomènes dissipatifs. Le modèle est ensuite implanté dans un code de calcul par élément finis afin de dimensionner des structures en deux et trois dimensions. Ce modèle a servi par la suite de base à une description non locale du comportement superélastique permettant de prendre en compte les phénomènes de localisation observés dans les fils et les films minces d'AMF. Des éléments finis spécifiques sont développés afin de pouvoir prendre en compte ce type d'approche dans le cadre d'un calcul de structures.

Mots-clés alliages à mémoire de forme; modélisation mathématique; transformation martensitique; approche non locale; éléments finis, méthode des.

Title Modeling of shape memory alloys thermomechanical behavior. Application to microsystems design and extension to nonlocal framework

Abstract A constitutive thermomechanical model for the behavior of shape memory alloys is presented. It takes into account the martensitic phase transformation, the orientation of martensite variants and the inelastic accommodation of twins inside self-accommodated martensite. A thermodynamical potential is built using three internal variables described at macroscopic scale. Driving forces are derived from this potential and the equilibrium is reached by considering dissipative phenomena. The model is then implemented into a finite element code in order to design two or three-dimensional structures. It was adopted as a fundamental for a non-local description of the superelastic behavior in order to take into account the localization phenomenon observed in SMA wires and thin films. Specific finite elements are developed to account with this type of approach in the framework of structures computation.

Keywords shape memory alloys; mathematical modeling; martensitic transformation; nonlocal approach; finite elements method.