Modélisation macroscopique des alliages à mémoire de forme - Application aux matériaux composites

Yves Chemisky

▶ **To cite this version:**

Yves Chemisky. Modélisation macroscopique des alliages à mémoire de forme - Application aux matériaux composites. Mécanique [physics.med-ph]. Université de Metz, 2009. Français. NNT : . tel-00421864v2

HAL Id: tel-00421864

https://theses.hal.science/tel-00421864v2

Submitted on 15 Dec 2009

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 Paul Verlaine de Metz
Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux

Thèse

Spécialité Génie Mécanique - Mécanique des Matériaux

Yves Chemisky

Modélisation du comportement macroscopique des alliages à mémoire de forme - Application aux matériaux composites

Composition du jury :

Pr.	P. Pilvin	Université de Bretagne-Sud	(Président)
Pr.	C. Lexcellent	Université de Franche-Comté	(Rapporteur)
Pr.	D. Schryvers	University of Antwerp	(Rapporteur)
Pr.	T. Ben Zineb	Université de Nancy	(Examinateur)
Pr.	E. Patoor	ParisTech	(Directeur de thèse)
Dr.	V. Tahiri	Université de Metz	(Co-directrice de thèse)

A Henri, mon grand-père

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux à Metz sous la direction d'Etienne Patoor, Professeur à Arts et Metiers ParisTech et de Vanessa Tahiri, Maître de conférences à l'Université Paul Verlaine de Metz, dans le cadre d'un projet européen "MAFESMA" soutenu financièrement pour la partie française par une ANR.
Je tiens à remercier Philippe Pilvin de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance, ainsi que Christian Lexcellent et Nick Schryvers pour avoir rapporté ce travail. Merci aussi à Tarak Ben Zineb d'avoir participé à ce jury en tant qu'examinateur.
Je remercie Etienne Patoor, qui durant ces trois années de thèse, a su diriger ce travail avec toute l'expérience, les compétences et les qualités humaines que l'on peut attendre d'un directeur. Merci à Vanessa d'avoir co-encadré ce travail, d'y avoir consacré du temps et de l'interêt, et qui a su m'épauler toujours avec sympathie.
Un grand merci aux membres du LEMTA avec qui la collaboration sur la partie modélisation s'est avérée très fructueuse. Merci Tarak, Arnaud et Boris pour le travail réalisé et votre sympathie.
Je tiens à remercier les membres du LPMM qui ont participé , de près ou de loin, au bon déroulement de ce travail. Merci André pour ton expertise des AMF, ta disponibilité et ta sympathie. Merci à Laurent L., Patrick, Laurent P. et Christophe pour vos contributions du point de vue experimental ou de simulation. Merci à Sebastien, Marion, Arnaud, Jérôme, Hela, Imen, Hakim, Jean-Seb (grand spécialiste des opérateurs de résolution de portée!), Olivier et Camille pour votre sympathie.
Merci aux "anciens", Xavier et Christophe pour les moments de camaraderie au ou en dehors du laboratoire.
Merci bien sur à mes parents, grands-parents et mes frères pour votre confiance et pour avoir su m'épauler durant toutes mes études. Une partie de ce travail vous revient.
Merci à tous mes amis de Metz et d'ailleurs pour votre indéfectible enthousiasme.

Metz, le 15 décembre 2009.

Table des matières

Table des matières **9**

Introduction **13**

1 Comportement des alliages à mémoire de forme **17**
1.1 Les alliages à mémoire de forme - généralités 18
1.2 Comportement thermomécanique des AMF 20
1.2.1 Superélasticité 20
1.2.2 Mémoire de forme 21
1.2.3 Effet mémoire double sens ou éducation 25
1.2.4 Effet mémoire double sens assisté 25
1.2.5 Cycles partiels 26
1.2.6 Comportement multiaxial 28
1.3 Les matériaux composites à base d'alliages à mémoire de forme 30
1.4 Spécificités des alliages de Nickel-Titane 33
1.4.1 Transformations de phases dans un NiTi 34
1.4.2 Effets des traitements thermomécaniques 34
1.4.3 Mécanismes de déformation de la martensite autoaccommodée 35
1.4.4 Effet de la déformation à l'état martensitique sur les températures de transformation 37
1.4.5 Comportement mécanique des NiTi 37
Conclusion 40

2 Modélisation du comportement des AMF : Etat de l'art **41**
2.1 Généralités sur la modélisation des AMF 43
2.1.1 Différentes approches 43
2.1.2 Cadre de la thermodynamique 43
2.1.3 Aspects cinématiques 44
2.1.4 Potentiel thermodynamique 45
2.1.5 Variables d'états et variables internes 46
2.2 Modèle de Panico et Brinson, 2007 47
2.2.1 Equations fondamentales du modèle 48
2.2.2 Commentaires sur le modèle de Panico-Brinson 50

2.3 Modèle de Popov et Lagoudas, 2007 . . . 53
2.3.1 Equations fondamentales du modèle . . . 53
2.3.2 Commentaires sur le modèle de Popov-Lagoudas . . . 55
2.4 Modèle de Thiebaud et Lexcellent, 2007 . . . 56
2.4.1 Equations fondamentales du modèle . . . 56
2.4.2 Expressions de la contrainte équivalente et de la déformation de transformation équivalente . . . 57
2.4.3 Lois d'évolution de la transformation . . . 58
2.4.4 Commentaires sur le modèle de Thiebaud *et al.* . . . 59
2.5 Modèle de Saint-Sulpice *et al.* . . . 59
2.5.1 Equations fondamentales du modèle . . . 60
2.5.2 Prise en compte des cycles partiels . . . 61
2.5.3 Prise en compte de comportements liés au cyclage . . . 61
2.5.4 Commentaires sur le modèle de Saint-Sulpice *et al.* . . . 62
Conclusion . . . 64

3 Modèle thermodynamique macroscopique 65
3.1 Formulation thermodynamique . . . 66
3.1.1 Mécanismes de déformation - Choix des variables internes . . . 66
3.1.2 Définition du potentiel thermodynamique . . . 70
3.1.3 Forces thermodynamiques . . . 76
3.1.4 Potentiel de dissipation . . . 77
3.1.5 Chargements partiels . . . 81
3.1.6 Dissymétrie traction-compression . . . 82
3.1.7 Conditions d'activation - lois d'évolutions . . . 86
3.2 Intégration numérique . . . 89
3.2.1 Mise en équation du problème . . . 90
3.2.2 Intégration implicite . . . 90
3.2.3 Gestion des saturations . . . 91
3.2.4 Expression du système d'équations, calcul des résidus . . . 93
3.2.5 Prise en compte des rotations finies . . . 98
Conclusion . . . 100

4 Validation du modèle 103
4.1 Identification des paramètres matériaux . . . 104
4.2 Validation numérique . . . 110
4.2.1 Pseudo-diagrammes de phase . . . 111
4.2.2 Essais thermomécaniques uniaxiaux . . . 114
4.2.3 Essais multiaxiaux . . . 120
4.3 Comparaison modèle - base de données expérimentale . . . 122
4.3.1 Descriptif de la base expérimentale . . . 122

4.3.2 Identification des paramètres . . . 125
4.3.3 Essais isothermes uniaxiaux de traction . . . 126
4.3.4 Cycles thermiques à contrainte constante . . . 128
4.3.5 Essais isothermes de traction-torsion . . . 128
4.3.6 Retour contraint . . . 138
Conclusion . . . 138

5 Comportement d'un composite alliage à mémoire de forme / élastomère 143
5.1 Choix et caractérisation des composants et conception du composite . . . 148
5.1.1 Choix des matériaux . . . 149
5.1.2 Caractérisation des constituants . . . 149
5.2 Elaboration des rubans composites . . . 151
5.3 Définition du modèle numérique . . . 153
5.3.1 Etude des interactions structurales . . . 153
5.3.2 Simulation du comportement thermomécanique du composite . . . 159
5.4 Elaboration d'un ruban actionneur linéaire . . . 162
Conclusion . . . 164

6 Modélisation des effets de précipitation sur le comportement macroscopique des NiTi 165
6.1 Influence de la concentration en nickel sur les températures de transformation 167
6.1.1 Morphologie des précipités . . . 167
6.1.2 Baisse de la concentration en nickel . . . 168
6.1.3 Modélisation du phénomène . . . 172
6.2 Simulations numériques . . . 174
6.2.1 Comportement en traction . . . 175
6.2.2 Comportement en compression . . . 176
6.2.3 Influence du gradient de concentration . . . 179
Conclusion . . . 182

Conclusion générale 185

A Annexes 189
A.1 Dérivée des résidus, en fonction des mécanismes activés . . . 190
A.2 Jacobien du système . . . 198
A.3 Calcul de l'erreur ζ . . . 199

Bibliographie 201

Introduction

L' innovation technologique, dans des domaines aussi divers que les télécommunications, l'informatique, l'aéronautique et le biomédical, est très souvent liée à la recherche de nouveaux matériaux. De leurs propriétés fonctionnelles dépend en grande partie la mise au point et le succès de nouvelles technologies. La définition et l'élaboration de matériaux innovants est une activité de recherche essentielle préalable à la conception de nouveaux dispositifs. Il est nécessaire de disposer d'outils de modélisation permettant de dimensionner les futures applications utilisant ces nouveaux matériaux, et d'investiguer l'influence des paramètres microstructuraux sur leur comportement. Durant ces cinquante dernières années, d'importants travaux dans ce domaine ont débouché sur l'émergence de matériaux dits intelligents. Stimulés par l'application d'un changement de température, d'un courant électrique ou d'un champ magnétique, ils peuvent être utilisés comme actionneurs. On peut également profiter de ces couplages multiphysiques afin de réaliser des capteurs. En combinant ces possibilités, on obtient une structure dite adaptative qui va réagir en fonction de l'évolution de son environnement.

Suivant le type de couplage, on peut distinguer : les alliages à mémoire de forme (AMF), qui ont un comportement fortement dépendant de la température ; les céramiques piézoélectriques, qui réagissent à l'application d'un champ électrique ; d'autres matériaux tels les polymères électroactifs, les matériaux magnétostrictifs et les fibres optiques. Les difficultés d'élaboration, la recherche de matériaux plus performants, et la complexité des couplages multiphysiques inhérents aux comportements de ces matériaux, exigent de nombreux travaux de recherche mais permettent d'obtenir des avancées conséquentes dans le domaine des technologies de pointe.

Les critères de choix de ces matériaux intelligents sont principalement le travail mécanique disponible et leur fréquence d'activation. Les alliages à mémoire de forme ont une position un peu particulière parmi ces matériaux. Leur activation thermique ne leur permet pas de travailler à haute fréquence (quelques cycles par secondes au maximum) mais ils sont capables de développer un travail mécanique très important. Pour exploiter les propriétés de ces alliages, il est nécessaire d'identifier les mécanismes physiques à l'origine des comportements observés. Il est alors possible d'élaborer des modèles de comportement de ces matériaux, à différentes échelles.

L'objectif de ce travail de thèse est de déterminer un modèle robuste de comportement des AMF, particulièrement adapté aux Nickel-Titane (NiTi) qui sont les plus utilisés dans cette catégorie de matériaux. Ce modèle doit non seulement permettre de déterminer la

réponse d'une structure présentant des éléments intégrés en AMF, mais aussi pouvoir être utilisé afin de déterminer l'influence de paramètres microstructuraux sur le comportement macroscopique, comme par exemple l'impact de la présence de précipités dans une matrice en AMF hétérogène.

Afin d'établir un modèle de comportement, il faut analyser les mécanismes de déformation présents dans les AMF, en particulier dans les NiTi. C'est l'objectif du premier chapitre. La transformation martensitique et les comportements qui en résultent y sont détaillés. Des aspects plus spécifiques, tel l'effet des cycles partiels ou du comportement multiaxial, sont présentés également.

Le deuxième chapitre présente l'état de l'art des modèles macroscopiques des alliages à mémoire de forme. Différentes stratégies de modélisation sont développées, en précisant les choix effectués et les hypothèses associées.

Le troisième chapitre est consacré au développement du modèle thermodynamique macroscopique du comportement des AMF, réalisé en collaboration avec le LEMTA (Nancy). Dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles, les étapes de la définition de ce modèle y sont présentées, de la description des variables représentatives de l'évolution du matériau, jusqu'à l'expression des équations constitutives et l'implémentation dans un code éléments finis commercial (`ABAQUS`).

Afin d'évaluer la pertinence du modèle développé, une étude numérique et une comparaison avec une base de données expérimentale réalisée par l'IP ACSR de Prague, est présentée dans le quatrième chapitre. Le cadre d'utilisation du modèle pourra alors être précisé, et facilitera les interprétations des résultats obtenus dans les chapitres suivants.

L'utilisation de matériaux composites à base d'alliages à mémoire de forme permet d'élargir les possibilités d'utilisation des AMF, en particulier en associant des fibres en AMF et une matrice élastomère. Les diversités de comportements liées aux déformations réversibles importantes permettent de définir des matériaux multifonctionnels. Le cinquième chapitre est dédié à l'étude d'un composite de ce type, constitué d'un fil en NiTi ondulé enrobé dans un ruban en polyuréthane. L'étude porte à la fois sur les conditions d'élaboration, la définition d'un modèle de comportement et la définition d'un actionneur linéaire.

A une autre échelle, un AMF contenant des précipités élastiques ou élastoplastiques peut être vu comme un matériau composite, dont la matrice est un alliage à mémoire de forme. Dans le cas particulier des NiTi, les traitements thermiques appliqués à l'alliage font apparaître des précipités de type Ni_4Ti_3, qui peuvent modifier la composition locale de l'alliage. L'objectif du sixième et dernier chapitre de ce travail est d'étudier l'impact de ce phénomène de précipitation sur le comportement mécanique macroscopique des NiTi, en définissant un modèle

numérique permettant de prendre en compte non seulement l'effet structurel des précipités, mais aussi la modification de composition chimique de la matrice, régulée par un mécanisme de diffusion.

1

Comportement des alliages à mémoire de forme

Sommaire

1.1 Les alliages à mémoire de forme - généralités . . . 18
1.2 Comportement thermomécanique des AMF . . . 20
1.2.1 Superélasticité . . . 20
1.2.2 Mémoire de forme . . . 21
1.2.3 Effet mémoire double sens ou éducation . . . 25
1.2.4 Effet mémoire double sens assisté . . . 25
1.2.5 Cycles partiels . . . 26
1.2.6 Comportement multiaxial . . . 28
1.3 Les matériaux composites à base d'alliages à mémoire de forme . . . 30
1.4 Spécificités des alliages de Nickel-Titane . . . 33
1.4.1 Transformations de phases dans un NiTi . . . 34
1.4.2 Effets des traitements thermomécaniques . . . 34
1.4.3 Mécanismes de déformation de la martensite autoaccommodée . . . 35
1.4.4 Effet de la déformation à l'état martensitique sur les températures de transformation . . . 37
1.4.5 Comportement mécanique des NiTi . . . 37
Conclusion . . . 40

1.1 Les alliages à mémoire de forme - généralités

Observé pour la première fois sur un alliage de Au-Cd en 1951 [Chang et Read, 1951], l'effet mémoire de forme (qui a donné son nom à cette classe de matériaux) n'est que l'un des comportements spécifiques de ces alliages, qui résulte d'une transformation de phase martensitique. Il s'agit d'une transformation sans diffusion, basée sur un déplacement coopératif des atomes à courte distance, permettant de transformer une phase mère cubique en une phase produit possédant un degré de symétrie moins élevé (orthorhombique par exemple). La déformation du réseau est principalement déviatorique. La martensite formée est dite thermoélastique, dans le sens où la déformation nécessaire de la phase mère environnante se fait sans mécanisme de déformation plastique ; c'est donc une transformation réversible. Les mécanismes de déformation impliqués lors de la transformation de phase ont été définis par Weschler, Liebermann et Read [Weschler *et al.*, 1953] et par Bowles et Mackenzie [Bowles et Mackenzie, 1954]. Une maille cubique de l'austénite se transforme en maille de symétrie plus faible par un mécanisme appelé la déformation de Bain. L'existence d'un plan invariant nécessite l'application d'une rotation de la maille ainsi que la formation de macles pour accommoder les deux réseaux le long de ce plan. La figure 1.1 propose une représentation simplifiée en deux dimensions de cette transformation de phase, à l'échelle de la structure atomique. La martensite formée dans les zones A et B a la même structure cristallographique, mais leurs orientations sont différentes. Ces zones sont appelées variantes. Du fait de la faible symétrie de la martensite par rapport à la phase mère austénitique, plusieurs variantes peuvent se former à partir de la même maille d'austénite.

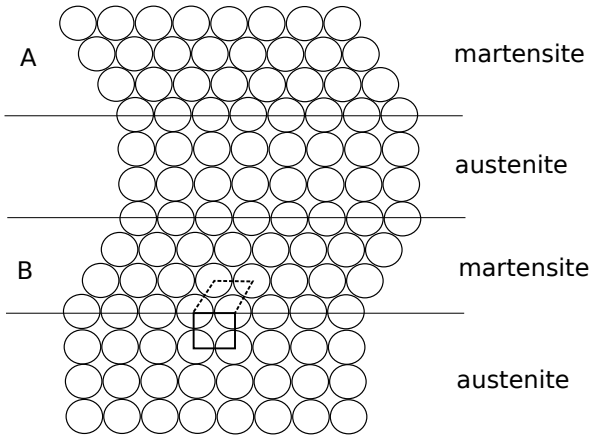

FIG. 1.1: *Schéma simplifié représentant la transformation martensitique (d'après [Otsuka et Wayman, 1998])*

La phase mère austénitique se transforme en martensite dans des conditions thermomécaniques spécifiques. Du fait de plusieurs facteurs microstructuraux (apparition de défauts, morphologie des phases), cette transformation est observée sur une plage de températures. On note alors les températures de début M_s et de fin M_f de transformation. De la même façon, cette transformation étant réversible, la transformation inverse débute à la tempéra-

ture A_s pour se terminer à A_f. Les températures de transformations directe et inverse sont décalées, laissant apparaître un hystérésis caractéristique d'une dissipation d'énergie. La variation d'énergie libre dépend de la température (variation d'énergie cristallographique) et de la contrainte (variation d'énergie élastique). Ainsi, un pseudo-diagramme de transformation peut être construit dans le plan contrainte équivalente - température. La linéarisation de la variation d'énergie cristallographique entre les phases austénitique et martensitique aux alentours de la température d'équilibre T_0 va permettre de définir une droite de transformation (diagramme de Clausius-Clapeyron). La contrainte limite de transformation est alors définie à partir de la température d'équilibre [Patel et Cohen, 1953]. Un pseudo-diagramme de phase communément admis est celui proposé par Brinson [Brinson, 1993] (voir figure 1.2).

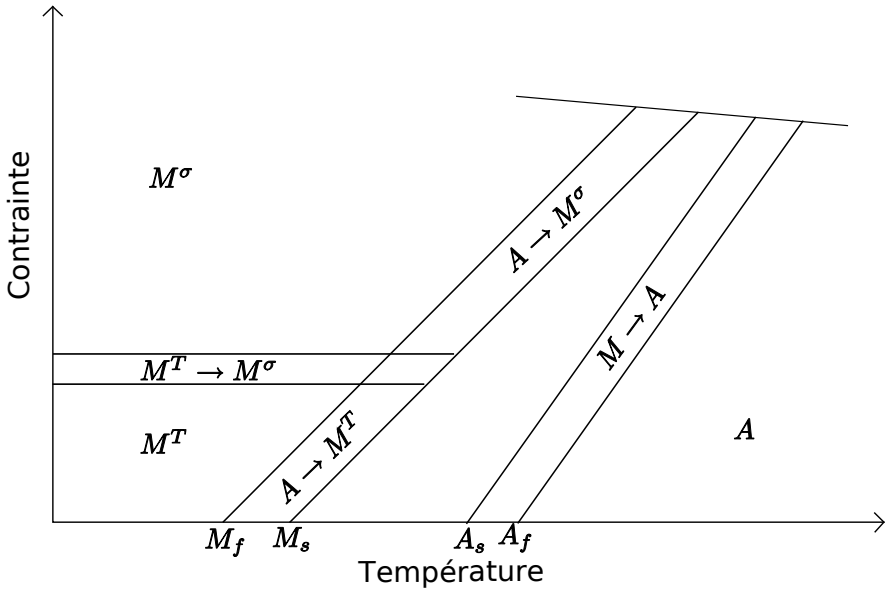

FIG. 1.2: *Pseudo-diagramme de phase proposé par Brinson [Brinson, 1993].*

Lorsqu'aucune contrainte n'est appliquée, les variantes se forment de façon à minimiser l'énergie de déformation. Il en résulte une structure auto-accommodée, dont les variantes s'organisent pour obtenir une déformation globale nulle. Il existe alors des ensembles formés de plusieurs variantes, appelés groupes auto-accommodants, qui n'induisent pas de déformation macroscopique globale. Un exemple de structure auto-accommodée est schématisé en deux dimensions sur la figure 1.3. Par commodité cette martensite est appelée martensite thermique, et notée M^T. Lorsqu'une contrainte est appliquée, les variantes les mieux orientées par rapport à cette contrainte sont privilégiées, d'une façon analogue aux systèmes de glissement en plasticité, en utilisant la notion de cission résolue. Ainsi la variante dont le facteur de Schmid est maximal se formera en premier. Pour chaque direction de contrainte appliquée par rapport à l'orientation du cristal, une déformation maximale macroscopique peut être définie en fonction de l'activation des différentes variantes. Ce point a été validé par l'utilisation de modèles micromécaniques [Patoor *et al.*, 1995]. Par abus de langage la martensite orientée par la contrainte est appelée martensite orientée, et est notée M^σ. Le présent travail

considérant la transformation martensitique de façon macroscopique et non de façon locale, nous adopterons par la suite les notions de martensite thermique et martensite orientée, en gardant à l'esprit que dans les deux cas la martensite formée possède la même structure cristallographique.

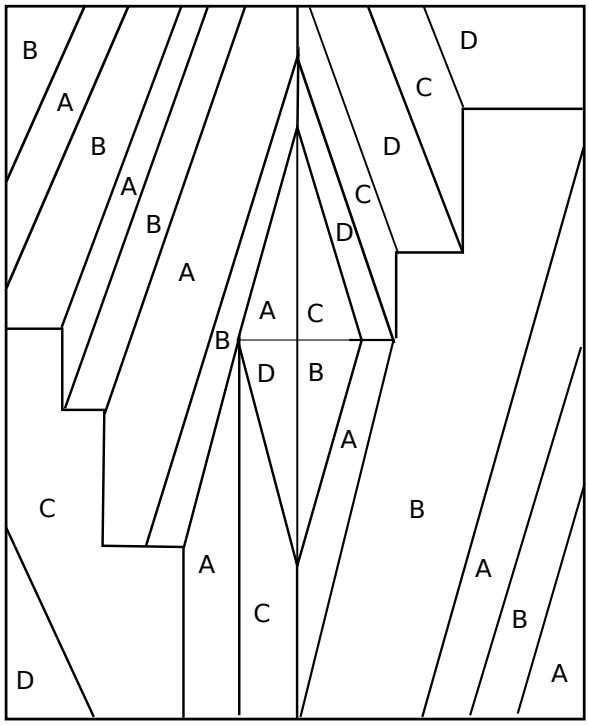

FIG. 1.3: *Représentation en deux dimensions de variantes autoaccommodantes (d'après [Patoor et Berveiller, 1994])*

1.2 Comportement thermomécanique des AMF

Le type de déformation, les conditions de germination et de croissance des variantes de martensite et la déformation maximale résultante permettent d'appréhender les comportements thermomécaniques *a priori* très variés des AMF, qui sont le résultat à l'échelle macroscopique de l'évolution de la microstructure du matériau.

1.2.1 Superélasticité

A une température supérieure à A_f, l'application d'une contrainte macroscopique va induire la formation de variantes orientées, à partir d'une certaine contrainte seuil dépendant de la température de l'essai (voir figure 1.4). Au fur et à mesure de l'évolution de la transformation martensitique, une déformation macroscopique est observée jusqu'à ce que l'échantillon soit complètement transformé. Lors de la décharge, la transformation inverse se produit, la déformation de transformation macroscopique est alors récupérée jusqu'à ce que l'échantillon soit totalement en phase austénitique. On observe ensuite une décharge élastique de l'austé-

nite, l'échantillon retrouve alors sa forme initiale en fin de cycle de décharge. La figure 1.5 montre l'effet superélastique respectivement pour un fil monocristallin de CuAlBe et pour un fil polycristallin de NiTi. Plusieurs différences significatives sont observées. La déformation de transformation est plus importante dans un monocristal. Une seule variante de martensite se forme, la déformation macroscopique résultante est alors directement reliée à la déformation de cisaillement cristallographique. Dans le cas du polycristal, les différences d'orientation d'un grain et les contraintes internes présentes dans les zones perturbées (joints de grains) induisent la formation d'une multitude de variantes, pas forcément les mieux orientées par rapport à la contrainte appliquée. La déformation macroscopique, qui est la moyenne des déformations induites par la formation de ces différentes variantes, est donc moins importante. Les interactions entre les variantes vont aussi rendre la propagation de la transformation plus difficile ; on observe alors une pente de pseudo-écrouissage, presque inexistante dans le cas du monocristal.

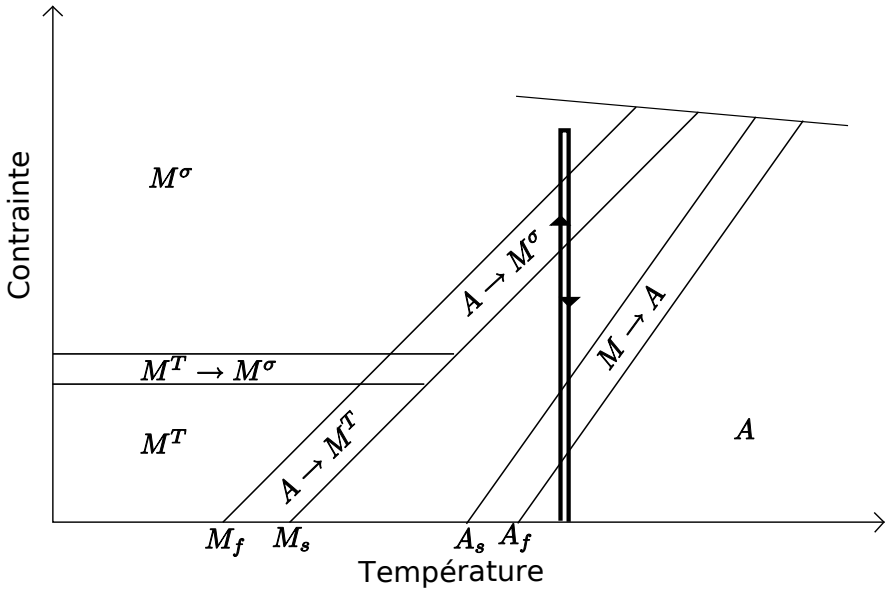

FIG. 1.4: *Chemin thermomécanique correspondant à l'effet superélastique*

Les applications de l'effet superélastique sont multiples. Dans le domaine biomédical par exemple, des stents, des fils guides et des limes endodontiques, ainsi que certaines agrafes (figure 1.6), utilisent les propriétés superélastiques d'un alliage de Nickel-Titane (NiTi), qui a l'avantage d'être biocompatible. La société ASPEX distribue depuis quelques années des montures de lunettes superélastiques en monocristal de CuAlBe. On trouve également des applications dans le domaine du textile et de la mode.

1.2.2 Mémoire de forme

Lors d'un refroidissement, si aucune contrainte n'est appliquée la martensite se forme de manière autoaccommodée. Si on applique une contrainte à une température inférieure à M_f, un mécanisme de déformation propre à la martensite thermoélastique apparaît. Les interfaces

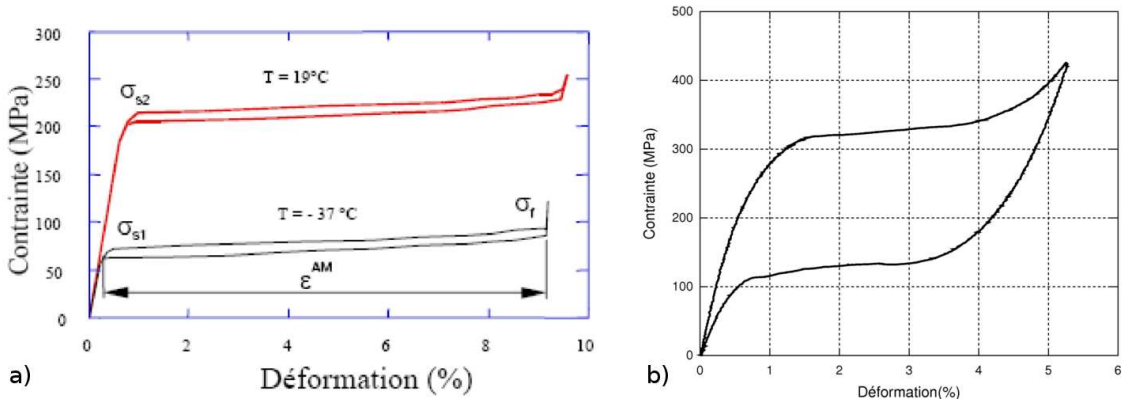

FIG. 1.5: *a) Superélasticité d'un fil monocristallin de CuAlBe. b) Superélasticité d'un fil polycristallin de NiTi.*

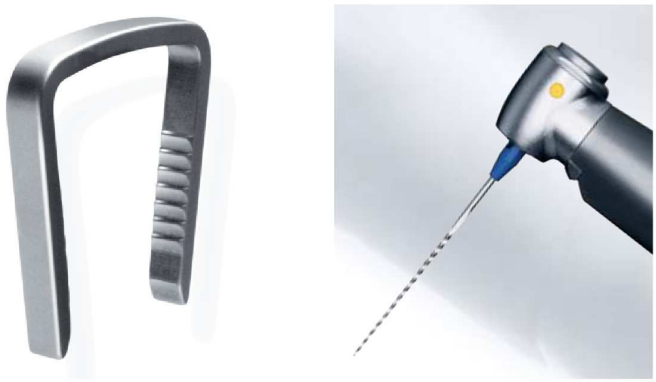

FIG. 1.6: *Applications de la superélasticité dans le domaine biomédical : agrafe superélastique d'ostéosynthèse (MEMOMETAL) et lime dentaire endodontique (KaVo)*

entre les variantes sont assez mobiles, de sorte que sous l'effet d'une contrainte une variante bien orientée peut progresser au détriment des autres. Une déformation macroscopique est alors observée, qui correspond à un mécanisme d'orientation des variantes par rapport à la contrainte appliquée. Lorsque la contrainte est relâchée, à basse température la martensite étant la phase stable, il n'y a pas recouvrance de la déformation obtenue. Si la température augmente, la transformation inverse débute à la température A_s, et cette déformation disparaît jusqu'à ce que l'échantillon retrouve sa forme initiale. La figure 1.7 montre le chemin thermomécanique de l'effet mémoire, et la figure 1.8 illustre le comportement du matériau lors de ce type de chargement thermomécanique.

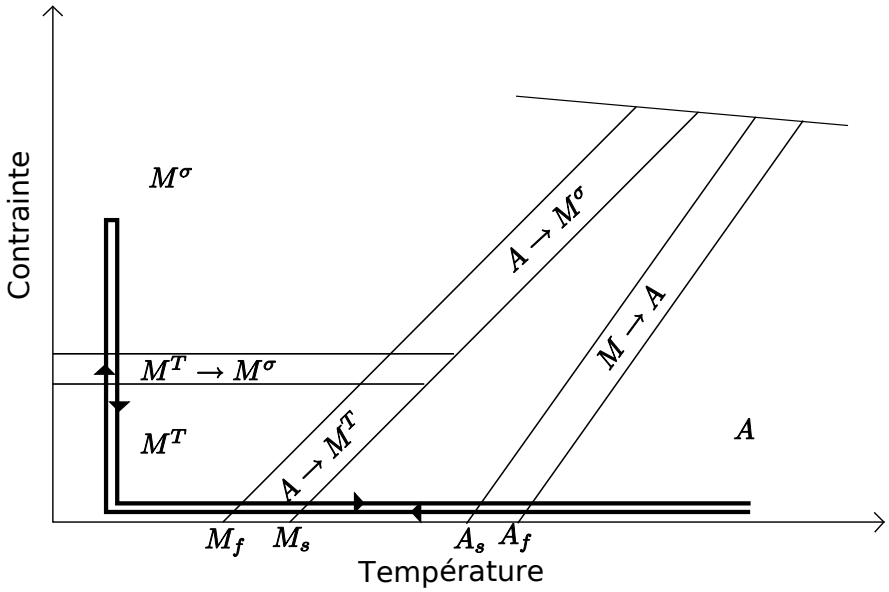

FIG. 1.7: *Chemin thermomécanique de l'effet mémoire de forme*

Le phénomène de mémoire en tant que tel n'est pas d'un grand intérêt pour des applications industrielles car il ne produit pas de travail, puisque le retour à la forme stable s'effectue à contrainte nulle. En revanche, lorsque le matériau est déformé à l'état martensitique, si son déplacement est empêché, lors d'un chauffage ultérieur une déformation élastique apparaît pour compenser la déformation liée à la transformation martensite → austénite. Les contraintes développées dans ce cas peuvent être très importantes.

L'application la plus connue des AMF utilise ce principe pour sertir deux tubes en Titane, évitant ainsi leur soudure. C'est le cas des manchons RAYCHEM, utilisés par la marine américaine sur les avions de type F-14. Plusieurs dispositifs de serrage utilisent ce principe (voir figure 1.9 pour un exemple de manchon en NiTi). Le manchon est préalablement déformé à l'état martensitique, afin de pouvoir insérer les tubes à fixer. Lors du chauffage, le manchon va se rétrécir et bloquer les deux parties du tube, créant ainsi une liaison rigide sans soudure. Des dispositifs de dégerbage de modules spatiaux (satellites, réservoirs...) fonctionnent sur le même principe, l'objectif étant de développer suffisamment d'efforts pour provoquer la

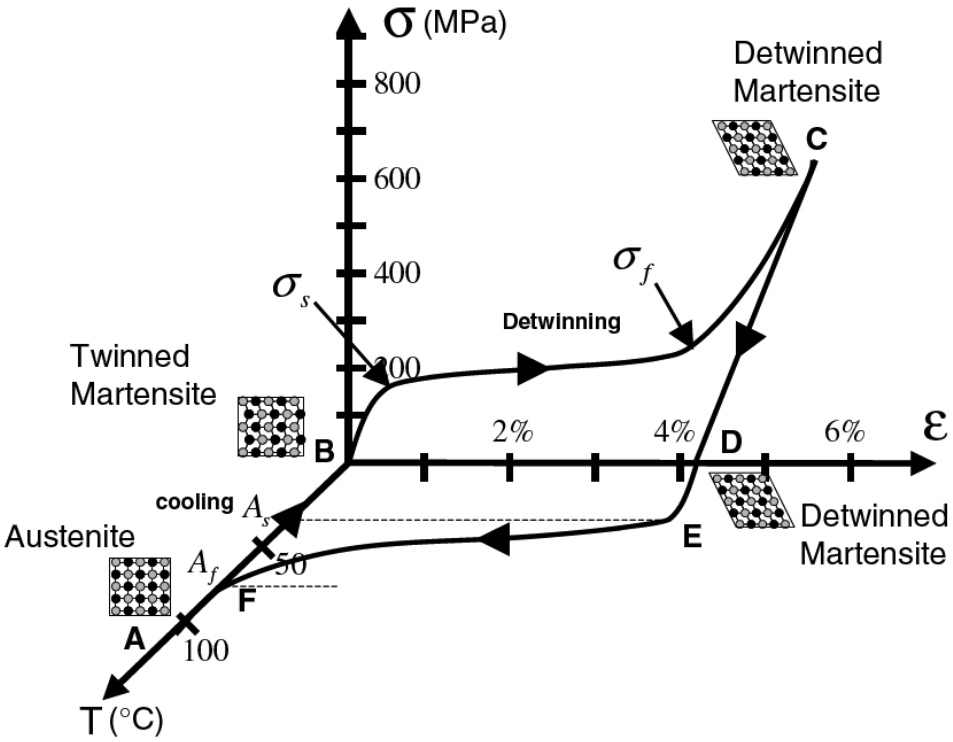

FIG. 1.8: *Effet mémoire de forme classique pour un NiTi, d'après [Lagoudas, 2008]*

FIG. 1.9: *Manchon de serrage en NiTi (Intrinsicdevices)*

rupture d'un goujon de liaison et permettre de commander le largage du module en évitant les chocs (voir figure 1.10).

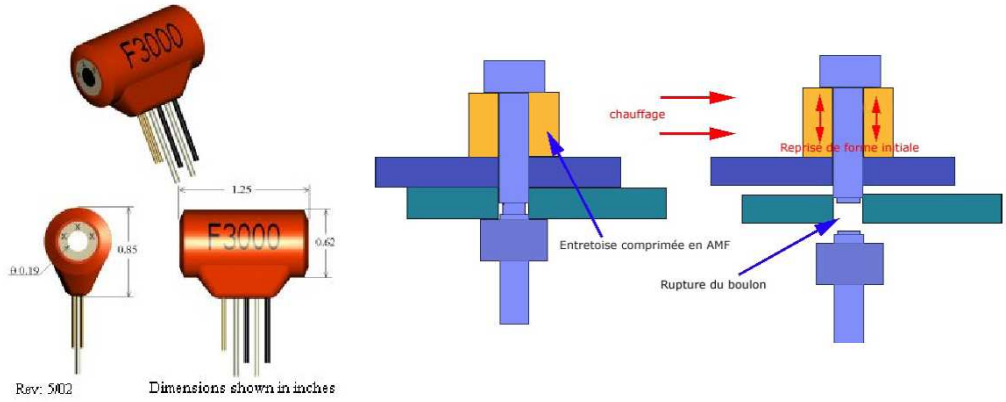

FIG. 1.10: *Dispositif FRANGIBOLT, principe de fonctionnement (TiNi Aerospace)*

1.2.3 Effet mémoire double sens ou éducation

Lors d'un trajet de chargement mettant en jeu l'effet mémoire simple sens, nous avons vu que l'alliage possède une forme stable à haute température. A basse température, il faut appliquer une contrainte pour obtenir une forme différente. Mais dans certains cas, après un traitement spécifique appliqué à l'échantillon (appelé "éducation"), une déformation spontanée apparaît lors d'un refroidissement à contrainte nulle. Deux formes stables existent alors, l'une à froid et l'autre à chaud. Cet effet s'explique par l'existence d'un champ de contraintes internes, généré par l'apparition de défauts lors du procédé d'éducation. Les variantes de martensite se formeront alors avec une orientation préférentielle, ce qui va provoquer une déformation macroscopique. Cet effet a débouché sur peu d'applications. En raison d'une perte de mémoire de la forme à froid, qui peut apparaître rapidement lorsque les contraintes imposées sont importantes, les possibilités (en terme de travail) de dispositifs fonctionnant sur ce principe sont limitées. Dans de nombreux cas on préfèrera utiliser un mécanisme de rappel, on parle alors d'effet mémoire double sens assisté.

1.2.4 Effet mémoire double sens assisté

L'utilisation d'un ressort de rappel permet d'éviter le processus d'éducation, et d'augmenter les capacités des dispositifs à mémoire double sens. Dans ce cas, ce n'est plus la contrainte interne mais l'application d'une contrainte externe qui va induire une orientation des plaquettes de martensite. On peut alors obtenir une forme à chaud et une forme à froid, tout en évitant le phénomène d'amnésie de la forme stable à froid. Les dispositifs utilisant un ressort de rappel sont souvent utilisés pour des dispositifs commandés ; on obtient alors des actionneurs, qui fonctionnent par effet Joule. Dans certains cas, c'est la même partie de la structure qui constitue à la fois le ressort de rappel et l'objet à actionner. L'exemple le plus

simple est le cas d'une masse à soulever à l'aide d'un ressort en AMF. A basse température, la transformation martensite va allonger le fil et ainsi déplacer la masse. Lors d'un chauffage, la transformation inverse se produit : le fil retrouvant alors sa longueur initiale, la masse se soulève (voir figure 1.11).

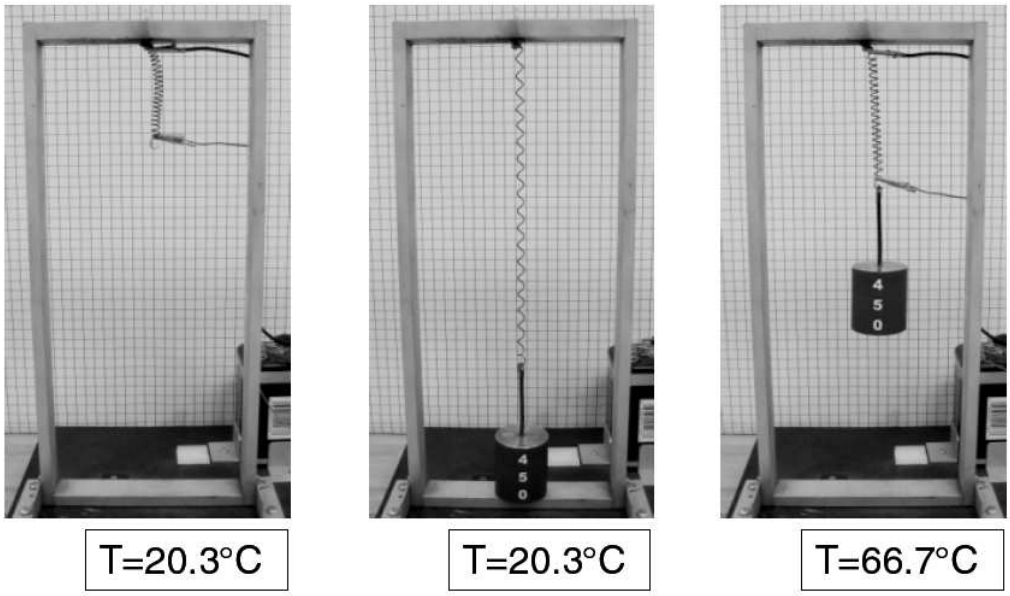

FIG. 1.11: *Dispositif permettant de soulever une masse à l'aide d'un ressort en AMF (d'après [Lagoudas, 2008].)*

Les applications de ce type d'actionneurs sont nombreuses. Récemment l'entreprise Boeing a développé, avec le soutien de Texas A&M University, un dispositif permettant de modifier la forme de réacteurs d'avions (voir figure 1.12). La sortie du réacteur est formée de chevrons, actionnés par l'intermédiaire de trois plaquettes en Nickel-Titane. La géométrie est alors variable, ce qui permet d'adapter l'écoulement des gaz de combustion en fonction des conditions de vol [Calkins et Butler, 2004]. On peut ainsi limiter le bruit des réacteurs, notamment en phase de décollage ou d'approche. Dans ce cas, c'est la structure même qui est utilisée comme ressort de rappel.
Dans d'autres cas, c'est la température ambiante qui est utilisée pour piloter le mouvement de dispositifs de régulation. Par exemple, celui installé dans un mitigeur de douche permet de limiter la température de l'eau en sortie du mitigeur (voir figure 1.13). Un autre dispositif de régulation est utilisé dans un autocuiseur, comme présenté figure 1.14. Lorsque la température dépasse une température limite, un ressort en AMF actionne une valve permettant de libérer la vapeur d'eau sous pression.

1.2.5 Cycles partiels

Des applications comme les manchons d'accouplement où le dispositif de dégerbage FRANGIBOLT sont conçus pour fonctionner en tout-ou-rien, sur la totalité de la transformation.

FIG. 1.12: *Chevrons sur un réacteur Boeing utilisant des actionneurs en AMF, d'après [Hartl et Lagoudas, 2007]*

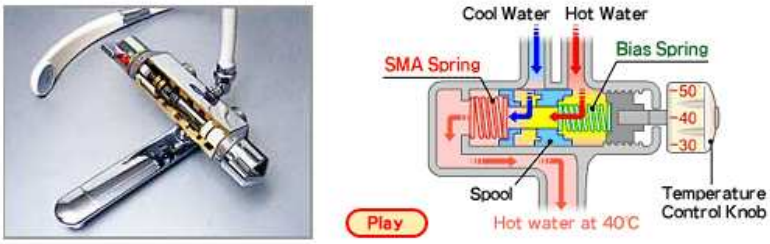

FIG. 1.13: *Mitigeur de douche - Ressort de régulation en AMF (Furukawa Techno Material)*

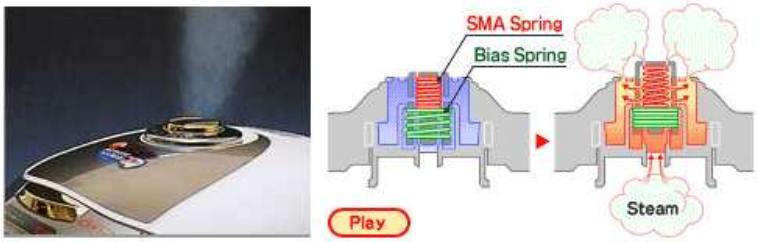

FIG. 1.14: *Autocuiseur - Actionneur de valve de surpression en AMF (Furukawa Techno Material)*

Cela n'est pas le cas pour le ressort AMF du mitigeur de douche de la figure 1.13. Le fonctionnement de ce ressort ne nécessite qu'une partie de la déformation de transformation pour répondre aux variations de température. Ce type d'applications est beaucoup plus délicat à maîtriser car le comportement des AMF se caractérise par la présence de boucles internes lors de chargements partiels. A titre d'exemple, quelques tests menés par Dolce *et al.* [Dolce et Cardone, 2001] (voir figure 1.15) et menés au laboratoire (voir figure 1.16) montrent le comportement en boucles internes de fils en NiTi. Ces boucles correspondent à une réponse thermomécanique qui se trouve à l'intérieur de la boucle d'hystérésis lors d'un chargement complet, c'est-à-dire lorsque la totalité de l'échantillon a été transformé en martensite. Dans le cas de la superélasticité, la différence s'observe principalement sur la contrainte seuil de début de transformation inverse et sur le module apparent correspondant à cette transformation.

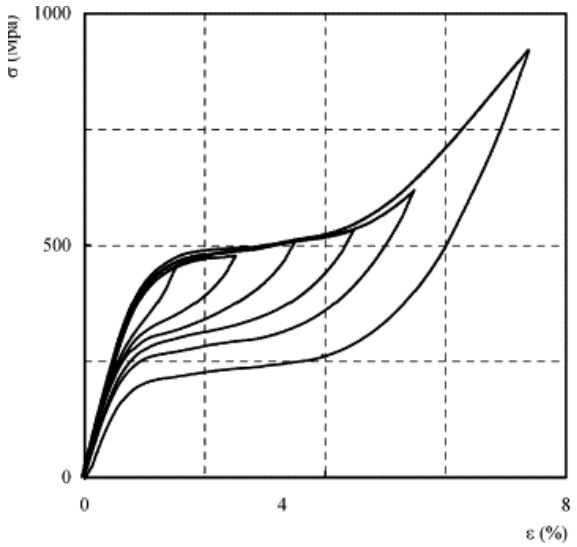

FIG. 1.15: *Comportement superélastique d'un fil en NiTi - mise en valeur des boucles internes [Dolce et Cardone, 2001].*

Il apparaît que le module apparent et la contrainte seuil de retour dépendent de la fraction volumique de martensite maximale transformée. Il n'y a donc pas que le comportement superélastique qui présente ce phénomène, mais aussi entre autres les comportements de mémoire de forme et de refroidissement-chauffage sous contrainte, comme illustré sur la figure 1.17.

1.2.6 Comportement multiaxial

Les exemples de comportements présentés dans les paragraphes précédents ainsi que certaines applications (comme le dispositif FRANGIBOLT) correspondaient à des cas de chargements uniaxiaux. Mais certains dispositifs comme la lime endodontique travaillent dans des conditions de chargements multiaxiaux et non-proportionnels. Il est alors impératif de déterminer le comportement des AMF lors de ce type de sollicitations. Une base de données expérimentale a permis de déterminer le domaine élastique de l'austénite pour des chargements superélastiques multiaxiaux [Lexcellent *et al.*, 2002] sur un CuAlBe (voir figure 1.18). La

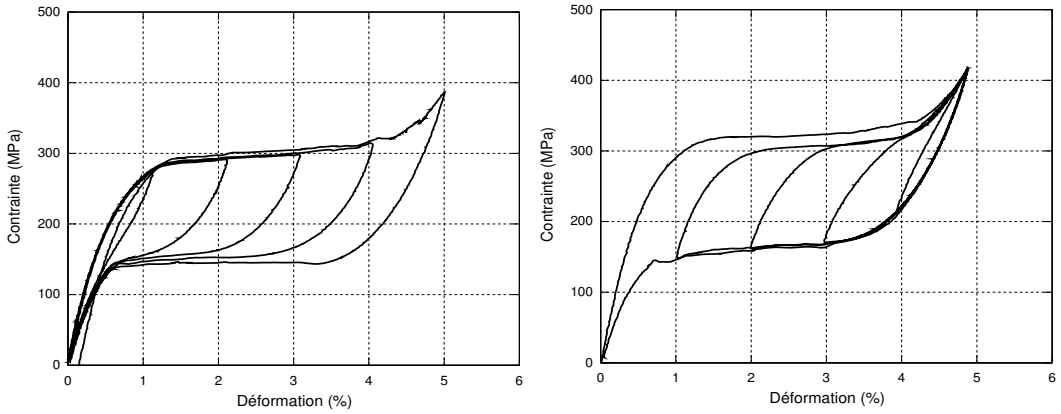

FIG. 1.16: *Boucles internes en superélasticité en transformation directe et inverse pour un NiTi (Essais réalisés au LPMM).*

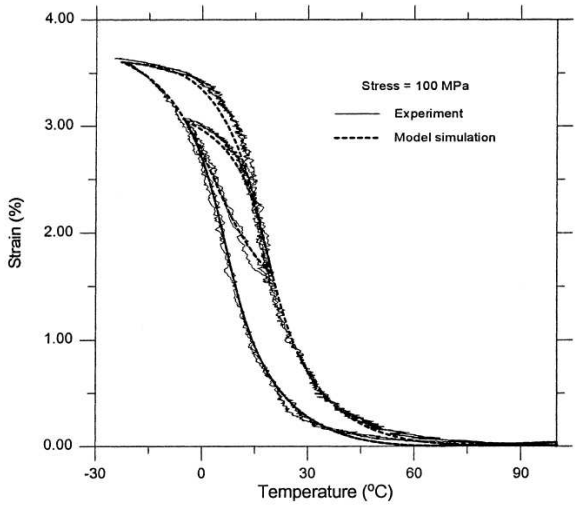

FIG. 1.17: *Boucles internes lors de cycles thermiques pour un NiTi, d'après [Bo et Lagoudas, 1999b].*

surface de début de transformation ainsi déterminée met clairement en évidence une dissymétrie de comportement en traction-compression. Une gamme de modèles micromécaniques initiée par Patoor [Patoor *et al.*, 1995] a montré l'origine de cette dissymétrie. Entre la phase mère austénitique et la phase orthorhombique, il y a une perte de symétrie liée à la morphologie des phases. Plusieurs variantes peuvent donc être formées à partir du même cristal d'austénite ; pour les alliages NiTi et CuAlBe par exemple, on en dénombre vingt-quatre [Patoor et Berveiller, 1994]. Entre des chargements de traction et de compression, ce ne sont pas les mêmes variantes qui vont se former, de sorte que la déformation macroscopique résultante sera différente. Les modèles micromécaniques sont très prédictifs pour les AMF base cuivre mais le sont moins pour les NiTi. Par contre, les essais menés par Orgeas et Favier et Taillard *et al.* [Orgéas et Favier, 1998, Taillard, 2006] en traction, compression et cisaillement, ont montré que le comportement de ces matériaux présente aussi une dissymétrie traction-compression, comme le montre la figure 1.19, qui correspond à une surface seuil de transformation en traction-torsion dans le plan des contraintes axiales - contraintes de cisaillement.

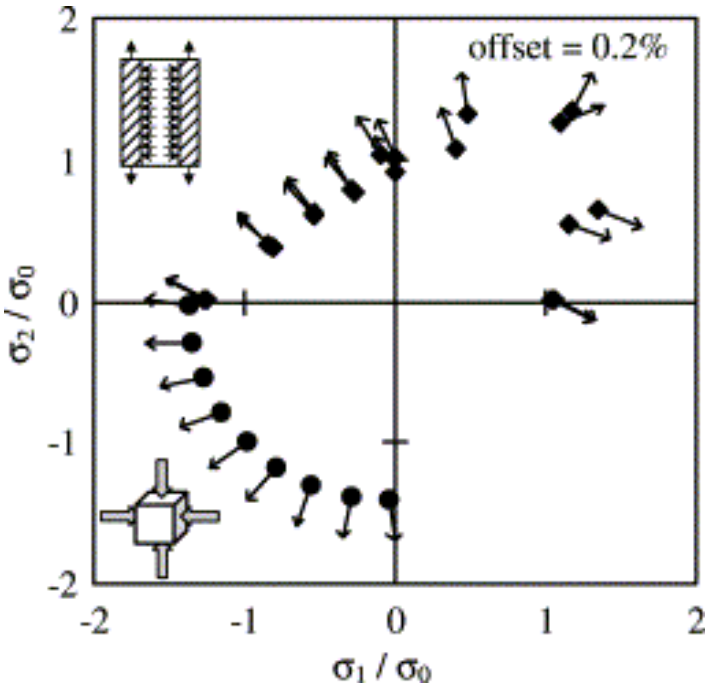

FIG. 1.18: *Surface de charge de transformation expérimentale (alliage CuAlBe), d'après [Lexcellent* et al.*, 2002].*

1.3 Les matériaux composites à base d'alliages à mémoire de forme

Lors de la définition d'un dispositif en alliage à mémoire de forme, la question de l'intégration dans son environnement est cruciale. Les difficultés de mise en forme et de dimensionnement limitent bien souvent la géométrie des pièces en AMF. On trouve généralement ces alliages

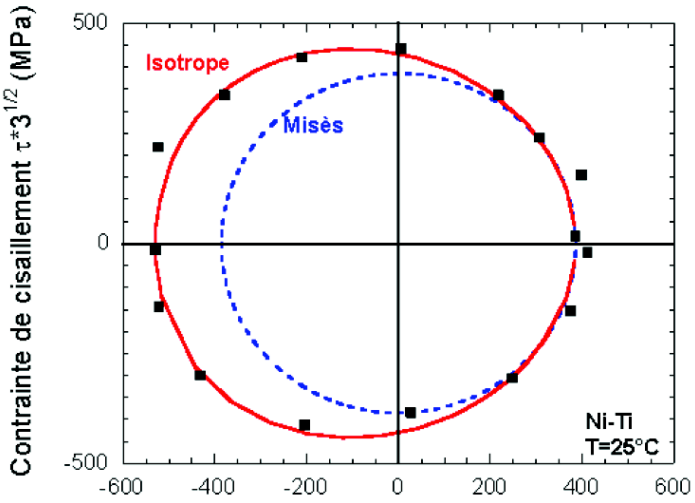

FIG. 1.19: *Surface seuil d'un NiTi pour des chargements en traction-torsion, d'après [Taillard, 2006].*

sous forme de fils, de ressorts, de barreaux ou de plaques minces. La réalisation de matériaux composites permet d'étendre l'utilisation des AMF avec la définition de pièces composites plus complexes intégrant des composants en AMF de géométrie simple. Les interactions de structures peuvent de plus améliorer les propriétés du composant en AMF. Par contre, en raison des déformations importantes des composants en alliage à mémoire de forme, l'association avec d'autres matériaux est limitée. Le choix se porte naturellement vers les élastomères et les polymères, en raison de leur déformation réversible importante. Les premières utilisations des composites AMF/élastomères remontent à une vingtaine d'années. Thuman *et al.* ont étudié l'effet d'une couche en élastomère sur une feuille en NiTi lors de cycles mémoires [Thumann *et al.*, 1986]. Le degré de déformation réversible augmente avec la fraction d'épaisseur de la couche élastomère. Les contraintes développées dans l'élastomère lors de la déformation de la structure permettent d'assister le retour de forme de l'AMF (voir fig. 1.20). Le même type de composites a été étudié à partir des années 1990 [Escher *et al.*, 1992, Mertmann *et al.*, 1994], afin de fabriquer une pince de préhension commandée (voir figure 1.21). Dans ce cas, un doigt en AMF est enrobé d'une peau épaisse en élastomère qui assure alors la fonction de ressort de rappel, en plus de ses propriétés structurales et fonctionnelles (préhension). On obtient ainsi une structure à mémoire double sens, avec une position ouverte et une position fermée de la pince selon la température imposée au barreau en NiTi. Un système de refroidissement par circulation d'eau est utilisé pour augmenter la fréquence d'utilisation de la pince.

En 2001, l'entreprise EADS et d'autres partenaires se sont intéressés au comportement adaptatif d'une aile d'avion en composite AMF/polymère [Balta *et al.*, 2001]. Des fils d'AMF ont été insérés dans une matrice en kevlar-époxy (voir figure 1.22), l'objectif étant de modifier la fréquence de résonance de l'aile en induisant des contraintes internes dans la structure.

En 2005, plusieurs applications composites ont été proposées par Neuking *et al* [Neuking *et al.*, 2005] (voir figure 1.23). La première est un organe de transmission pou-

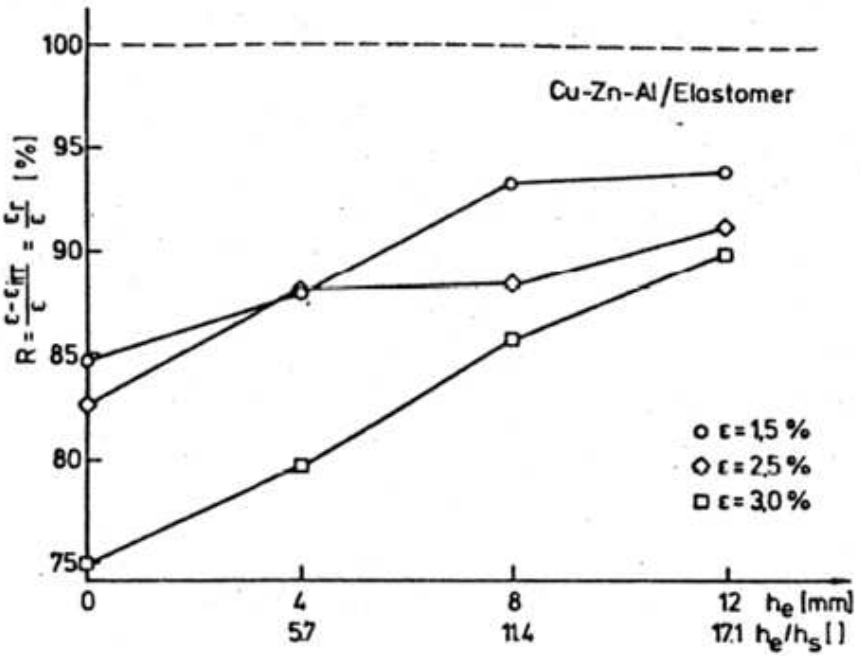

FIG. 1.20: *Degré de déformation réversible lors d'une reprise de forme en fonction de la fraction d'épaisseur élastomère/AMF. L'ajout d'une couche épaisse d'élastomère facilite l'effet mémoire de forme, d'après [Thumann* et al.*, 1986].*

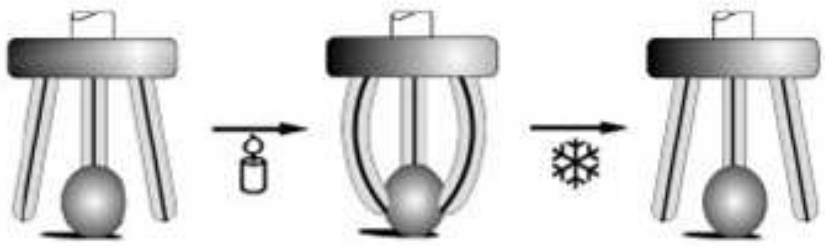

FIG. 1.21: *Fonctionnement d'une pince en composite AMF/élastomère, d'après [Neuking* et al.*, 2005].*

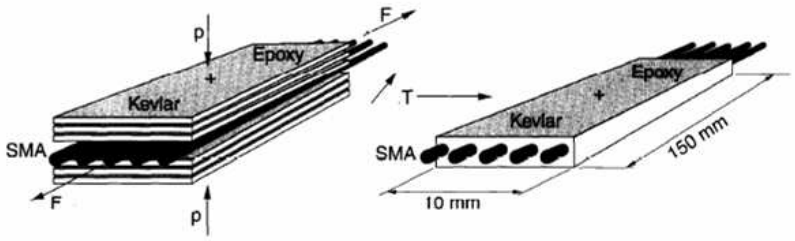

FIG. 1.22: *Schéma d'un composite AMF/kevlar-epoxy pour des applications aéronautiques, d'après [Balta* et al.*, 2001].*

vant accepter des décalages angulaires et radiaux importants. Des fils en AMF reliant deux parties en rotation sont enrobés dans une matrice en élastomère. Le rôle de cette matrice est de limiter le flambage des fils, d'amortir les vibrations et de limiter le bruit. La seconde application proposée est un embrayage. Des griffes en AMF sont insérées dans une partie de l'embrayage, et permettent d'accoupler la seconde partie par chauffage de l'élément en AMF. Les contraintes stockées dans l'élastomère permettent alors le retour à la position initiale.

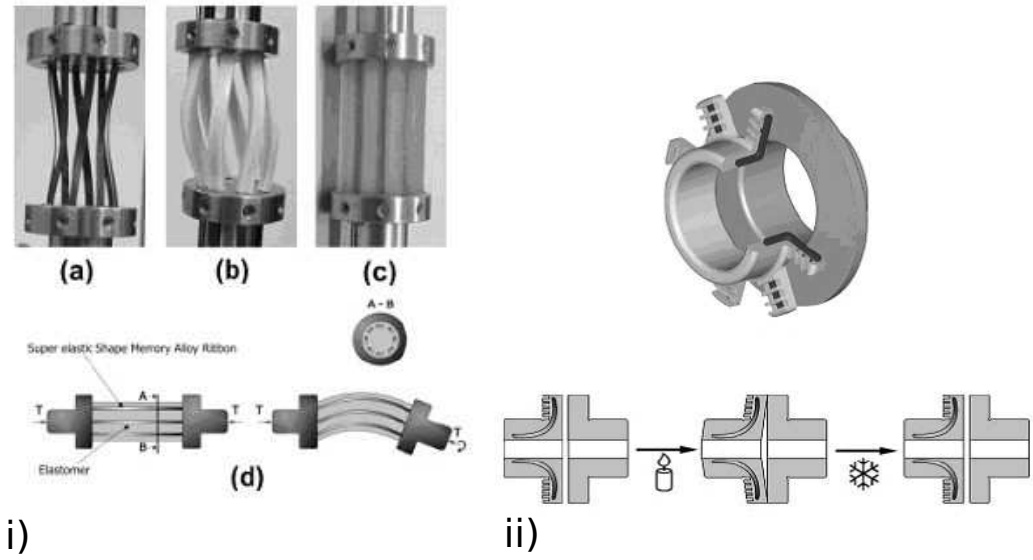

FIG. 1.23: *i) Organe de transmission (a) avec des fibres AMF seules, (b) chaque fibre est enrobée, (c) et (d) une seule matrice enrobe toutes les fibres. ii) Principe de fonctionnement de l'embrayage à griffes, d'après [Neuking* et al.*, 2005]*

1.4 Spécificités des alliages de Nickel-Titane

La plupart des applications des AMF utilisent les alliages de NiTi, il est important de décrire les spécificités rencontrées dans ces matériaux. L'effet mémoire de forme a été observé dans les alliages de NiTi équiatomiques dans les années 60. Les bonnes propriétés mécaniques de cet alliage ont permis son application dans le domaine de l'aéronautique (manchons RAYCHEM). Peu d'autres applications ont été développées avant les années 90, en raison de la difficulté de relier le comportement de cet alliage à sa mise en œuvre. De nombreux travaux ont été menés depuis, afin de mieux comprendre l'impact de sa composition chimique et des traitements thermomécaniques sur son comportement macroscopique. Actuellement, le Nickel-Titane est de loin l'alliage à mémoire de forme le plus utilisé, en raison de ses excellentes propriétés mécaniques et de sa biocompatibilité. Bien que certains effets soient encore mal compris, on a déterminé l'impact des conditions d'élaboration sur l'état microstructural du matériau, qui est relié aux effets macroscopiques observés.

1.4.1 Transformations de phases dans un NiTi

L'austénite (A) de ce matériau est une phase de structure B2, qui peut se transformer soit en phase R (rhombohédrique), soit en une martensite monoclinique B19'. Deux séquences de transformation sont possibles, B2 → R → B19' ou B2 → B19'. La déformation de réseau associée à la formation de la phase R est faible, la déformation macroscopique résultante observée est de l'ordre de 1% tandis que celle de la martensite B19' varie entre 4 et 7%. Les séquences de transformation observées dépendent fortement des traitements thermomécaniques appliqués à l'alliage. Otsuka et Ren [Otsuka et Ren, 2005] ont montré que les transformations multiples ne peuvent apparaître que dans l'ordre croissant des amplitudes de déformations de transformations associées, car cette dernière est reliée à la variation d'entropie liée à la transformation de phase. La phase R peut apparaître dans un NiTi sans éléments d'addition lorsqu'un traitement thermique a induit la formation de précipités Ni_4Ti_3, ou pour un matériau fortement écroui.

1.4.2 Effets des traitements thermomécaniques

A l'état recuit, la limite d'élasticité des NiTi est faible. Un fort écrouissage à froid est nécessaire afin d'augmenter cette limite élastique et obtenir un effet superélastique [Miyazaki *et al.*, 1982]. Il faut ensuite appliquer un traitement thermique de revenu, afin de relaxer les contraintes internes tout en conservant une densité de dislocations suffisante. La température du revenu doit alors être inférieure à la température de recristallisation, qui se situe aux alentours de 600°C [Otsuka et Wayman, 1998]. Abujodom *et al.* [Abujudom *et al.*, 1990] ont montré que le taux d'écrouissage a une influence significative sur les températures de transformation des alliages NiTi. Plus le taux d'écrouissage est important, plus les températures de transformation sont basses.
Le diagramme de phase du NiTi et le diagramme TTT (Temps-Température-Transformation) [Nishida *et al.*, 1986] montrent que lors du traitement de revenu, une nouvelle phase peut précipiter sous certaines conditions. C'est en particulier le cas pour des alliages dont la teneur en Nickel est supérieure à 50,2% at. Ni, comme l'a montré Miyazaki [Miyazaki *et al.*, 1986]. Tadaki *et al.* [Tadaki *et al.*, 1986] ont établi que la composition de cette phase correspond à une maille élémentaire de type rhombohédrique, formée de huit atomes de nickel et six de titane. Il s'agit de précipités de type Ni_4Ti_3, qui apparaissent sous forme lenticulaire. Ces précipités, généralement de petite taille, sont dits cohérents et engendrent des contraintes internes au voisinage de l'interface précipité/matrice [Xie *et al.*, 1989]. Ils sont riches en nickel, ce qui va provoquer une diminution de la concentration en nickel de la matrice environnante. La croissance de ces derniers est régulée par un mécanisme de diffusion, la fenêtre thermique de croissance se situe entre 350°C et 550°C [Wurzel, 1999]. Les températures de transformation étant fortement reliées à la composition chimique [Tang *et al.*, 1999], le comportement macroscopique des NiTi traités thermiquement est alors modifié par la présence de ce gradient de concentration autour de la phase Ni_4Ti_3.

1.4.3 Mécanismes de déformation de la martensite autoaccommodée

L'étude de la courbe contrainte-déformation à une température inférieure à M_f pour un NiTi, de la martensite de structure initialement autoaccommodée, fait apparaître plusieurs stades de comportement. Ceux-ci sont reportés sur la figure 1.24. Le premier stade correspond à un mécanisme d'accommodation des macles, suivi d'un plateau correspondant à la réorientation des variantes. La dernière partie de la courbe correspond à la déformation élastique de la martensite, combinée à d'autres mécanismes (démaclage et plasticité). Le mécanisme correspondant au premier stade a été décrit par Liu *et al.* [Liu *et al.*, 1999].

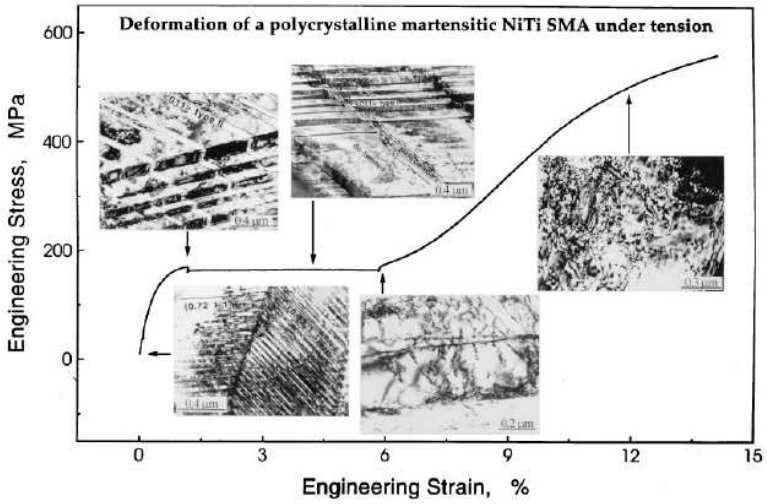

FIG. 1.24: *Stades de comportement de la martensite, d'après [Liu* et al.*, 1999]*

La théorie de Weschler *et al.* [Weschler *et al.*, 1953] suppose que pour obtenir des variantes à plan d'habitat, il est nécessaire qu'une composition de trois déformations à l'échelle du réseau cristallin s'applique : une déformation de Bain (cisaillement), une rotation du réseau et l'apparition de macles. Lors de la formation de martensite autoaccommodée, les variantes sont maclées mais ces macles ne sont pas en relation les unes par rapport aux autres à l'interface entre deux variantes. Cette interface est perturbée, on observe un contraste de déformation dans cette zone ([Xie *et al.*, 1998, Liu *et al.*, 1998], voir figure 1.25 a). Lorsqu'une contrainte extérieure est appliquée, les macles vont se réorganiser afin d'obtenir un système de macles cohérentes de part et d'autre de l'interface (figure 1.25 b).
Ce mouvement, antérieur au mouvement proprement dit de l'interface, permet de réduire l'énergie d'interface entre deux variantes et favorise ainsi le mécanisme de réorientation [Liu *et al.*, 1999]. La figure 1.26 précise l'évolution de la structure maclée de deux variantes autoaccommodées. Le stade 2 correspond à l'accommodation inélastique des macles dans la martensite. Lorsque les variantes sont totalement orientées, avant l'apparition de déformations plastiques, les variantes se démaclent (stades 4 et 5). Le stade 6 correspond à l'apparition de dislocations donc au régime plastique.
Le mécanisme d'accommodation des macles se produit à faible contrainte, dans le pre-

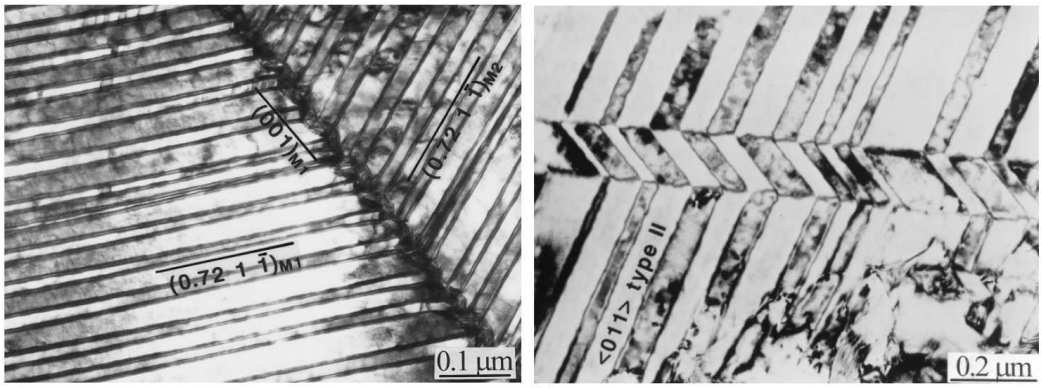

FIG. 1.25: *a) Etat autoaccommodé non déformé, d'après [Xie* et al.*, 1998], b) Etat déformé à 2% [Liu* et al.*, 1998]. Mise en évidence de la la formation d'interfaces cohérentes.*

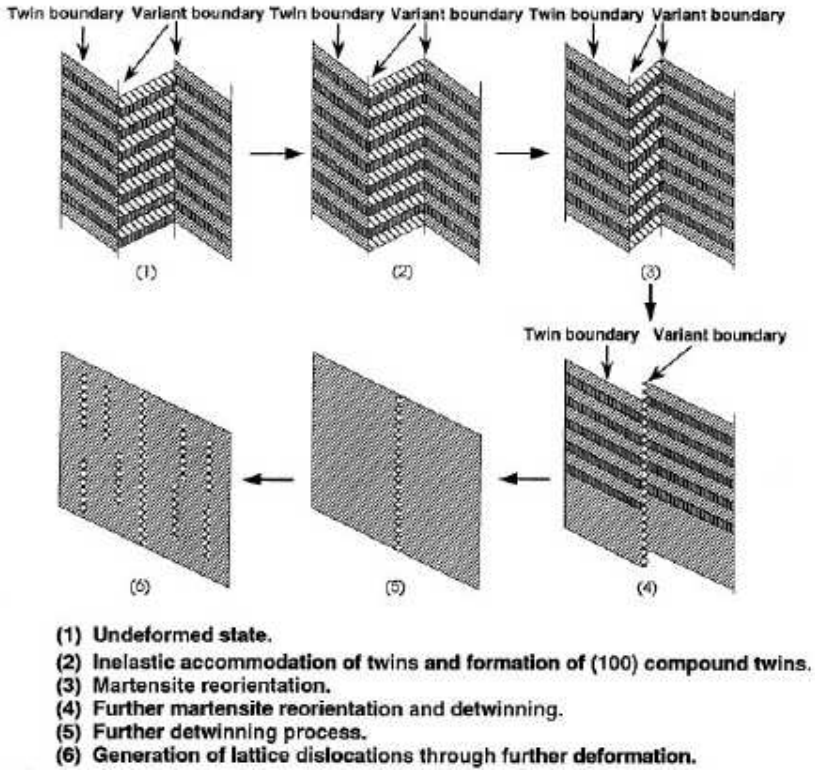

FIG. 1.26: *Évolution de l'organisation des macles dans deux variantes de martensite, d'après [Liu* et al.*, 1999]*

mier stade du comportement de la martensite. Si par exemple lors d'un refroidissement sous contrainte ou d'un chargement mécanique à partir de l'état austénitique, la martensite est apparue majoritairement orientée, ce mécanisme n'est alors pas visible même lors d'une sollicitation après décharge du matériau. Pour un NiTi superélastique, Tirry et Schryvers [Tirry et Schryvers, 2008] n'ont pas observé de macles dans les variantes de martensite orientées. La déformation liée à ce mécanisme d'accommodation est donc dépendant de l'orientation moyenne des variantes de martensite lors de sa formation.

1.4.4 Effet de la déformation à l'état martensitique sur les températures de transformation

Du point de vue cristallographique, la martensite autoaccommodée et celle orientée par la contrainte sont indiscernables. Il n'y a que la fraction volumique de chaque variante et la disposition de ces dernières (formation de groupes autoaccommodants ou non) qui change. Les températures de transformation doivent donc être sensiblement les mêmes à contrainte nulle. Or des essais menés par Liu et Favier [Liu et Favier, 2000] ainsi que par Popov et Lagoudas [Popov et Lagoudas, 2007], entre autres, ont montré que les températures de transformation inverses dépendent de la déformation macroscopique appliquée à froid (état martensitique). Les températures de retour austénitique sont plus élevées lorsque la martensite est orientée. Piao *et al.* [Piao *et al.*, 1993] attribuent cette différence à la relaxation de l'énergie élastique générée lors de la formation de variantes autoaccommodées. Lorsqu'un chargement mécanique est appliqué à l'état martensitique, si la structure initiale est autoaccommodée, l'orientation des variantes de martensite s'accompagne d'une relaxation des contraintes internes propres à la formation de cette structure. Ces contraintes internes permettraient d'assister la transformation martensite → austénite, ce qui explique le retour plus rapide de la martensite non déformée. Liu et Favier [Liu et Favier, 2000] pensent que cette relaxation n'est pas suffisante pour expliquer le décalage observé, et supposent l'existence d'un frottement interne lors de la transformation inverse en présence de martensite orientée.

1.4.5 Comportement mécanique des NiTi

L'une des particularités d'un NiTi par rapport à un AMF de type base cuivre, par exemple, est l'apparition de la phase R. On observe alors toute une variété de comportements en fonction de la température d'essai. La figure 1.27 présente quelques résultats d'essais de traction effectués sur deux Nickel-Titane de compositions différentes [Churchill *et al.*, 2009, Chang *et al.*, 2006], qui présentent tous deux une transformation de phase R. A partir de ces observations, nous pouvons dégager plusieurs types de comportements :

Réorientation de la martensite autoaccommodée Ce comportement est observé lors d'un chargement mécanique en dessous de la température M_f, et les mécanismes de déformation présents sont ceux décrits plus haut. Après une charge quasi-linéaire, qui combine élasticité et accommodation des macles, la réorientation se caractérise par la présence d'un plateau de déformation. Les variantes se réorientent dans la direction

de la contrainte appliquée. Pour le matériau b), ce comportement est observé pour les températures de −40 et −50°C. La déformation macroscopique n'est pas recouvrée à la décharge.

Réorientation de la phase R, transformation R → B19' Lorsque le matériau est à l'état de phase R, on peut observer un plateau de faible amplitude correspondant à la réorientation de cette phase. Un second plateau correspond à la transformation de la phase R → B19'. Ici non plus, il n'y a pas de transformation inverse, la déformation n'est pas recouvrée à la décharge. On observe ce comportement pour le matériau a) de −18 à 40°C, et pour le matériau b) de −20 à −10°C.

Transformations multiples A → R → B19' Le matériau, initialement austénitique, a un comportement linéaire durant le premier stade du chargement. Pourtant le module apparent est faible, ce qui indique la présence d'un mécanisme de déformation autre que l'élasticité. Une analyse de réflexion aux ultrasons menée par Sittner *et al.* [Sittner *et al.*, 2006] sur des échantillons de NiTi a confirmé qu'il s'agissait, à ce stade, d'une transformation A → R. Cette transformation, si elle est induite mécaniquement n'est jamais complète, les transformations R → B19' et B2 → B19' vont alors se produire simultanément à partir d'un seuil de contrainte. Les sites privilégiés qui se transforment en phase R sont les zones fortement contraintes, de par la présence de précipités ou d'une distorsion de réseau (joints de grain, zones fortement écrouies). Il n'y a pas de plateau de transformation, contrairement à celui observé lors de la transformation martensitique. On observe ces comportements pour le matériau a) à des températures d'essais de 50 à 70°C, et pour le matériau b) à des températures de 0 à 20°C. A ces températures la déformation de transformation est recouvrable, les transformations sont réversibles. Deux scénarios existent : la transformation inverse est unique (M → A), ou multiple (M → R → A).

Transformation A → M Lorsque la température d'essai est suffisamment haute, la transformation en phase R ne se produit plus (ou presque), on observe alors une phase de charge élastique. On peut voir ces comportements lorsque le matériau a) est sollicité à 80°C, et le matériau b) à 30 et 40°C.

Transformation A → M, déformation résiduelle Si on augmente encore la température, le plateau de transformation peut s'accompagner d'un mécanisme de déformation plastique, qui va induire une déformation résiduelle résultant d'une fraction de martensite stabilisée et d'une déformation plastique.

D'autres auteurs ont observé des comportements similaires sur des fils en NiTi [Chang *et al.*, 2006, Funakubo, 1987, Guenin, 1997]. A partir de ces essais, un pseudo-diagramme de phase peut être élaboré. Nous présentons celui proposé par Guénin ([Guenin, 1997], voir figure 1.28), réalisé à partir d'essais de refroidissement-chauffage à contrainte constante. Il montre une multitude de possibilités de comportements couplés, entre les mécanismes de réorientation et de transformation, multiple ou non. En particulier lors de chargements à basse contrainte, il y a formation de martensite pas ou peu orientée. Les

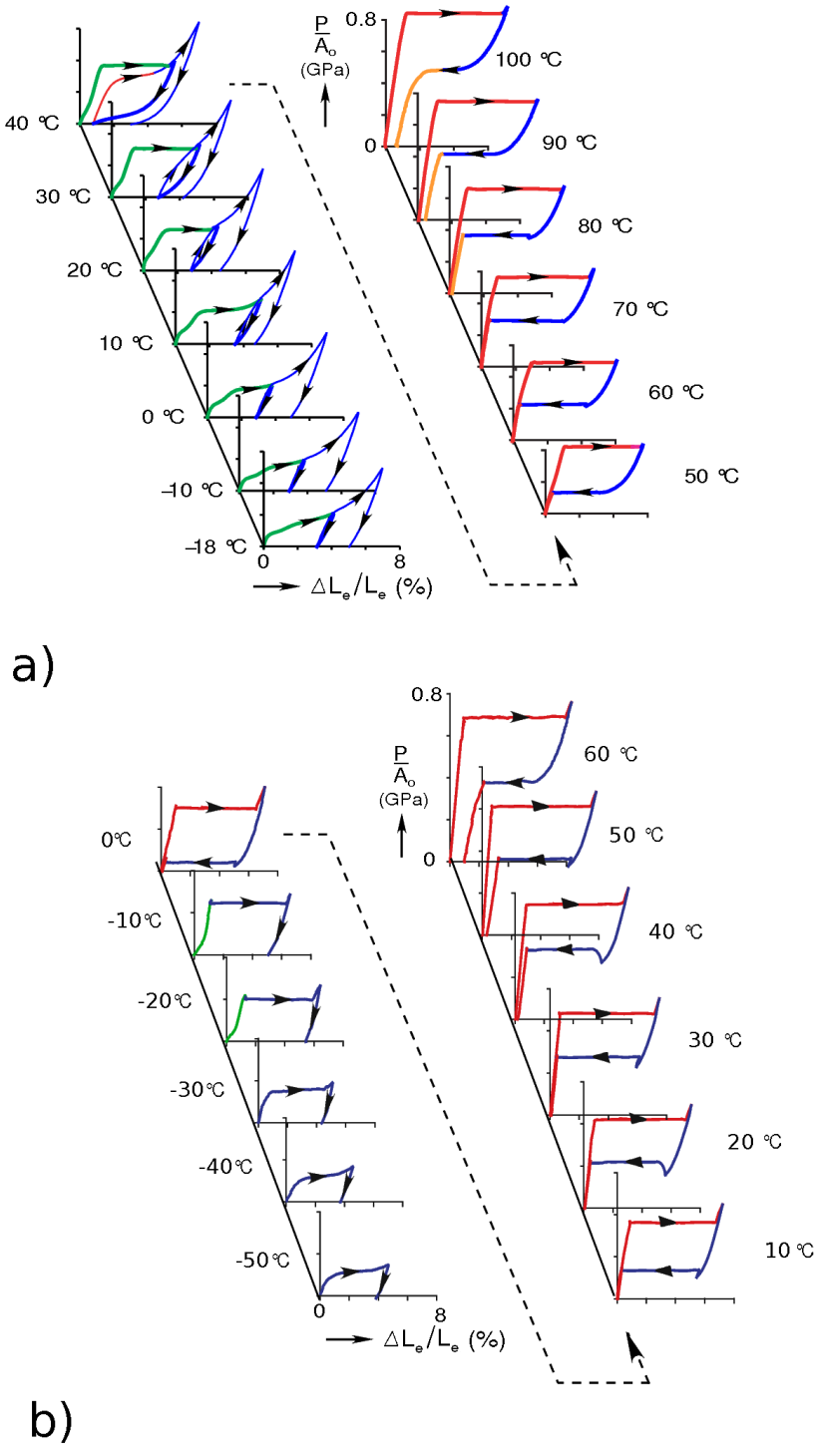

FIG. 1.27: *Comportements mécaniques isothermes pour plusieurs températures, pour deux alliages NiTi commerciaux, d'après [Churchill* et al.*, 2009, Chang* et al.*, 2006]*

différences de pentes observées à faible contrainte requièrent en particulier notre attention. Les mêmes types de comportements ont été observées par Wu *et al.* [Wu *et al.*, 2003].

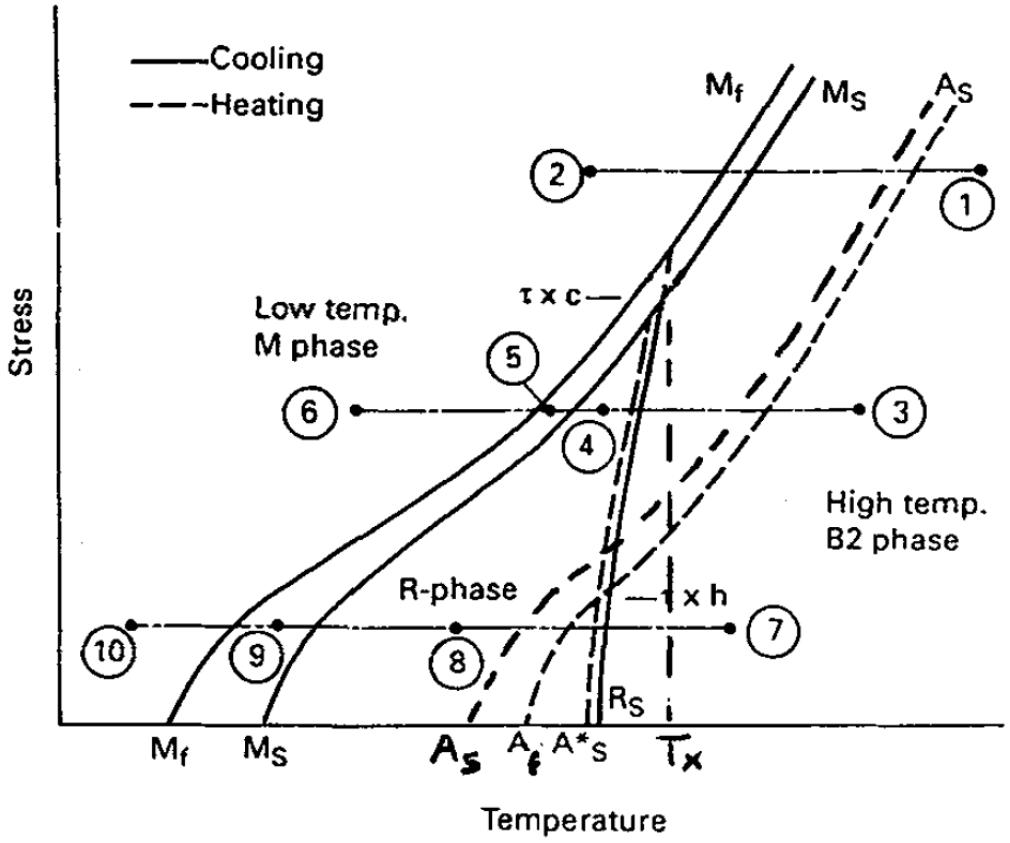

FIG. 1.28: *Pseudo-diagramme de phase [Guenin, 1997]*

Conclusion

Les différents comportements des alliages à mémoire de forme ont été présentés dans ce chapitre, en s'appuyant sur les mécanismes de la transformation martensitique et de la réorientation. Les comportements spécifiques des alliages NiTi ont été mis en évidence. Afin de simuler correctement des structures utilisant ce type d'alliage, il est nécessaire d'utiliser un modèle de comportement qui tienne compte non seulement des mécanismes de déformation communs à l'ensemble des AMF, mais aussi des comportements clés explicités dans ce chapitre (chargements partiels, comportement multiaxial et au voisinage des températures de transformation, stades de déformation de la martensite maclée). L'objectif du chapitre suivant est d'effectuer une revue bibliographique des modèles de comportement développés récemment, en cherchant à déterminer si ces comportements clés sont pris en compte, et le cas échéant de quelle façon.

2

Modélisation du comportement des AMF : Etat de l'art

Sommaire

2.1 Généralités sur la modélisation des AMF 43
2.1.1 Différentes approches 43
2.1.2 Cadre de la thermodynamique 43
2.1.3 Aspects cinématiques 44
2.1.4 Potentiel thermodynamique 45
2.1.5 Variables d'états et variables internes 46
2.2 Modèle de Panico et Brinson, 2007 47
2.2.1 Equations fondamentales du modèle 48
2.2.2 Commentaires sur le modèle de Panico-Brinson 50
2.3 Modèle de Popov et Lagoudas, 2007 53
2.3.1 Equations fondamentales du modèle 53
2.3.2 Commentaires sur le modèle de Popov-Lagoudas 55
2.4 Modèle de Thiebaud et Lexcellent, 2007 56
2.4.1 Equations fondamentales du modèle 56
2.4.2 Expressions de la contrainte équivalente et de la déformation de transformation équivalente 57
2.4.3 Lois d'évolution de la transformation 58
2.4.4 Commentaires sur le modèle de Thiebaud *et al.* 59
2.5 Modèle de Saint-Sulpice *et al.* 59
2.5.1 Equations fondamentales du modèle 60
2.5.2 Prise en compte des cycles partiels 61
2.5.3 Prise en compte de comportements liés au cyclage 61
2.5.4 Commentaires sur le modèle de Saint-Sulpice *et al.* 62
Conclusion 64

Au cours des trente dernières années, un nombre important de chercheurs se sont intéressés à la modélisation du comportement des alliages à mémoire de forme. Les objectifs sont à la fois d'apporter des outils numériques aux concepteurs de dispositifs innovants utilisant ces matériaux, mais aussi de mieux comprendre les mécanismes physiques mis en jeu. Les premiers modèles phénoménologiques sont apparus dans les années 80 : seul le comportement superélastique de ces alliages est alors pris en compte [Tanaka, 1986, Liang et Rogers, 1990], dans le cas unidimensionnel. Dans les années 90, des modèles basés sur un pseudo-diagramme de phase simplifié permettent de simuler des trajets thermomécaniques comme le refroidissement sous contrainte, l'effet mémoire ou encore la réorientation [Brinson, 1993, Raniecki et Lexcellent, 1994, Lexcellent et Leclercq, 1996, Brinson et Bekker, 1998]. Des extensions au cas tridimensionnel commencent à apparaître [Liang et Rogers, 1992, Boyd et Lagoudas, 1994, Boyd et Lagoudas, 1995, Bo et Lagoudas, 1999a]. Enfin, dans les années 2000, des modèles tridimensionnels implémentés dans des codes éléments finis voient le jour [Bouvet *et al.*, 2004, Lagoudas et Entchev, 2004, Panico et Brinson, 2007] [Popov et Lagoudas, 2007, Thiebaud *et al.*, 2007, Peultier *et al.*, 2006, Peultier *et al.*, 2008] [Zaki et Moumni, 2007, Saint Sulpice *et al.*, 2009]. Ces modèles possèdent des spécificités, avec des points forts et certains partis pris dans le choix des comportements à simuler ou des variables internes et paramètres matériaux.

Plusieurs de ces modèles sont capables de décrire des aspects spécifiques au comportement des AMF, comme la dissymétrie traction-compression [Gillet *et al.*, 1998, Raniecki et Lexcellent, 1998, Qidwai et Lagoudas, 2000]. D'autres se sont focalisés sur les boucles internes [Tanaka *et al.*, 1995, Gillet *et al.*, 1998, Bo et Lagoudas, 1999b, Bouvet *et al.*, 2004, Peultier *et al.*, 2006, Peultier *et al.*, 2008] ou les effets liés au cyclage [Tanaka *et al.*, 1995, Lagoudas et Entchev, 2004, Panico et Brinson, 2008, Saint Sulpice *et al.*, 2009]. Le couplage entre transformation de phase et plasticité est aussi pris en compte dans certains modèles [Lagoudas et Bo, 1999, Lagoudas et Entchev, 2004].

Les modèles micromécaniques des AMF sont apparus dans les années 1990 [Patoor *et al.*, 1995, Patoor *et al.*, 1996, Huang et Brinson, 1998, Lu et Weng, 1998, Gao *et al.*, 2000, Huang *et al.*, 2000, Siredey *et al.*, 1999]. Ces modèles, qui possèdent un fort aspect prédictif, ont permis de déterminer les contraintes de début de transformation pour des cas de chargements multiaxiaux, et de déterminer les surfaces de charges de plusieurs types d'AMF [Taillard *et al.*, 2008]. L'origine de la dissymétrie de comportement en traction-compression a été déterminée grâce à ces modèles [Patoor *et al.*, 1995]. Les résultats des modèles micromécaniques permettent d'alimenter et de valider les modèles macroscopiques quand les données expérimentales font défaut.

Le grand nombre de modèles de comportement des AMF rend difficile d'effectuer une revue complète des différentes stratégies utilisées. Pour plus de détails sur l'historique des modèles du comportement des AMF à l'échelle du monocristal jusqu'à l'échelle de la structure, le lecteur pourra se référer à une revue assez complète effectuée par Patoor, Lagoudas *et al.* [Patoor *et al.*, 2006, Lagoudas *et al.*, 2006]. Dans ce chapitre, quatre modèles publiés récemment seront analysés, afin de montrer l'état de l'art en matière de modélisation macroscopique. Ces modèles ont été sélectionnés pour la pertinence de leur modélisation, l'étendue de leurs applications (qui suppose une implémentation robuste dans un code éléments finis), et le rapport entre les paramètres matériaux utilisés et des grandeurs physiques mesurables. Afin d'appréhender les différentes stratégies de modélisations utilisées, nous rappelons ici quelques points indispensables à la définition d'un modèle de comportement macroscopique des AMF.

2.1 Généralités sur la modélisation des AMF

2.1.1 Différentes approches

La modélisation des matériaux cristallins, et particulièrement des AMF peut être effectuée suivant deux approches différentes :

- L'approche de type micromécanique, avec transition d'échelle, où l'on considère une variable locale scalaire caractéristique, comme la fraction volumique d'une variante de martensite à l'intérieur d'un grain. D'une façon analogue à la plasticité, on détermine l'apparition de ces variantes en utilisant le concept de cission résolue à l'intérieur d'un grain. Une méthode de transition d'échelle de type autocohérent est alors utilisée pour déterminer le comportement macroscopique du matériau polycristallin.
- L'approche de type macroscopique phénoménologique, où l'on considère une relation directe entre les variables internes et la déformation macroscopique de transformation. Ces variables internes sont une moyenne du champ des variables caractéristiques de l'évolution de la microstructure du matériau (fraction volumique des variantes, déformation de transformation locale). C'est l'approche adoptée lorsque les modèles sont destinés au calcul de structures, le faible nombre de variables internes impliquant un temps de calcul sensiblement moins élevé.

2.1.2 Cadre de la thermodynamique

Décrire le comportement des matériaux à l'aide de la thermodynamique des processus irréversibles a été l'une des avancées majeures dans le domaine de la mécanique des matériaux de ces dernières décennies. La pertinence de cette approche a permis d'établir des modèles généraux de la déformation plastique, mais aussi de décrire le comportement des élastomères ou celui des matériaux à couplages multiphysiques. Cette manière de procéder a l'avantage de s'inscrire dans un cadre rigoureux, et impose de donner un sens physique aux variables utilisées pour décrire l'évolution du matériau. Dans le domaine des matériaux à transformation de phase, et plus particulièrement celui des alliages à mémoire de forme, la plupart des lois de

comportement sont basées sur la thermodynamique des processus irréversibles. La méthode de l'état local suppose que l'état thermodynamique d'un milieu matériel en un point et à un instant donné est complètement défini par la connaissance des valeurs à cet instant d'un certain nombre de variables ne dépendant que du point considéré [Lemaitre et Chaboche, 2004]. L'avantage, dans l'optique de développer des modèles de comportement des matériaux à couplages multiphysiques est de regrouper des termes énergétiques provenant de différentes sources (mécanique, chimique...) en une seule expression : le potentiel thermodynamique. Le type de potentiel choisi dépend des variables de contrôle utilisées pour connaître l'état thermodynamique du système. Afin d'obtenir un pilotage en contrainte et en température (variables de pilotage utilisées dans la plupart des codes éléments finis), il faut définir l'énergie libre de Gibbs du système. Lors de la définition d'un modèle macroscopique, nous étudions le comportement d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER), qui doit contenir un nombre suffisant de grains pour s'affranchir des effets de texture ou de taille spécifiques à des domaines contenant peu de grains. Mais ce volume doit aussi être petit devant l'échelle de la structure. Cela permet d'obtenir une loi de comportement à l'échelle macroscopique, qui ne prend pas en compte les effets de structure, ces derniers étant simulés par un code de calcul de structures (utilisant la méthode des éléments finis, par exemple). Les AMF de type Nickel-Titane ont souvent une taille de grains de l'ordre de quelques micromètres, et les structures les plus petites que l'on considère sont de l'ordre du millimètre. Le VER utilisé se situe alors entre ces deux échelles. La définition du potentiel thermodynamique peut s'effectuer à une échelle plus petite, par exemple dans le cas ou l'on utilise les outils de la micromécanique. Dans ce cas, on écrit le potentiel à l'échelle du grain. La définition d'une loi de comportement nécessite la description de la cinématique du matériau. Il faut séparer les différents mécanismes de déformation qui vont intervenir lors de la sollicitation du matériau. L'expression du potentiel thermodynamique et des lois d'évolution qui en découlent serviront alors à définir le comportement du matériau.

2.1.3 Aspects cinématiques

Dans les alliages à mémoire de forme, différents mécanismes de déformation sont à l'origine de la déformation macroscopique observée. Nous pouvons les classer de la façon suivante :

La déformation élastique ε^e

La déformation thermique ε^α due à la dilatation thermique du matériau.

La déformation de transformation ε^T .

Il s'agit de la déformation résultant de la transformation de phase martensitique qui se produit dans ce type d'alliage. A l'échelle de la maille, une déformation principalement déviatorique est générée par la transformation d'une maille cubique en une maille de symétrie plus faible. A l'échelle macroscopique, cette déformation correspond à l'orientation moyenne du volume de martensite contenu dans l'échantillon. Cette orientation moyenne peut correspondre à plusieurs histoires thermomécaniques : la transformation de phase induite par la contrainte (apparition de variantes de mar-

tensite bien orientées), et le processus de réorientation à l'état martensitique. Plusieurs auteurs séparent les contributions de ces deux mécanismes de déformation ([Panico et Brinson, 2007, Popov et Lagoudas, 2007], par exemple)

2.1.4 Potentiel thermodynamique

L'écriture du potentiel thermodynamique nécessite quelques hypothèses : dans un premier temps on considère que le processus est quasi-statique, de sorte que le mécanisme de transformation s'opère en une suite d'états d'équilibre. D'une façon similaire à Leclercq et Lexcellent [Lexcellent et Leclercq, 1996] nous pouvons alors écrire l'énergie libre de Gibbs de la phase austénitique sous la forme :

$$G^A = U^A - TS^A - \Sigma_{ij}E_{ij} + C_v\left[(T-T_0) - T\log\frac{T}{T_0}\right] \tag{2.1}$$

U^A représente l'énergie interne de l'austénite et S^A son entropie. T_0 représente la température d'équilibre et C_v la chaleur spécifique, supposée identique pour les deux phases.
A l'état initial, on considère qu'aucun chargement extérieur n'est appliqué. L'énergie élastique macroscopique est nulle : $\Sigma_{ij}E_{ij} = 0$
On considère maintenant que des variantes de martensite apparaissent à l'intérieur des grains d'austénite. A l'état biphasé, nous pouvons alors écrire la contribution du volume d'austénite, en considérant V_M le volume de martensite inclus dans le volume V :

$$G^A = \left(1 - \frac{V_M}{V}\right)\left(U^A - TS^A + C_v\left[(T-T_0) - T\log\frac{T}{T_0}\right]\right) \tag{2.2}$$

De la même façon on obtient la contribution du volume de martensite :

$$G^M = \frac{V_M}{V}\left(U^M - TS^M + C_v\left[(T-T_0) - T\log\frac{T}{T_0}\right]\right) \tag{2.3}$$

La contribution du chargement extérieur est :

$$G^{ext} = -\Sigma_{ij}E_{ij} \tag{2.4}$$

Une transformation de phase de type martensitique s'accompagne d'une modification de la maille élémentaire. Une déformation importante s'ensuit de manière locale, au niveau d'une variante de martensite. Cette déformation locale va induire une énergie d'interaction G^{int}, liée aux incompatibilités géométriques et aux incompatibilités entre variantes. Nous obtenons l'énergie libre de Gibbs du système biphasé :

$$\begin{aligned} G^{biphasé} = &\left(1 - \frac{V_M}{V}\right)\left(U^A - TS^A\right) + \frac{V_M}{V}\left(U^M - TS^M\right) - \Sigma_{ij}E_{ij} \\ &+ G^{int} + C_v\left[(T-T_0) - T\log\frac{T}{T_0}\right] \end{aligned} \tag{2.5}$$

La variation de l'énergie libre de Gibbs à partir d'un état initial, en fonction d'un chargement thermomécanique, peut être décrite comme suit :

$$\begin{aligned}\Delta G =& G^{biphasé} - G^{init} \\ =& -\Delta T S^A + f\left(\Delta U - T\Delta S\right) - \Sigma_{ij} E_{ij} + G^{int}\end{aligned} \tag{2.6}$$

L'inégalité dite de Clausius-Duhem, qui contient le premier et le second principe, est exprimée en fonction du potentiel choisi :

$$-\dot{G} - S\cdot\dot{T} - \dot{\Sigma} : E - \vec{q}\cdot\frac{\vec{gradT}}{T} \geqslant 0 \tag{2.7}$$

Il faut également tenir compte des contraintes physiques liées à la définition du volume de martensite V_M :

$$V_M \geqslant 0 \quad \text{et} \quad V_M \leqslant V \tag{2.8}$$

Le potentiel thermodynamique défini dans cette section ne peut être utilisé sous cette forme pour définir une loi de comportement. Il est nécessaire d'exprimer tous les termes du potentiel en fonction des variables de contrôle, de paramètres matériaux et de variables internes.

2.1.5 Variables d'états et variables internes

L'état thermodynamique d'un milieu matériel en un point à un instant donné doit être complètement défini par la connaissance des valeurs à cet instant d'un certain nombre de variables ne dépendant que du point considéré. Les variables de contrôle sont, de par la définition de l'énergie libre de Gibbs, la température T et la contrainte Σ. La dérivée temporelle de l'énergie libre spécifique s'exprime donc (en considérant V_k la k-ième variable interne)

$$\dot{G} = \frac{\partial G}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} + \frac{\partial G}{\partial T}\cdot\dot{T} + \frac{\partial G}{\partial V_k}\cdot\dot{V}_k \tag{2.9}$$

Les variations d'énergie libre ΔU et d'entropie ΔS sont définies comme suit :

$$\begin{aligned}\Delta U &= U^M - U^A \\ \Delta S &= S^M - S^A\end{aligned} \tag{2.10}$$

L'inégalité de Clausius-Duhem s'écrit alors :

$$-\frac{\partial G}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} - \frac{\partial G}{\partial T}\cdot\dot{T} - \frac{\partial G}{\partial V_k}\cdot\dot{V}_k - S\cdot\dot{T} - \dot{\Sigma} : E - \vec{q}\cdot\frac{\overrightarrow{grad T}}{T} \geqslant 0 \tag{2.11}$$

Le choix des variables internes influe directement sur l'écriture de l'énergie libre. Ces variables doivent représenter l'état actuel du matériau (évolution de la microstructure, organisation de défauts ...). Dans le cas des transformations de phase solide-solide, il est nécessaire de choisir des variables internes qui seront représentatives de l'avancée de la transformation, mais aussi de l'état de la phase mère et de la phase produit. Ces variables sont aussi caractéristiques des mécanismes de déformation. Les différents modèles de la littérature se distinguent par

rapport au choix des variables internes, l'objectif étant de relier ces variables représentatives de la structure du matériau aux variables observables (déformation macroscopique). On peut donc séparer les modèles de la littérature en fonction des variables internes utilisées :

1. **Les modèles de type Tanaka**. La seule variable interne considérée est la fraction volumique de martensite f. La déformation de transformation est alors proportionelle à cette fraction volumique de martensite.
2. **Les modèles de type Brinson**. Ces modèles différencient la fraction volumique de martensite en deux fractions propres : la martensite thermique f^T (de structure autoaccommodée) et la martensite orientée par la contrainte f^σ. La déformation de transformation macroscopique est alors proportionelle à la fraction volumique de martensite orientée.
3. **Le modèle de type Popov-Lagoudas**. De la même façon que dans le modèle de Brinson, les fractions volumiques de martensite thermique et de martensite orientée sont considérées. Cette fois les variables internes utilisées sont non pas ces fractions volumiques, mais l'évolution de ces fractions ξ^i. Les trois types d'évolutions possibles sont considérés : Austénite $\leftrightarrow$ martensite thermique (ξ^1), austénite $\leftrightarrow$ martensite orientée (ξ^2), martensite thermique $\rightarrow$ martensite orientée (ξ^3). La déformation de transformation macroscopique est alors une fonction des évolutions de fractions volumiques ξ^2 et ξ^3.
4. **Les modèles de type Peultier**. Sont considérées ici la fraction volumique de martensite f, et l'orientation de cette martensite en utilisant la déformation moyenne de transformation $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$. Cette déformation de transformation est la moyenne de la déformation de transformation locale sur le volume de martensite.

Nous allons détailler les stratégies de modélisation développées pour plusieurs modèles, qui utilisent des jeux de variables internes différents. Le dernier modèle présenté dans ce chapitre (modèle de Saint-Sulpice *et al.* [Saint Sulpice *et al.*, 2009]) utilise un formalisme différent, basé sur l'évolution des surfaces de transformations (directes et inverses) au cours du chargement.

2.2 Modèle de Panico et Brinson, 2007

Depuis 1993, Brinson et ses collaborateurs développent des modèles macroscopiques et micromécaniques pour les AMF. Le modèle présenté ici est issu du travail de Panico et Brinson [Panico et Brinson, 2007], qui est le dernier modèle en date développé par cette équipe. Il prend en compte les trajets de chargement non proportionnels multiaxiaux, ainsi que le comportement de réorientation et de transformation de phase.

2.2.1 Equations fondamentales du modèle

Trois états cristallographiques sont considérés dans ce modèle : l'austénite (A), la martensite autoaccommodée (M^T), et la martensite orientée (M^σ). Les variables internes de ce modèle sont alors la fraction volumique de martensite autoaccommodée f^T et la fraction volumique de martensite orientée f^σ.

Les hypothèses fondamentales de ce modèle sont les suivantes :
- le formalisme des petites déformations est utilisé
- les modules élastiques sont supposés identiques pour l'austénite et la martensite
- la déformation de transformation est supposée déviatorique
- les effets de la dilatation thermique sont négligés
- Une décomposition additive de la déformation macroscopique en une partie élastique ε^e_{ij} et une partie inélastique ε^{in}_{ij} est considérée :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon^e_{ij} + \varepsilon^{in}_{ij} \tag{2.12}$$

L'incrément de déformation inélastique est la somme des contributions des deux mécanismes de déformations considérés dans ce modèle : la déformation de transformation ε^{tr} et la déformation de réorientation ε^{re} :

$$\dot{\varepsilon}^{in}_{ij} = \dot{\varepsilon}^{tr}_{ij} + \dot{\varepsilon}^{re}_{ij} \tag{2.13}$$

La fraction volumique de martensite orientée est définie de la manière suivante (similaire à Andra *et al.* [Andra *et al.*, 2001]), en considérant la déformation maximale de transformation uniaxiale γ :

$$f_\sigma = \frac{\|\varepsilon^{in}\|}{\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma} \tag{2.14}$$

La dérivée temporelle de cette fraction volumique s'écrit alors, en supposant que seule la variation de déformation liée à la transformation contribue à l'évolution de la fraction volumique orientée :

$$\dot{f_\sigma} = \frac{\varepsilon^{in} : \dot{\varepsilon}^{tr}}{\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma\|\varepsilon^{in}\|} \tag{2.15}$$

Le potentiel thermodynamique d'Helmoltz (variables de contrôle E et T) est utilisé. L'expression est identique à celle proposée par Leclerq et Lexcellent [Lexcellent et Leclercq, 1996] pour définir le potentiel thermodynamique de ce système à trois phases :

$$\begin{aligned}\Psi\left(\varepsilon^e, T, f^\sigma, f^T\right) = \frac{1}{2}E^e : L : E^e + U^A - TS^A - f^T(\Delta U - T\Delta S) \\ - f^\sigma\left\langle \Delta U - T\Delta S\right\rangle + C_v\left[(T - T_0 - Tln\left(\frac{T}{T_0}\right)\right] + \Delta\psi\end{aligned} \tag{2.16}$$

Remarque : la notation $\langle\rangle$ correspond à celle de Mac Cauley, x étant un scalaire :

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2}(x + |x|) \tag{2.17}$$

Les variations d'énergie libre ΔU et ΔS sont définies comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta U &= U^A - U^M \\ \Delta S &= S^A - S^M \end{aligned} \tag{2.18}$$

La fonction $\Delta\psi$ correspond à l'énergie d'interaction. Dans ce modèle, cette énergie est supposée prendre la forme quadratique suivante :

$$\Delta\psi = \frac{1}{2} H_\sigma f_\sigma^2 \tag{2.19}$$

L'utilisation de l'inégalité de Clausius-Duhem conduit à :

$$D = \Sigma : \dot{E} - \dot{\Psi} - S\dot{T} - \vec{q} \cdot \frac{\overrightarrow{grad T}}{T} \geqslant 0 \tag{2.20}$$

Les forces thermodynamiques sont définies de la façon suivante, en utilisant la relation 2.15 entre $\dot{f}^\sigma$ et $\dot{\varepsilon}^{tr}$:

$$D = X_{tr} : \dot{\varepsilon}^{tr} + X_{re} : \dot{\varepsilon}^{re} + X_T : \dot{f}^T \geqslant 0 \tag{2.21}$$

Avec les expressions des forces thermodynamiques suivantes :

$$\begin{aligned} X_{tr} &= s - \rho\left[\langle T\Delta S - \Delta U\rangle + H_\sigma f^\sigma\right] \frac{\varepsilon_{in}}{\sqrt{\frac{3}{2}}\gamma \|\varepsilon^{in}\|} \\ X_{re} &= s \\ X_T &= -\rho\left(T\Delta S - \Delta U\right) \end{aligned} \tag{2.22}$$

Les lois d'évolution découlent directement des forces thermodynamiques. Des multiplicateurs $\dot{\lambda}_i$ analogues aux multiplicateurs plastiques pour les lois de plasticité associées sont introduits pour définir les vitesses de déformations de transformation et d'orientations. Des fonctions limites prennent en compte les limitations physiques de ce modèle, à savoir :

$$f^\sigma \geqslant 0 \quad , f^T \geqslant 0 \quad , f^\sigma + f^T \leqslant 1 \tag{2.23}$$

Toutes ces conditions conduisent au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \sigma = L\left(\varepsilon - \varepsilon^{in}\right) \\ f^{\sigma} = \dfrac{1}{\sqrt{\frac{3}{2}\gamma}} \|\varepsilon^{in}\| \\ F_{tr} = \|X_{tr}\| - Y_{tr}(f^{\sigma}) \leqslant 0 \\ \Delta\lambda_{tr} \geqslant 0, \Delta\lambda_{tr} F_{tr}(X_{tr}) = 0 \\ F_{re} = \dfrac{1}{2} X_{re} : \hat{\mathrm{I}} : X_{re} - Y_{re} \leqslant 0 \\ \Delta\lambda_{re} \geqslant 0, \Delta\lambda_{re} F_{re}(X_{re}) = 0 \end{cases} \tag{2.24}$$

Lorsque la fraction volumique de martensite orientée f^{σ} est déterminée, la condition exprimée en (2.23) permet de déterminer la fraction volumique de martensite thermique f^{T}.
Un exemple de chargement non proportionnel "carré" dans l'espace des contraintes axiales - contraintes de cisaillement est présenté figure 2.1, à une température supérieure à A_f. Cet essai met en valeur le couplage des déformations axiale et de cisaillement lors de ce type de chargement. La figure 2.1.d montre la différence de réponse obtenue pour des comportements de type élastique, élastoplastique et la loi de comportement développée. La réponse en déformation élastique reproduit le trajet imposé en contrainte, tandis que la loi élastoplastique laisse apparaître une déformation résiduelle conséquente. Le comportement simulé de l'AMF diffère et ne présente pas de déformation résiduelle à la fin du chargement, ce qui est attendu puisque la température de l'essai est supérieure à A_f.

2.2.2 Commentaires sur le modèle de Panico-Brinson

Ce modèle est basé sur l'idée originale de séparer la martensite en deux types : d'une part la martensite thermique, de structure autoaccommodée qui ne provoque pas de déformation macroscopique ; d'autre part la martensite orientée, induite sous contrainte qui fait apparaître une déformation macroscopique. Les lois d'évolution de ce modèle permettent de modifier la fraction volumique de ces deux types de martensite. Les effets superélastiques et de mémoire double sens assisté sont modélisés par l'évolution de la fraction volumique de martensite orientée. L'évolution de la martensite thermique en martensite orientée permet de prendre en compte le phénomène de réorientation. La transformation de la martensite orientée en austénite se produit au cours de la décharge superélastique ou par chauffage (effet mémoire de forme). Ce modèle est implémenté de façon robuste dans le code éléments finis `ABAQUS`. Il permet d'effectuer des calculs de structures, et d'étudier le comportement des mousses en Nickel-Titane ([Panico et Brinson, 2008], voir figure 2.2). Les aspects de chargements non-proportionnels et multiaxiaux sont présents dans ce modèle, offrant la possibilité de simuler le comportement de structures soumises à des sollicitations complexes. Plusieurs points clés de la modélisation des AMF ne sont pourtant pas présents, comme la gestion de la dissymétrie traction-compression et la gestion des boucles internes. Les effets liés à la formation croissante d'un volume de martensite stabilisé lors d'un cyclage sont considérés dans une extension du modèle proposé en 2008 [Panico et Brinson, 2008].

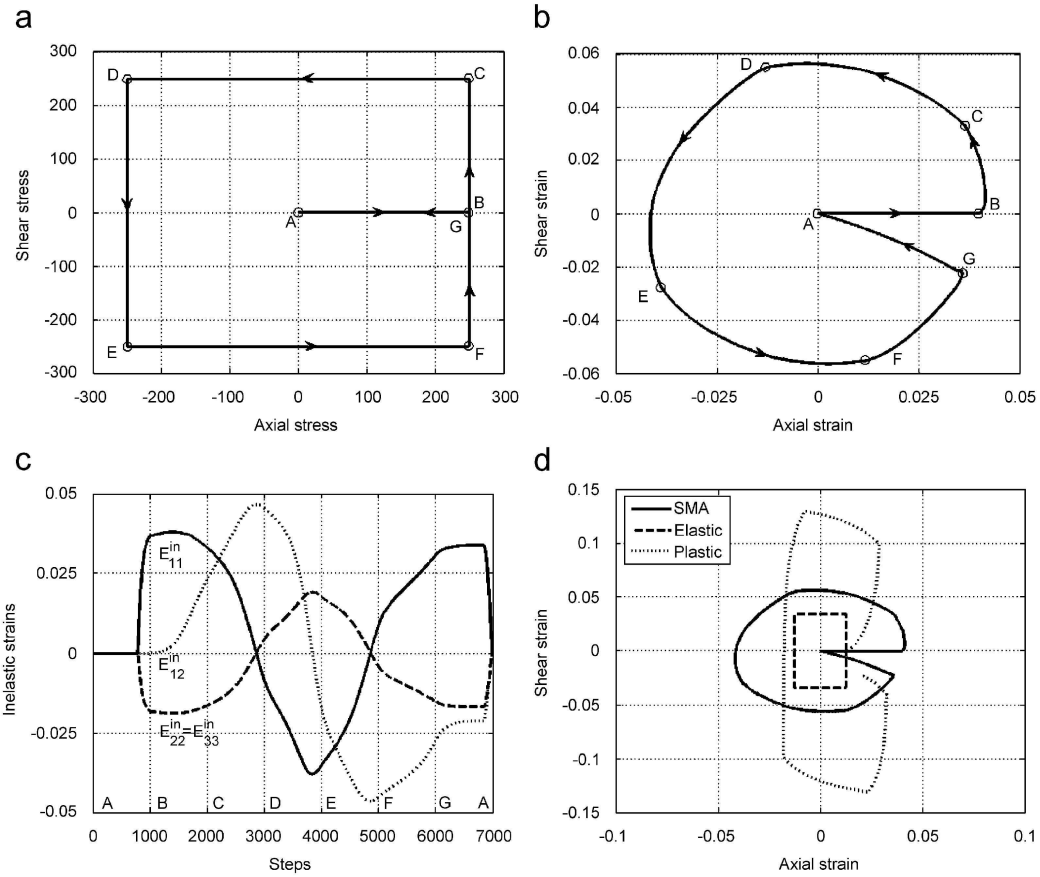

FIG. 2.1: *a) Exemple de chargement proportionnel "carré" dans l'espace des contraintes axiales et de cisaillement b) évolution des déformations axiale et de cisaillement. c) Evolution dans le temps de la partition des déformations. d) Comparaison avec des lois élastiques et élastoplastiques (d'après [Panico et Brinson, 2007]).*

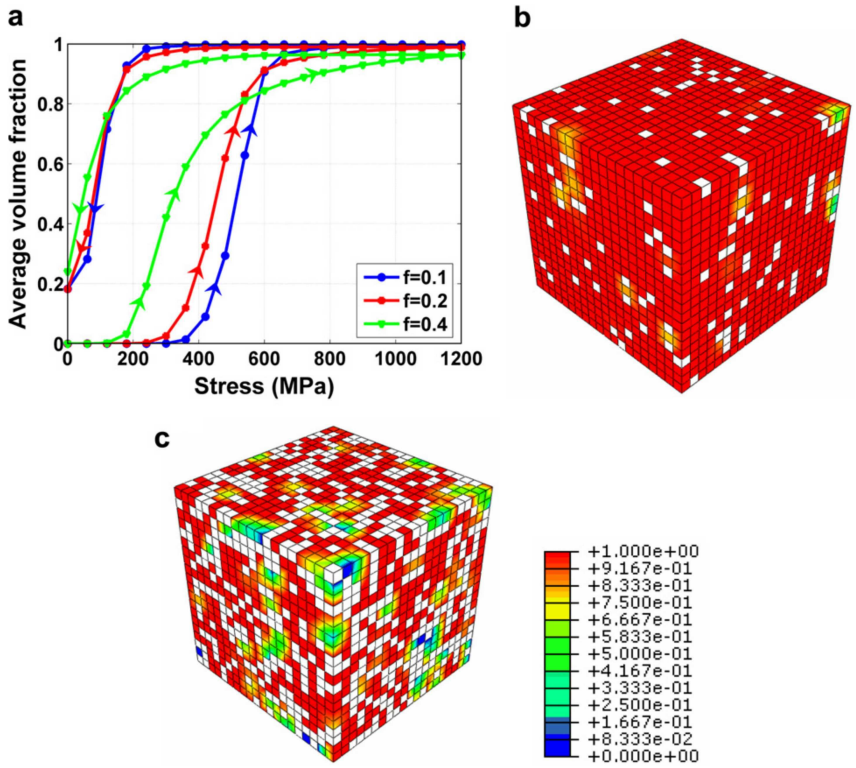

FIG. 2.2: *a) Evolution de la fraction volumique moyenne de martensite orientée pour plusieurs configurations b) Répartition de cette fraction volumique pour un chargement de 1200 MPa et pour une porosité de 0,1 c) pour une porosité de 0,4 pour un NiTi poreux [Panico et Brinson, 2008]*

2.3 Modèle de Popov et Lagoudas, 2007

L'équipe centrée autour de D.C. Lagoudas, à Texas A&M University, USA, possède une longue expérience de la modélisation des alliages à mémoire de forme. Leur modèle est basé sur un diagramme de phase plus complexe que celui communément admis proposé par Brinson [Brinson, 1993].

2.3.1 Equations fondamentales du modèle

De la même façon que les modèles de type Brinson, le VER est décomposé en trois phases : la martensite autoaccommodée (M^T), la martensite orientée (M^σ) et l'austénite (A). Les concentrations de ces trois phases sont notées respectivement $f^T, f^\sigma et f^A$. L'originalité du modèle repose sur le fait que l'on s'intéresse à la façon dont cet état triphasé est obtenu. Sont ainsi notées ξ_1 la fraction de martensite thermique produite à partir de l'austénite, ξ_2 la fraction de martensite orientée produite à partir d'austénite, et ξ_3 la fraction de martensite orientée formée à partir de la martensite thermique. On obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} f^T &= f_0^T + \xi_1 - \xi_3 \quad A \rightarrow M^T \\ f^\sigma &= f_0^\sigma + \xi_2 + \xi_3 \quad A \rightarrow M^\sigma \\ f^A &= f_0^A - \xi_1 + \xi_2 \quad M^T \rightarrow M^\sigma \end{aligned} \tag{2.25}$$

f_0^i correspond à la fraction volumique initiale de la phase considérée. Les variables ξ_i sont alors utilisées comme variables internes. Ce choix est motivé par les observations suivantes :

1. Si les variations de f^i sont connues, il est impossible de relier, lorsque les processus de transformation et d'orientation sont activés simultanément, les mécanismes de déformation aux évolutions des fractions volumiques.
2. L'histoire du matériau est déterminée plus précisément à partir de l'évolution des variations de fractions volumiques ξ_i, ce qui est important dans le cas de chargements cycliques.

Ce modèle repose sur les hypothèses suivantes :
– le formalisme des petites déformations est utilisé
– la déformation de transformation est supposée déviatorique
– les modules mécaniques de l'austénite et de la martensite sont supposés différents, bien qu'une décomposition additive des déformations macroscopiques élastiques et inélastiques soit considérée :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{in} \tag{2.26}$$

Deux lois d'écoulement sont déterminées pour prendre en compte les mécanismes de transformation et d'orientation :

$$\dot{\varepsilon}^{tr} = \Lambda^{tr} \dot{\xi}_2 \tag{2.27}$$

$$\dot{\varepsilon^{re}} = \Lambda^{re}\dot{\xi_3} \tag{2.28}$$

L'énergie libre de Gibbs s'écrit en fonction des f^i :

$$\begin{aligned} G = &-\frac{1}{2}\sigma : S\left(f^T, f^\sigma\right) : \sigma - \sigma\left(\alpha(f^T, f^\sigma)(T - T_0) + \varepsilon^{in}\right) \\ &+ C_v\left(f^T, f^\sigma\right)\left((T - T_0) - T\ln\left(\frac{T}{T_0}\right)\right) - S_0^f\left(f^T, f^\sigma\right)T + U_0\left(f^T, f^\sigma\right) + G^{mix} \end{aligned} \tag{2.29}$$

Les coefficients fonctions de (f^T, f^σ) sont définis pour un état biphasé en appliquant une loi des mélanges. Le terme d'interaction G^{mix} s'exprime de la manière suivante (ξ représente la fraction volumique de martensite) :

$$\begin{aligned} &G^{mix}\left(\xi, \text{sgn}(\left(\dot{\xi_1}\right), \text{sgn}\left(\dot{\xi_2}\right)\right) = \\ &\int_0^t \left(f_1\left(\xi, \text{sgn}\left(\dot{\xi_1}\right)\right)\cdot\dot{\xi_1}(\tau) + f_2\left(\xi, \text{sgn}\left(\dot{\xi_2}\right)\right)\cdot\dot{\xi_2}(\tau) + f_3(\xi)\cdot\dot{\xi_3}(\tau)\right)\mathrm{d}\tau \end{aligned} \tag{2.30}$$

La thermodynamique des processus irréversibles donne l'expression suivante des forces thermodynamiques π_i associées aux variables internes ξ_i :

$$\begin{aligned} \pi_1 &= -\tfrac{\partial G}{\partial \xi_1} = \tilde{\pi}(\sigma, T) - f_1(\xi, \text{sgn}(\dot{\xi_1})) && \text{pour tout} \quad \dot{\xi_1} \neq 0 \\ \pi_2 &= -\tfrac{\partial G}{\partial \xi_2} = \sigma : \Lambda^t - f_2(\xi, \text{sgn}(\dot{\xi_2})) && \text{pour tout} \quad \dot{\xi_2} \neq 0 \\ \pi_3 &= -\tfrac{\partial G}{\partial \xi_3} = \sigma : \Lambda^d - f_3(\xi) && \text{pour tout} \quad \dot{\xi_3} \geqslant 0 \end{aligned} \tag{2.31}$$

en considérant :

$$\tilde{\pi}(\sigma, T) = \frac{1}{2}\sigma : \Delta S : \sigma + \Delta\alpha : \sigma(T - T_0) - \Delta C_v\left((T - T_0) - T\ln\left(\frac{T}{T_0}\right)\right) + \Delta S\cdot T - \Delta U_0 \tag{2.32}$$

Les fonctions f_i sont des fonctions de pseudo-écrouissage. f_1 correspond à la transformation $A \leftrightarrow M^t$, f_2 à la transformation $A \leftrightarrow M^d$ et f_3 a l'orientation $M^t \rightarrow M^d$.
A partir de l'expression des forces thermodynamiques, cinq surfaces de charges sont définies, une pour chaque type de transformation considéré :

$$\Phi_1^+(\sigma, T, \xi) = \pi_1 - Y_1^+ \qquad A \rightarrow M^T \tag{2.33}$$

$$\Phi_1^-(\sigma, T, \xi) = -\pi_1 - Y_1^- \qquad M^T \rightarrow A \tag{2.34}$$

$$\Phi_2^+(\sigma, T, \xi) = \pi_2 - Y_2^+ \qquad A \rightarrow M^\sigma \tag{2.35}$$

$$\Phi_2^-(\sigma, T, \xi) = -\pi_2 - Y_2^- \qquad M^\sigma \rightarrow A \tag{2.36}$$

$$\Phi_3^(\sigma, T, \xi) = \pi_3 - Y_3 \qquad M^T \rightarrow M^\sigma \tag{2.37}$$

Les fonctions $Y_i^\pm$ sont caractéristiques d'une dissipation intrinsèque et sont considérées indépendantes des variables de contrôle et des variables internes.

Pour que l'expression de ce modèle soit complète, il faut définir une loi d'écoulement pour chaque mécanisme de déformation. Le tenseur d'écoulement de l'orientation s'exprime par :

$$\Lambda^d = \sqrt{\frac{3}{2}} H^d \frac{\mathrm{dev}(\sigma)}{||\mathrm{dev}(\sigma)||} \tag{2.38}$$

Quand au tenseur d'écoulement en transformation, il dépend du signe de $\dot{\xi}_2$:

$$\begin{cases} \Lambda^t = \sqrt{\frac{3}{2}} H^t \frac{\mathrm{dev}(\sigma)}{||\mathrm{dev}(\sigma)||_\sigma} & \text{si } \dot{\xi}_2 > 0 \\ \Lambda^t = \sqrt{\frac{3}{2}} H^t \frac{\mathrm{dev}(\varepsilon^{in})}{||\mathrm{dev}(\varepsilon^{in}||_\sigma} & \text{si } \dot{\xi}_2 < 0 \end{cases} \tag{2.39}$$

Ce modèle a été testé dans un code éléments finis, en appliquant un chargement mécanique couplé à un changement de température sur une plaque percée (voir figure 2.3).

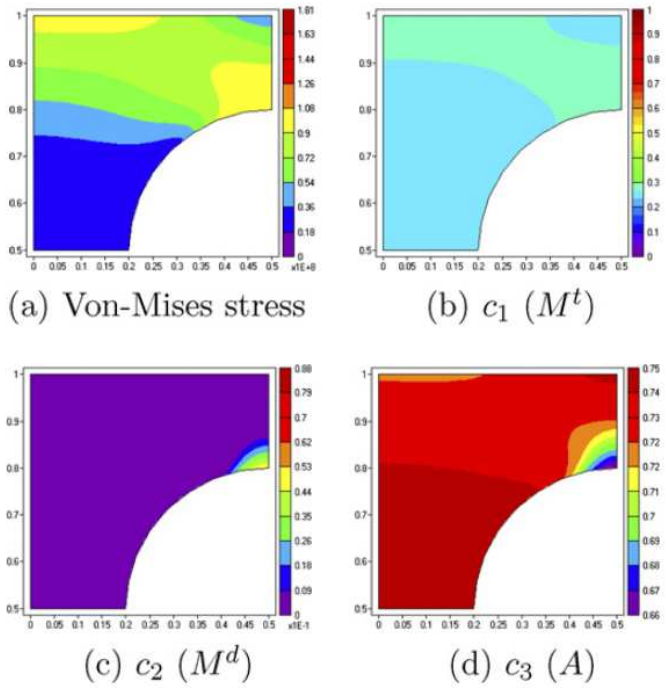

FIG. 2.3: *Cas-test d'une plaque trouée soumise à un refroidissement à déplacement imposé. a) Champ de contraintes équivalentes b) c) et d) Répartitions des fractions volumiques f^T, f^σ et f^A respectivement, d'après [Popov et Lagoudas, 2007]*

2.3.2 Commentaires sur le modèle de Popov-Lagoudas

Ce modèle fait preuve de plusieurs originalités dans sa formulation. La prise en compte de la cinétique de transformation de l'austénite en martensite thermique ou autoaccommodée, ainsi que le processus de réorientation, permettent une définition précise de l'histoire du chargement. Un algorithme de type "retour radial" assure la prise en compte de chargements

non-proportionnels, mécaniques ou thermomécaniques. En s'appuyant sur des essais de calorimétrie différentielle (DSC), le modèle différencie les forces critiques de transformation inverse pour la martensite autoaccommodée et orientée. Il met l'accent sur la définition d'un diagramme de phase complexe, où plusieurs mécanismes de déformation (transformation et orientation) sont activés simultanément. Certains points clés de la modélisation comme la dissymétrie traction-compression ou la gestion des boucles internes ne sont pas pris en compte, bien qu'ils aient été abordés dans d'autres modèles développés au sein de la même équipe [Bo et Lagoudas, 1999b, Qidwai et Lagoudas, 2000].

2.4 Modèle de Thiebaud et Lexcellent, 2007

Ce modèle a été développé au sein de l'équipe du Pr. Lexcellent à Besançon, une équipe française, dont les travaux sur la modélisation du comportement des AMF font autorité au niveau international. Cette équipe a été l'une des premières à proposer de considérer deux fractions volumiques de martensite, l'une pour la martensite autoaccommodée et l'autre pour la martensite orientée [Lexcellent et Leclercq, 1996]. Une version récente du modèle, développée en 2007 est implémentée dans le code éléments finis COMSOL [Thiebaud *et al.*, 2007]. Elle se focalise sur le comportement de la martensite orientée et la gestion de la dissymétrie traction-compression. Elle prend également en compte les aspects thermiques liés à la transformation de phase ($A \rightarrow M$ exothermique et $M \rightarrow$ A endothermique) et apporte une grande attention à la définition des surfaces de transformation.

2.4.1 Equations fondamentales du modèle

L'expression de l'énergie libre d'Helmoltz provient de la formulation développée par Raniecki et Lexcellent [Raniecki et Lexcellent, 1998] :

$$\begin{aligned} H =& U_0^A - S_0^A T - f\left(\Delta U_0 - T\Delta S_0\right) + C_v\left(\left(T - T_0\right) - T\ln\left(\frac{T}{T_0}\right)\right) \\ & - \frac{1}{2}\left(\varepsilon - K\cdot f - \alpha\left(T - T_0\right)\right) : L : \left(\varepsilon - K\cdot f - \alpha\left(T - T_0\right)\right) + f(1-f)\phi_{it} \end{aligned} \tag{2.40}$$

avec :

$$\begin{aligned} \Delta U_0 &= U_0^A - U_0^M \\ \Delta S_0 &= S_0^A - S_0^M \end{aligned} \tag{2.41}$$

ϕ_{it} est un paramètre matériau représentant une énergie de configuration de la microstructure. La déformation de transformation est définie de la manière suivante :

$$\varepsilon^T = K(V_k) f \tag{2.42}$$

où K est une fonction des variables internes V_k, et représente la déformation de la phase martensitique. Le concept d'arrangement interne optimal défini par [Raniecki et Lexcellent, 1998]

stipule que le jeu de variables internes minimise la fonction énergie libre d'Helmoltz. La fonction K dérive alors d'un potentiel $g^*(\sigma)$:

$$K = \rho \frac{\partial g^*(\sigma)}{\partial \sigma} \tag{2.43}$$

Cette relation permet de prendre en compte la dissymétrie traction-compression observée dans les AMF. L'énergie libre de Gibbs G est alors écrite à partir de l'énergie libre d'Helmoltz (éq. 2.40). On considère alors les lois de la thermoélasticité :

$$\varepsilon = -\rho \frac{\partial G}{\partial \sigma} = L^{-1}\sigma + Kf + \alpha(T - T_0) \tag{2.44}$$

$$s = -\rho \frac{\partial G}{\partial T} = s_0^A - f\Delta s_0 + C_v \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) + \frac{\alpha}{\rho}\sigma : I \tag{2.45}$$

La force thermodynamique associée à la variable f est donnée par :

$$\pi_f(\sigma, T, f) = g^*(\sigma) - (1 - 2f)\phi_{it} + \pi_0^f \tag{2.46}$$

Le second principe de la thermodynamique impose une condition sur la différentielle de la dissipation :

$$\dot{D} = \pi_f \dot{f} \geqslant 0 \tag{2.47}$$

L'équation de la chaleur donne alors :

$$C_v \dot{T} - \lambda \Delta T = r\left[\pi_f(\sigma, T, f) + T\Delta S_0\right]\dot{f} - \frac{T\alpha}{\rho} I : \dot{\sigma} \tag{2.48}$$

La prise en compte de cette équation, permet au modèle de décrire les effets de la vitesse de chargement sur le comportement.

2.4.2 Expressions de la contrainte équivalente et de la déformation de transformation équivalente

La définition d'une surface de transformation est définie d'une façon analogue à la surface d'écoulement pour les matériaux élastoplastiques :

$$f_1 = \sigma_{eq} - \sigma_0 \tag{2.49}$$

où σ_{eq} représente une contrainte équivalente et σ_0 une contrainte critique (limite du domaine d'élasticité). La définition d'une contrainte équivalente de type von Mises ne permettait pas de représenter la dissymétrie traction-compression, une forme définie par Bouvet *et al.* est alors adoptée [Bouvet *et al.*, 2004] :

$$\sigma_{eq} = \bar{\sigma} \cos\left[\frac{\cos^{-1}(1 - (1 - a(1 - y_\sigma))}{3}\right] \tag{2.50}$$

où $\bar{\sigma}$ représente la contrainte équivalente de Von Mises, a est un paramètre matériau caractéristique de la dissymétrie et y_σ est défini comme suit :

$$y_\sigma = \frac{27}{2}\frac{\det(\mathrm{dev}(\sigma)}{\bar{\sigma}^3} \tag{2.51}$$

La fonction $g^*(\sigma)$ est considérée de la forme :

$$g^*(\sigma) = \frac{\gamma}{\rho}\sigma_{eq} \tag{2.52}$$

On en déduit K :

$$K = \gamma\frac{\partial\sigma_{eq}}{\partial\sigma} \tag{2.53}$$

γ représente la cission de transformation maximale. La relation entre la fraction volumique de martensite et la déformation de transformation est définie de la manière suivante :

$$f = \frac{\varepsilon^T_{eq}}{\gamma} \tag{2.54}$$

L'expression de la déformation de transformation équivalente permet de définir la fraction volumique de martensite. L'égalité des énergies de déformation liées à la transformation $\sigma : \varepsilon^T$ et à l'énergie équivalente $\sigma_{eq}\varepsilon^T_{eq}$ mène à la forme approximée suivante de la déformation de transformation :

$$\varepsilon^T_{eq} = \frac{f(-y_\varepsilon)}{f(-1)} \tag{2.55}$$

avec y_ε le troisième invariant du tenseur des déformations : $y_\varepsilon = 4\frac{\det(\varepsilon^T)}{\bar{\varepsilon}^T}$

2.4.3 Lois d'évolution de la transformation

Afin de prendre en compte l'hystérésis de la transformation, deux fonctions $k^{(1)}$ et $k^{(2)}$ permettent de définir les critères de transformation directe et inverse :

$$\begin{aligned} \Phi^1 &= \pi_f - k^{(1)} \quad A \to M \\ \Phi^2 &= \pi_f + k^{(2)} \quad M \to A \end{aligned} \tag{2.56}$$

Ces fonctions $k^{(\alpha)}$ sont définies à partir des résultats de Koistinen et Marburger [Koistinen et Marburger, 1959], l'évolution de la fraction volumique s'écrit alors :

$$\dot{f}_{A\to M} = \frac{\frac{\gamma\dot{\sigma}_{eq}}{\rho} - \Delta S_0\dot{T}}{\frac{A_1}{1-f} - 2\Phi_{it}} \quad \dot{f}_{M\to A} = \frac{\frac{\gamma\dot{\sigma}_{eq}}{\rho} - \Delta S_0\dot{T}}{\frac{A_2}{f} - 2\Phi_{it}} \tag{2.57}$$

Ce modèle a été implémenté dans le logiciel COMSOL, dans le cas de simulations 2D en contraintes planes. Plusieurs simulations ont été menées sur des plaques en traction et en flexion, en considérant des conditions aux limites thermiques spécifiques. Une comparaison

est effectuée entre les cas de chargements isothermes, adiabatiques et dans le cas d'une température externe imposée. Les simulations en traction montrent que la pente de transformation est plus forte dans le cas adiabatique que dans le cas isotherme (voir figure 2.4). La transformation martensitique directe étant exothermique, dans le cas adiabatique l'échantillon s'échauffe. Il en résulte une augmentation de la contrainte de transformation. Dans le cas où la température externe est imposée, la convection régule l'élévation de chaleur provoquée par la transformation. La réponse est alors, dans le cas de structures minces, sensiblement égale au cas isotherme.

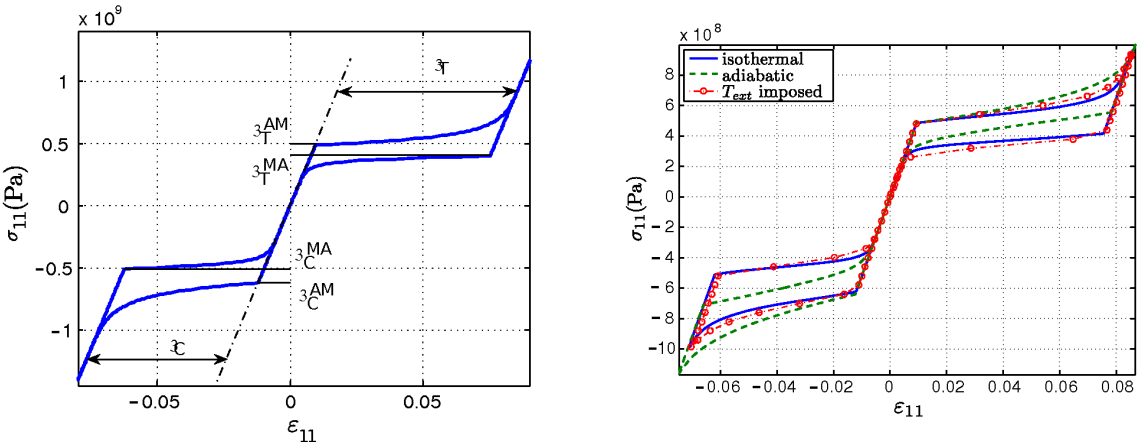

FIG. 2.4: *Paramètres caractéristiques de la dissymétrie et comparaison entre plusieurs simulations correspondant à des conditions aux limites thermiques différentes, d'après [Thiebaud* et al.*, 2007].*

2.4.4 Commentaires sur le modèle de Thiebaud *et al.*

Ce modèle, qui permet la simulation de l'effet superélastique pour des cas de chargements tridimensionnels proportionnels, est implémenté dans le logiciel de simulation multiphysique COMSOL et prend en compte les effets liés à l'équation de la chaleur (source de chaleur, conduction ...). La prise en compte de conditions aux limites thermiques consitue un plus important pour la simulation des structures en AMF. Ce modèle gère en plus la dissymétrie traction-compression. Par contre, la version développée dans [Thiebaud *et al.*, 2007] n'est valide que pour des cas de chargements proportionnels superélastiques. L'extension de ce modèle pour divers chargements thermomécaniques a été développée récemment [1].

2.5 Modèle de Saint-Sulpice *et al.*

Ce modèle a été développé par l'équipe du Professeur Calloch à Brest, en collaboration avec l'équipe du Professeur Lexcellent de Besançon. Il est issu des travaux de Saint-Sulpice *et al.* [Saint Sulpice *et al.*, 2009], qui est une extension des travaux réalisés par Bouvet *et*

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

al. [Bouvet *et al.*, 2004], afin de mieux prendre en compte les trajets superélastiques non-proportionnels et d'introduire le comportement en cyclage des alliages à mémoire de forme. Afin de simuler l'effet des cycles partiels, ce modèle utilise le concept de "points mémoire" défini par Ortin [Ortin, 1992]. L'approche utilisée ici ne s'inscrit pas dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles comme les autres modèles présentés précédemment, mais utilise plutôt des concepts dérivés des lois élastoplastiques macroscopiques. Ce type d'approche a été utilisé par d'autres auteurs, par exemple Gillet *et al.* [Gillet *et al.*, 1998] dans la cas de chargements proportionnels.

2.5.1 Equations fondamentales du modèle

Une décomposition additive de la déformation macroscopique est utilisée :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{e} + \varepsilon_{ij}^{T} \tag{2.58}$$

Deux surfaces de transformation sont définies, une pour la transformation directe et une pour la transformation inverse. La première est définie de la manière suivante :

$$f_1 = \sigma_{eq} - \left(R(f) + \sigma_0^t\right) \leqslant 0 \quad (f < 1) \tag{2.59}$$

$R(f)$ est une fonction analogue à un écrouissage isotrope en plasticité, qui est ici fonction de la fraction volumique de martensite. σ_0^t est la contrainte de début de transformation, pour le premier cycle. La contrainte équivalente utilisée est celle définie par Bouvet *et al.* [Bouvet *et al.*, 2004] (voir présentation du modèle de Thiebaud *et al.*). La fonction de charge correspondant à la transformation inverse est de la forme :

$$f_2 = |\sigma - X|_{eq} - \left(R(f) + \sigma_0^t\right) \leqslant 0 \quad (f > 0) \tag{2.60}$$

$|\sigma - X|_{eq}$ est définie de la même manière que σ_{eq}, en remplaçant σ par $(\sigma - X)$. Le tenseur X est analogue à une variable de type écrouissage cinématique. Cette variable permet de définir le centre de la surface de charge correspondant à la transformation inverse.
La fraction volumique de martensite est définie en fonction de la déformation équivalente de transformation :

$$f = \frac{\varepsilon_{eq}^{T}}{\gamma} \tag{2.61}$$

γ est un paramètre matériau correspondant à la déformation maximale de transformation. La déformation équivalente de transformation a été définie par Bouvet *et al.* [Bouvet *et al.*, 2004], et s'écrit de la même façon que pour le modèle de Thiebaud *et al.* :

$$\varepsilon_{eq}^{T} = \frac{f(-y_\varepsilon)}{f(-1)} \tag{2.62}$$

2.5.2 Prise en compte des cycles partiels

Les lois d'évolution de la transformation de phase, définies à partir de l'écriture des surfaces de transformation directe et inverse, dépendent directement de l'expression de R et X. Afin de prendre en compte les chargements partiels, la notion de points mémoire est introduite. Un point mémoire correspond à l'extremum de la fraction volumique de martensite lors de la précédente évolution monotone de f ($\dot{f} > 0$ ou $\dot{f} < 0$). Une fonction $\delta(f)$ dépendante de ces points mémoire est alors introduite dans l'expression de X (voir figure 2.5 :

$$X = \left((R(f) + \sigma_0^t) \left(\frac{1}{g(y_\varepsilon} + \frac{1}{g(-y_\varepsilon)} \right) - \delta(f) \right) \frac{\varepsilon^T}{\sqrt{\frac{3}{2}\varepsilon^T : \varepsilon^T}} \tag{2.63}$$

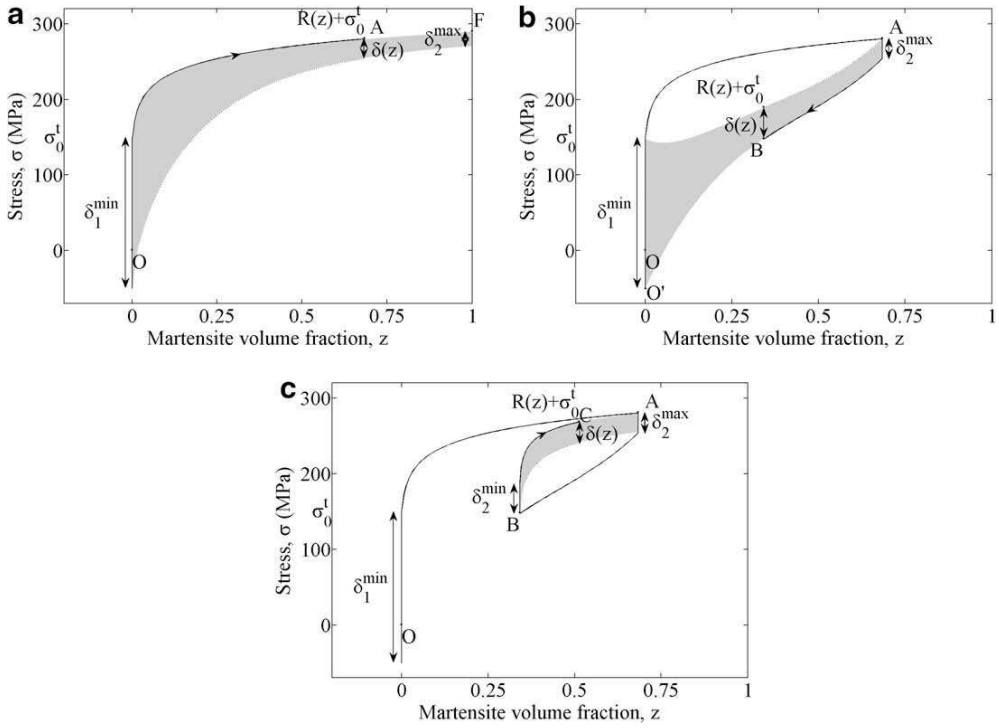

FIG. 2.5: *Evolution des paramètres liés à la simulation des boucles internes, d'après [Saint Sulpice* et al.*, 2009]*

D'une façon similaire les points mémoire vont intervenir dans l'expression de R, en utilisant cette fois-ci les valeurs extrémales de R retenues au cours de la précédente boucle.

2.5.3 Prise en compte de comportements liés au cyclage

Dans ce modèle, au vu de constatations expérimentales sur un alliage de CuAlBe, les déformations résiduelles observées au cours d'un cyclage sont attribuées à une fraction volumique de martensite résiduelle. Le comportement cyclique dépend alors de la fraction volumique cumulée, notée tr :

$$tr = \int \left| \frac{\mathrm{d}\varepsilon_{eq}^{T}}{\gamma} \right| \tag{2.64}$$

La quantité δ_1^{min} (voir figure 2.5) n'est alors plus une constante, mais dépend de l'amplitude de la fraction volumique de martensite Δf formée lors d'une boucle de chargement. L'évolution de δ_1^{min} est donnée par :

$$\begin{aligned}
\dot{\delta}_1^{min} &= \frac{\Delta R_m b}{tr + tr_0}\dot{tr} \\
b &= b_c(\Delta f)\exp\left(\frac{\delta_{ac}^{min} + \delta_1^{max} - \delta_1^{min}}{D}\right) \\
b_c(\Delta f) &= A \cdot C^{\Delta f} \\
\delta_{ac}^{min} &= \Delta R_m \left(1 + b_c \left(\Delta f \ln(tr + tr_0)\right)\right]
\end{aligned} \tag{2.65}$$

$\Delta R_m, A, C, tr_0$ et D sont des paramètres matériaux.
La figure 2.6 met en évidence la comparaison entre le modèle développé par Saint-Sulpice *et al.* et des essais de traction réalisés sur des éprouvettes en CuAlBe. Les graphes **a** et **b** montrent une comparaison sur 120 cycles à 2% de déformation. Les graphes **c** et **d** concernent un cyclage effectué en augmentant graduellement la déformation imposée à chaque nouveau cycle. Les graphes **e** et **f** rendent compte de l'évolution de la déformation de transformation résiduelle en fonction du nombre de cycles, respectivement pour différentes valeurs de déformation imposées et lorsque l'on augmente la déformation imposée. La bonne concordance observée entre résultats de simulation et expérience montre que pour ce type de matériau, lors d'un chargement superélastique, ce modèle permet de décrire correctement le comportement cyclique des AMF.

2.5.4 Commentaires sur le modèle de Saint-Sulpice *et al.*

Ce modèle permet de simuler l'effet superélastique pour des chargements 3D non proportionnels, en prenant en compte la variation de la réponse en fonction du nombre de cycles effectués. L'accent a été mis sur le couplage entre la définition des boucles internes et le nombre de cycles effectués. La dissymétrie de comportement traction-compression est prise en compte à partir de la définition d'une contrainte équivalente définie par Bouvet *et al.* [Bouvet *et al.*, 2004]. Ce modèle utilisant un formalisme similaire à la définition de lois élastoplastiques, par la définition de surfaces seuil dans l'espace des contraintes, a l'inconvénient de ne pas prendre en compte la variation des contraintes limites de transformation en fonction de la température. Une étape préliminaire de calcul de cette contrainte seuil en traction en fonction de la température de l'essai doit donc être menée. Par contre, le formalisme permet une définition précise des boucles de chargements lors de cycles répétés, qu'ils soient complets ou partiels. L'identification des paramètres matériaux semble toutefois assez complexe, car les paramètres de ce modèle sont assez éloignés de grandeurs macroscopiques mesurables.

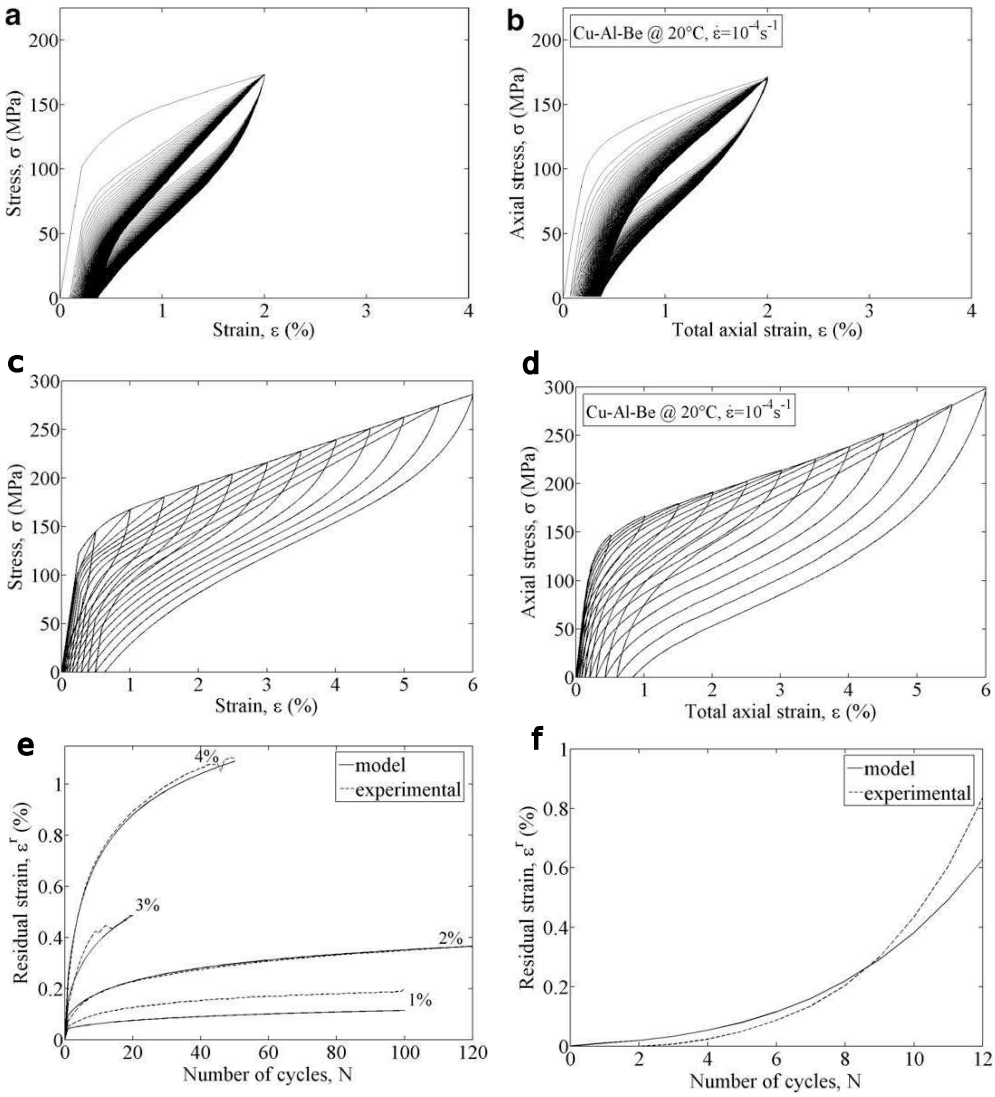

FIG. 2.6: *Comparaison entre un chargement (a) simulé et (b) expérimental pour une déformation imposée de 2%. Comparaison entre (c) simulation et (d) résultats expérimentaux pour une déformation imposée croissante. Evolution de la déformation de transformation résiduelle en fonction du nombre de cycles (e) pour différentes valeurs de déformation imposées et (f) pour une déformation imposée croissante, d'après [Saint Sulpice* et al.*, 2009]*

Conclusion du chapitre

Les différents modèles présentés ici ont tous leurs spécificités, que ce soit au niveau des partis pris lors de la formulation du problème, des hypothèses fondamentales utilisées ou des phénomènes pris en compte. Il ressort de cette revue bibliographique que les modèles simulant le comportement superélastique des AMF sont assez complets, et l'objectif des modèles futurs porte plutôt sur la prise en compte d'effets annexes tels que le cyclage, les déformations plastiques etc ... Par contre les modèles décrivant le comportement thermomécanique complet, incluant la définition des mécanismes de transformation et de réorientation peuvent encore progresser en prenant en compte la dissymétrie traction-compression, l'effet de cycles partiels, etc. De plus, la plupart des modèles ne sont pas réellement reliés au comportement du Nickel-Titane, qui est pourtant l'alliage à mémoire de forme le plus utilisé. L'influence sur le comportement lié à la présence de séquences de transformation multiples et l'effet dû à la présence de macles dans la martensite restent négligés. La définition d'un modèle prenant en compte tous ces aspects constitue un défi que la communauté scientifique centrée autour de la modélisation des AMF doit encore relever.

3

Modèle thermodynamique macroscopique

Sommaire

3.1 Formulation thermodynamique 66
3.1.1 Mécanismes de déformation - Choix des variables internes 66
3.1.2 Définition du potentiel thermodynamique 70
3.1.3 Forces thermodynamiques 76
3.1.4 Potentiel de dissipation 77
3.1.5 Chargements partiels 81
3.1.6 Dissymétrie traction-compression 82
3.1.7 Conditions d'activation - lois d'évolutions 86
3.2 Intégration numérique 89
3.2.1 Mise en équation du problème 90
3.2.2 Intégration implicite 90
3.2.3 Gestion des saturations 91
3.2.4 Expression du système d'équations, calcul des résidus 93
3.2.5 Prise en compte des rotations finies 98
Conclusion 100

Le modèle présenté dans ce chapitre est dédié au calcul de structures comportant des éléments en alliage à mémoire de forme. L'objectif est d'obtenir une loi permettant une bonne description de tous les comportements typiques des AMF (superélasticité, effet mémoire, effet mémoire double sens assisté, etc.) tout en restant adaptée au calcul par éléments finis. La majeure partie des dispositifs utilisant des éléments actifs étant en Nickel-Titane, le développement de ces applications nécessite un outil de conception adapté aux spécificités de cet alliage. Un modèle destiné au calcul de structures doit donc être orienté vers la simulation non seulement de comportements propres à tous les AMF, mais également des comportements spécifiques aux alliages NiTi. Ce modèle devant être utilisé par des concepteurs qui ne sont pas forcément des spécialistes des matériaux à mémoire de forme, il est impératif que les paramètres matériaux soient les plus explicites possibles. Leur identification doit pouvoir se réaliser en se limitant à des essais simples à mettre en œuvre. Ces contraintes imposent de définir avec soin les variables internes et les paramètres matériaux nécessaires. Les variables internes devront représenter convenablement l'évolution du matériau, tout en réduisant leur nombre afin de limiter les temps de calculs. Les paramètres du modèle devront représenter les particularités de chaque matériau, compte tenu de leur composition et de leur histoire thermomécanique (écrouissage, traitements thermiques). Tout au long de la définition de ce modèle, les choix effectués ont été guidés par ces contraintes fondamentales. Ces critères nous ont poussés à utiliser comme base de départ la modélisation déjà réalisée par Peultier [Peultier, 2005]. La facilité d'identification des paramètres matériaux, et la prise en compte des principaux comportements des AMF faisaient partie de ses objectifs lors de l'élaboration de son modèle. Des modifications significatives y sont apportées, permettant de mieux rendre compte de la diversité du comportement des AMF, notamment au voisinage des températures de transformation. La prise en compte de comportements spécifiques aux nickel-titane a aussi été ajoutée. L'implémentation numérique a été particulièrement travaillée, afin d'obtenir un modèle robuste capable de simuler un grand nombre de trajets thermomécaniques en utilisant le logiciel `ABAQUS`. Le modèle présenté dans ce chapitre est le fruit d'une collaboration entre le LPMM de Metz (Y. Chemisky, E. Patoor) et le LEMTA de Nancy (A. Duval, T. Ben-Zineb).

3.1 Formulation thermodynamique

3.1.1 Mécanismes de déformation - Choix des variables internes

Les mécanismes de déformation sont identifiés à partir d'essais macroscopiques, d'observations microscopiques et de modèles physiques (comme celui régissant la transformation de phase). Mais pour intégrer ces mécanismes dans l'expression du potentiel thermodynamique, il faut définir des variables caractéristiques de ces mécanismes. La richesse physique et la capacité de prédiction d'un modèle repose sur ce choix de variables, qui définissent l'état interne du matériau. Le comportement observable est quant à lui représenté par l'évolution de la

déformation macroscopique. Il est impératif de relier les variables internes à cette déformation macroscopique, en définissant une loi cinématique.
En supposant que les constantes élastiques et thermiques sont identiques dans les phases martensitique et austénitique, et en supposant un champ de température uniforme, nous pouvons effectuer une décomposition additive de la déformation du VER :

$$E_{ij} = E_{ij}^{e} + E_{ij}^{\alpha} + E_{ij}^{T} + E_{ij}^{twin} \tag{3.1}$$

La déformation macroscopique E_{ij}^{twin} résulte du mécanisme d'accommodation des macles, présenté au chapitre 1. Ce mécanisme de déformation ne se produit que lorsque la martensite est formée avec une microstructure autoaccommodée. Ce mécanisme de déformation, qui s'ajoute à la transformation de phase ne se produit que lorsque la déformation de transformation est faible du fait de l'autoaccommodation, nous avons alors :

$$\begin{aligned} &|E_{ij}^{T}| \approx 0 \quad \text{alors} \quad |E_{ij}^{twin}| \neq 0 \\ &|E_{ij}^{T}| = E_{max}^{T} \quad \text{alors} \quad |E_{ij}^{twin}| = 0 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Il n'y a pas de cas où la déformation d'accommodation des macles et la déformation de transformation sont maximales simultanément. Ces déformations sont complémentaires, dans le sens ou lorsque l'une est observée, l'autre ne l'est pas ou seulement de façon marginale.

La déformation de transformation peut s'exprimer comme la moyenne, sur le volume V du VER, de la déformation de transformation locale :

$$E_{ij}^{T} = \frac{1}{V}\int_{V} \varepsilon_{ij}^{T}(r)dV \tag{3.3}$$

La déformation locale de transformation étant nulle dans l'austénite, on peut intégrer la déformation locale sur le volume de martensite V_M à l'intérieur du VER :

$$E_{ij}^{T} = \frac{V_M}{V}\frac{1}{V_M}\int_{V_M} \varepsilon_{ij}^{T}(r)dV = f\frac{1}{V_M}\int_{V_M} \varepsilon_{ij}^{T}(r)dV \tag{3.4}$$

f, défini par $\frac{V_M}{V}$, représente la fraction volumique de martensite du VER. On peut de plus définir la déformation moyenne de transformation du volume de martensite :

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} = \frac{1}{V_M}\int_{V_M} \varepsilon_{ij}^{T}(r)dV \tag{3.5}$$

On obtient la relation cinématique suivante :

$$E_{ij}^{T} = f\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} \tag{3.6}$$

La décomposition obtenue ici a été proposée par Peultier [Peultier, 2005]. Les variables f et $\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}$ permettent de définir la cinématique de la transformation, et sont de plus caractéristiques des mécanismes de déformation : la fraction volumique de martensite représente l'état de la transformation martensitique et une évolution de la déformation moyenne de transformation

indique un processus de réorientation, ce qui motive leur choix en tant que variables internes.

De façon analogue, la déformation macroscopique associée au mécanisme d'accommodation des macles peut s'écrire ainsi :

$$E_{ij}^{twin} = \frac{1}{V}\int_V \varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV \tag{3.7}$$

On considère un volume de variantes maclées à l'intérieur du VER, défini par V_{twin}. La déformation locale due à l'accommodation des macles est nulle dans toute autre partie du VER. Ce mécanisme de déformation ne se produit que dans la martensite qui s'est formée de façon autoaccommodée (voir chapitre 1), car nous supposons que les macles apparaissent au moment de l'apparition de variantes adoptant une structure autoaccommodée, et restent présentes tant que les déformations ne sont pas trop importantes (voir chapitre 1, figure 1.26). Ce volume ne correspond pas au volume de martensite autoaccommodée tel que l'a défini Brinson [Brinson, 1993], volume qui peut évoluer en fonction de la contrainte appliquée pour se transformer en volume de martensite orientée. Le volume considéré ici correspond à la martensite qui a adopté une structure autoaccommodée lors de sa formation. Si ultérieurement l'orientation moyenne de la martensite change, ce volume de martensite formée autoaccommodée restera inchangé, jusqu'à ce que la transformation inverse se produise. On appelle ce volume $V_{M^{FA}}$, et l'on a $V_{M^{FA}} = V_{twin}$. On peut alors définir une déformation moyenne associée au mécanisme de déformation d'accommodation des macles, à l'intérieur du volume de martensite formé autoaccommodée :

$$E_{ij}^{twin} = \frac{V_{M^{FA}}}{V}\frac{1}{V_{M^{FA}}}\int_{V_{M^{FA}}} \varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV \tag{3.8}$$

On peut, de la même façon que pour la déformation moyenne de transformation, définir la déformation moyenne d'accommodation du volume de martensite maclée :

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} = \frac{1}{V_{M^{FA}}}\int_{V_{M^{FA}}} \varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV \tag{3.9}$$

La fraction volumique de martensite formée autoaccommodée se note :

$$f^{FA} = \frac{V_{M^{FA}}}{V} \tag{3.10}$$

On obtient alors la relation cinématique suivante :

$$E_{ij}^{twin} = f^{FA}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} \tag{3.11}$$

La déformation moyenne d'accommodation de la martensite maclée est caractéristique de l'état interne du matériau. Elle est considérée comme une variable interne supplémentaire. La fraction volumique de martensite formée autoaccommodée f^{FA} n'est pas considérée comme une variable interne. C'est une variable indépendante de la fraction volumique de martensite et de la déformation moyenne de transformation car elle ne dépend pas de l'état actuel de ces deux variables.

Pour résumer, les variables internes qui sont considérées dans cette formulation sont :
– la fraction volumique de martensite (f)
– la déformation moyenne de transformation de la martensite ($\bar{\varepsilon}^T_{ij}$)
– la déformation moyenne d'accommodation des macles ($\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}$)
A ces variables internes sont associées les contraintes physiques suivantes :
La fraction volumique de martensite est nécessairement comprise dans l'intervalle [0, 1]

$$0 \leqslant f \leqslant 1 \tag{3.12}$$

Il est admis que la déformation de transformation dans les alliages à mémoire de forme n'induit pas de modification de volume, d'après les mécanismes de déformation décrits par Weschler, Libermann et Read [Weschler *et al.*, 1953], donc :

$$\bar{\varepsilon}^T_{kk} = 0 \tag{3.13}$$

Ces mécanismes de déformations supposent que les variantes de martensite induisent un cisaillement maximal, qui dépend du matériau considéré. Si l'on suppose que plusieurs variantes peuvent se former dans le grain, en raison de la présence de contraintes internes liées à l'incompatibilité de déformation du polycristal, la formation de variantes avec des interfaces incompatibles va alors limiter fortement la progression d'une variante par rapport aux autres dans un même grain. La déformation de transformation macroscopique ne peut pas être déterminée uniquement à partir de la connaissance de la texture du matériau et de la valeur du cisaillement caractéristique de la transformation. Cette déformation maximale est appelée ε^T_{SAT}.

$$|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \leqslant \varepsilon^T_{SAT} \tag{3.14}$$

Prenons maintenant le cas d'un refroidissement à contrainte nulle, qui induit la formation de martensite autoaccommodée. On suppose l'application d'une contrainte à basse température, qui active le processus de réorientation. Lors de sa formation, la martensite sera composée d'une multitude de groupes auto-accommodants. Une variante pourra facilement progresser à l'intérieur de ces groupes, mais les groupes autoaccommodants ne seront pas forcément compatibles entre eux. Il y aura alors une multitude d'interfaces incompatibles qui va fortement limiter la progression du processus de réorientation. La déformation maximale observée sera alors plus faible que dans le cas précédent. La martensite formée de façon autoaccommodée se déforme jusqu'à une limite de déformation inférieure à celle observée avec une formation de martensite bien orientée. Il est nécessaire de prendre en compte ces observations dans la formulation de la déformation maximale de transformation. La solution proposée ici consiste à définir un ratio η_ε des déformations à saturations observées lors de la formation de martensite orientée ε^T à partir de l'austénite et à partir de martensite formée autoaccommodée ε^{TFA} pour une direction donnée :

$$\eta_\varepsilon = 1 - \left(\frac{\varepsilon^{TFA}}{\varepsilon^T} \right) \tag{3.15}$$

La déformation maximale lors d'un trajet thermomécanique s'exprime alors en fonction de la déformation à saturation de la martensite formée orientée et de la fraction volumique de martensite formée autoaccommodée :

$$\varepsilon^T_{MAX} = \varepsilon^T_{SAT}\left(1 - \frac{f^{FA}}{f}\eta_\varepsilon\right) \tag{3.16}$$

On considère alors la limitation suivante, qui remplace l'équation 3.14 :

$$|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \leqslant \varepsilon^T_{MAX} \tag{3.17}$$

On ne considère pas de limitation physique sur la valeur de la troisième variable interne $\bar{\varepsilon}^{twin}$ car on suppose que l'accommodation des macles se poursuit jusqu'à ce que la déformation plastique intervienne dans ce type de matériau. La loi décrite ici ne prend pas en compte le mécanisme de déformation plastique, on suppose que les applications-types des AMF ne sollicitent pas le matériau jusqu'à cette limite. Dans l'intervalle de validité de la loi de comportement, l'accommodation des macles n'a donc pas de limitation physique.

3.1.2 Définition du potentiel thermodynamique

L'énergie libre de Gibbs est utilisée pour définir le potentiel thermodynamique, car les variables observables associées (la température T et la contrainte Σ) sont utilisées comme variables de contrôle. La dérivée temporelle de l'énergie libre s'exprime en fonction des variables de contrôle et des variables internes f, $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$ et $\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}$, que l'on nomme V_k pour simplifier l'écriture.

$$\dot{G} = \frac{\partial G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} + \frac{\partial G}{\partial T}\cdot\dot{T} + \frac{\partial G}{\partial V_k}\cdot\dot{V_k} \tag{3.18}$$

L'inégalité de Clausius-Duhem s'écrit alors :

$$-\frac{\partial G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} - \frac{\partial G}{\partial T}\cdot\dot{T} - \frac{\partial G}{\partial V_k}\cdot\dot{V_k} - S\cdot\dot{T} - E : \dot{\Sigma} - \vec{q}\cdot\frac{\vec{grad}T}{T} \geqslant 0 \tag{3.19}$$

Nous rappelons ici l'expression de la variation de l'énergie libre de Gibbs à partir d'un état initial austénitique, déterminée au chapitre précédent :

$$\begin{aligned}\Delta G &= G^{biphasé} - G^{init} \\ &= -\Delta T S^A + f\left(\Delta U - T\Delta S\right) - \Sigma_{ij}E_{ij} + G^{int} + C_v\left[(T - T_0) - T\log\frac{T}{T_0}\right]\end{aligned} \tag{3.20}$$

Le terme d'interaction G^{int} correspond à une énergie élastique stockée dans le matériau transformé lors de la transformation de phase ou de la réorientation des variantes de martensite. Il peut s'écrire :

$$G^{int} = \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(r)\varepsilon^e_{ij}(r)dV \tag{3.21}$$

La déformation élastique s'exprime en fonction de la déformation (totale) et des autres mécanismes de déformation :

$$G^{int} = \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(r)\left(\varepsilon_{ij}(r) - \alpha_{ij}\Delta T(r) - \varepsilon_{ij}^{T}(r) - \varepsilon_{ij}^{twin}(r)\right) dV \tag{3.22}$$

Après intégration, en utilisant le théorème de Hill [Hill, 1963] et en considérant une température uniforme dans tout le VER, on obtient :

$$G^{int} = \frac{1}{2}\Sigma_{ij}E_{ij} - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(r)\left(\alpha_{ij}\Delta T + \varepsilon_{ij}^{T}(r) + \varepsilon_{ij}^{twin}(r)\right) dV \tag{3.23}$$

L'énergie élastique associée à la déformation de transformation et la déformation d'accommodation des macles repose sur l'existence d'une hétérogénéité du champ de contraintes liées à des interactions présentes à deux échelles : l'échelle intergranulaire et l'échelle intragranulaire. La figure 3.1 montre les étapes de déformation d'un polycristal de CuAlBe, soumis à un chargement en traction, lors d'une observation au microscope à lumière polarisée. Au début du chargement, dans le grain central une première variante se forme dans la partie supérieure du grain. Une deuxième variante se forme dans la partie inférieure du grain, avec une orientation proche de celle des variantes formées dans les autres grains de la partie inférieure du cliché, ce qui met en évidence la formation préférentielle de cette variante en raison du champ de contrainte induit par la déformation dans les autres grains. Lors des étapes suivantes de la déformation, à l'intérieur des variantes principales apparues plus tôt d'autres variantes apparaissent avec des orientations différentes : ceci indique qu'elles ne sont pas orientées uniquement par la contrainte macroscopique, et met en évidence l'existence d'un fort champ de contraintes internes généré par l'évolution de la transformation martensitique. On peut expliquer l'origine de ce champ de contraintes par les considérations suivantes :

- Lors de la formation de variantes de martensite dans un grain, la déformation de transformation associée à ce grain, si on le considère indépendamment de ses voisins, est conditionnée par son orientation cristallographique par rapport à la direction de la contrainte appliquée. Or une incompatibilité de la déformation de transformation apparaît lorsque l'on considère le grain au milieu d'autres grains dans un polycristal. De façon analogue à la présence d'une densité de dislocations géométriquement nécessaires en plasticité (voir figure 3.2), des variantes supplémentaires se forment afin d'accommoder ces incompatibilités. L'orientation de ces variantes est alors définie en fonction du champ de contraintes locales induit par les incompatibilités de déformations intergranulaires.
- Dans un grain, entre des zones transformées et non transformées, l'hétérogénéité de la déformation de transformation va là aussi générer des incompatibilités géométriques. De la même manière, afin d'accommoder ces incompatibilités, des variantes vont se former.
- Les interactions entre les variantes d'un même grain, en fonction de leur compatibilité (formation de groupes autoaccommodants ou non), vont générer un champ de contraintes à l'échelle intragranulaire. Une énergie élastique est associée au champ de contraintes induit par ces interactions entre variantes.

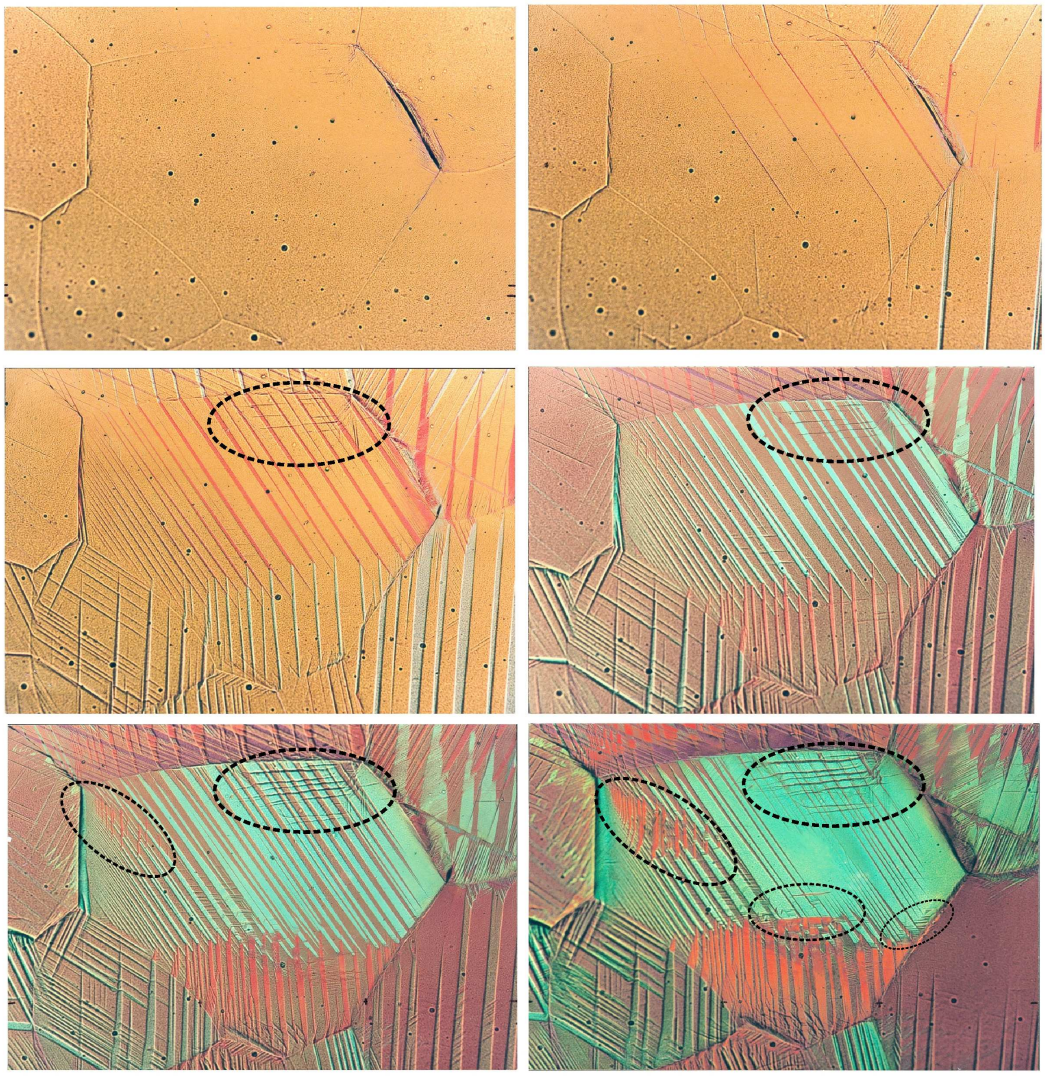

FIG. 3.1: *Formation de variantes de martensite dans un grain de CuAlBe au cours d'un chargement en traction - mise en évidence de la formation de variantes permettant d'accommoder les incompatibilités géométriques (cliché A. Eberhardt, LPMM).*

– De plus, dans un NiTi, lors du mouvement des interfaces entre deux macles, on suppose l'apparition d'un champ de contraintes locales à l'échelle de la variante. Il en résulte une variation de l'énergie élastique, fonction du champ de déformation local dû à la mobilité des macles et de la fraction volumique de martensite formée autoaccommodée.

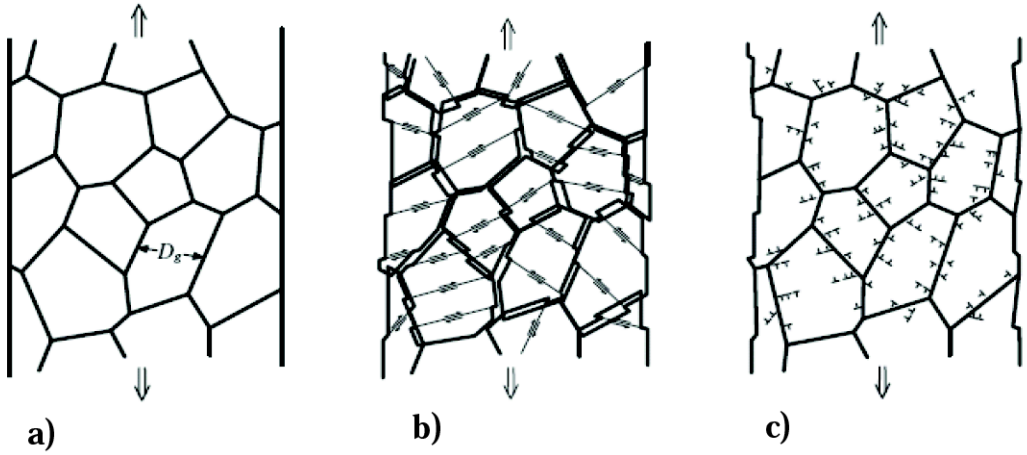

FIG. 3.2: *Incompatibilité de la déformation plastique dans un polycristal, et formation de dislocations géométriquement nécessaires (d'après Ashby [Ashby, 1970])*

Le champ de contraintes à l'intérieur d'un échantillon polycristallin est donc très hétérogène. Dans l'optique de définir un modèle macroscopique facilement implémentable dans un code éléments finis, il est nécessaire de relier ce champ de contraintes à nos variables macroscopiques. Des hypothèses très fortes, sûrement discutables, vont donc être considérées.
L'énergie élastique du VER est décomposée en quatre contributions :

1. G_1^{int}, liée au champ de contraintes macroscopiques $\sigma^I = \Sigma$ à l'échelle du VER, qui s'exprime par :

$$\begin{aligned} G_1^{int} &= \frac{1}{2}\Sigma_{ij}E_{ij} - \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}^I(r)\left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{twin}(r)\right)dV \\ &= \frac{1}{2}\Sigma_{ij}E_{ij} - \frac{1}{2V}\Sigma_{ij}\int_V \left(\varepsilon_{ij}^T(r) + \varepsilon_{ij}^{twin}(r)\right)dV \\ &= \frac{1}{2}\Sigma_{ij}\left(E_{ij} - \alpha_{ij}\Delta T - E_{ij}^T - E_{ij}^{twin}\right) \\ &= \frac{1}{2}\Sigma_{ij}S_{ijkl}\Sigma_{kl} \end{aligned} \tag{3.24}$$

2. G_2^{int}, associée au champ de contraintes locales hétérogènes induit par les incompatibilités intergranulaires et intragranulaires liées à la déformation de transformation des grains. Cette énergie est reliée à la variation $\sigma^{II}(r)$ de ce champ de contraintes locales par rapport au champ de contraintes macroscopique :

$$G_2^{int} = -\frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}^{II}(r)\varepsilon_{ij}^T(r)dV \tag{3.25}$$

Cette variation ne peut pas être directement reliée aux variables internes macroscopiques, mais on peut considérer que l'énergie élastique stockée augmente avec la déformation de transformation, car on accentue les incompatibilités d'ordre géométriques. Donc cette augmentation d'énergie élastique est proportionnelle à $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. On considère alors, en introduisant un facteur de proportionalité H_ε, que :

$$\begin{aligned} G_2^{int} &= \frac{1}{2V}\int_V H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \varepsilon_{ij}^T(r)dV \\ &= \frac{1}{2V} H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \int_V \varepsilon_{ij}^T(r)dV \\ &= \frac{1}{2}\frac{V_M}{V}\frac{1}{V_M} H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \int_{V_M} \varepsilon_{ij}^T(r)dV_M \\ &= \frac{1}{2} f H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T \end{aligned} \tag{3.26}$$

La forme obtenue est proche de l'expression d'un écrouissage cinématique en plasticité.

3. G_3^{int}, induite par les incompatibilités intervariantes. Une variation $\sigma^{III}(r)$ du champ de contraintes est associée à cette énergie élastique. Plutôt que de supposer une forme de cette variation, nous utilisons l'expression de l'énergie intervariantes w_{inter}^N définie dans un grain N par Siredey *et al.* [Siredey *et al.*, 1999] :

$$w_{inter}^N = \frac{1}{2}\sum_{m,n} f_m H^{mn} f_n \tag{3.27}$$

f_n représente la fraction volumique de la variante n dans le grain. H est la matrice de compatibilité des différentes variantes : la valeur d'une composante H^{mn} de cette matrice dépend de la compatibilité de la variante m par rapport à la variante n. Pour définir l'énergie élastique associée dans tout le VER, nous supposons une forme similaire en considérant un scalaire H_f, valeur moyenne des compatibilités intervariantes. Nous obtenons alors :

$$G_3^{int} = \frac{1}{2} H_f f^2 \tag{3.28}$$

La distinction entre le polycristal et le monocristal n'est pas vraiment apparente dans cette formulation, mais est prise en compte dans le facteur H_f. En effet, une multitude de variantes sont formées et orientées par un champ de contraintes liées à l'incompatibilité de déformation de transformation, ainsi que le champ de contraintes internes initial, ce qui augmente largement les incompatibilités entre variantes. Le paramètre H_f sera alors beaucoup plus important dans le cas du polycristal.

4. G_4^{int}, associée au champ de contraintes locales hétérogène liées à la mobilité des interfaces intermacles. Cette énergie est reliée à la variation du champ de contraintes locales

σ^{IV} par rapport à la contrainte macroscopique. De la même façon que pour G_2^{int}, on considère un facteur de proportionalité entre l'énergie élastique stockée et la déformation moyenne liée à l'accommodation des macles, en tenant compte du sens de l'évolution. Un facteur de proportionalité H_{twin} étant alors défini, on obtient l'expression suivante de G_2^{int} :

$$\begin{aligned} G_4^{int} &= \frac{1}{2V}\int_V H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV \\ &= \frac{1}{2V}H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\int_V \varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV \\ &= \frac{1}{2}\frac{V_{M^{FA}}}{V}\frac{1}{V_{M^{FA}}}H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\int_{V_{M^{FA}}} \varepsilon_{ij}^{twin}(r)dV_{M^{FA}} \\ &= \frac{1}{2}f^{FA}H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} \end{aligned} \tag{3.29}$$

L'expression de l'énergie élastique est maintenant fonction des variables internes et de divers paramètres matériaux. Cette formulation est assez sommaire et peu riche en informations sur la nature et la forme exacte du champ de contraintes dans le VER. Mais dans le cadre de la définition d'un modèle macroscopique, l'expression d'un coefficient scalaire proportionnel à la forme quadratique d'une variable interne associée en tant que paramètre matériau, a l'avantage de représenter une pente de pseudo-écrouissage cinématique. Un des objectifs de ce modèle étant la simplicité d'identification des paramètres, l'expression de l'énergie élastique proposée ici est un compromis entre les problèmes d'identification et la représentation précise des incompatibilités liées aux mécanismes de déformation. Le potentiel thermodynamique peut donc être réécrit, en négligeant ici le terme lié à la chaleur massique :

$$\begin{aligned} \Delta G &= -\Delta T S^A + f\left(\Delta U - T\Delta S\right) - \Sigma_{ij}E_{ij} + \frac{1}{2V}\int_V \sigma_{ij}(r)S_{ijkl}\sigma kl(r)dV \\ &= -\Delta T S^A + f\left(\Delta U - T\Delta S\right) - \frac{1}{2}\Sigma_{ij}S_{ijkl}\Sigma_{kl} - \Sigma_{ij}\alpha_{ij}\Delta T - \Sigma_{ij}f\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} - \Sigma_{ij}f^{FA}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} \\ &+ \frac{1}{2}fH_{\varepsilon}\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} + \frac{1}{2}H_f f^2 + \frac{1}{2}f^{FA}H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} \end{aligned} \tag{3.30}$$

En considérant $T_0 = \frac{\Delta U}{\Delta S}$, température d'équilibre de la transformation, et en supposant une variation B de l'entropie autour de T_0, $B = -\Delta S$, on obtient :

$$f\left(\Delta U - T\Delta S\right) = B\left(T - T_0\right)f \tag{3.31}$$

d'où

$$\begin{aligned} \Delta G = -\Delta T S^A + B\left(T - T_0\right)f - \frac{1}{2}\Sigma_{ij}S_{ijkl}\Sigma_{kl} - \Sigma_{ij}\alpha_{ij}\Delta T - \Sigma_{ij}f\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} \\ - \Sigma_{ij}f^{FA}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} + \frac{1}{2}fH_{\varepsilon}\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} + \frac{1}{2}H_f f^2 + \frac{1}{2}f^{FA}H_{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} \end{aligned} \tag{3.32}$$

La définition de ce potentiel thermodynamique a fait appel à de nombreuses hypothèses, nécessaires afin de simplifier le problème. Les hypothèses les plus discutables sont celles qui ont mené à la définition présentée ici de l'énergie élastique stockée. L'avantage réside dans une formulation qui est directement fonction des variables internes, ce qui facilitera l'expression des forces thermodynamiques. Les aspects liés à la thermique ne sont pas pris en compte ici, la température est considérée comme un paramètre de contrôle, et elle est uniforme dans tout le VER. La variation d'entropie entre la phase mère et la phase produit est linéarisée au voisinage de la température d'équilibre, ce qui est considéré dans tous les modèles macroscopiques.

3.1.3 Forces thermodynamiques

Le potentiel thermodynamique est fonction des variables d'état, des variables internes et de constantes dépendant du matériau considéré. On peut alors définir les trois forces thermodynamiques A_k associées aux variables internes V_k (f, $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$ et $\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}$), de la façon suivante :

$$A_k = \frac{\partial \Delta G}{\partial V_k} \tag{3.33}$$

L'équation de Clausius-Duhem devient alors :

$$-\frac{\partial \Delta G}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \cdot \dot{T} - \{A_k\} \left\{\dot{V}_k\right\} - S \cdot \dot{T} - E : \dot{\Sigma} - \vec{q} \cdot \frac{\vec{grad} T}{T} \geqslant 0 \tag{3.34}$$

Le produit $\{A_k\} \left\{\dot{V}_k\right\}$ correspond au produit de tenseurs de différents ordres (0 ou 2) suivant la forme mathématique des forces thermodynamiques A_k et des variables internes V_k. Par exemple A_f et f sont des scalaires, alors que A^T_ε et $\bar{\varepsilon}^T$ sont des tenseurs d'ordre 2.
La déformation de transformation martensitique et la déformation d'accommodation des macles sont supposées déviatoriques ($\varepsilon^T_{kk} = 0, \varepsilon^{twin}_{kk} = 0$). En notant Σ^D_{ij} la partie déviatorique de Σ, on définit alors les forces thermodynamiques A_k comme suit :

– la force de transformation, liée à la variable f :

$$A_f = \frac{\partial \Delta G}{\partial f} = B\,(T - T_0) - \Sigma_{ij}\bar{\varepsilon}^T_{ij} + \frac{1}{2} H^T_\varepsilon \bar{\varepsilon}^T_{ij}\bar{\varepsilon}^T_{ij} + H_f f \tag{3.35}$$

– la force d'orientation, liée à à variable $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$:

$$A_{\bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = -f\Sigma^D_{ij} + f H^T_\varepsilon \bar{\varepsilon}^T_{ij} \tag{3.36}$$

– la force d'accommodation des macles, liée à $\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}$:

$$A_{\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}} = \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij}} = -f^{FA}\Sigma^D_{ij} + f^{FA} H_{twin} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \tag{3.37}$$

Nous considérons que l'équilibre thermoélastique est toujours vérifié, et s'effectue à des échelles de temps inférieures aux processus dissipatifs :

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma_{ij}} - E_{ij} = 0 \\
&S_{ijkl}\Sigma_{kl} + \alpha \Delta T + f\bar{\varepsilon}_{ij}^{T} + f^{FA}\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} - E_{ij} = 0
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

Les forces thermodynamiques obtenues ne permettent pas de décrire l'évolution des variables internes, car des processus dissipatifs interviennent, qu'il faut décrire afin de permettre l'écriture les lois d'évolutions des variables internes.

3.1.4 Potentiel de dissipation

Dans le cas où l'équilibre thermoélastique est vérifié, l'inégalité de Clausius-Duhem peut se réduire à l'expression de la dissipation, qui doit être positive :

$$
\phi = -\left\{A_k\right\}\left\{\dot{V}_k\right\} - q_i \cdot \frac{T,i}{T} \geq 0 \tag{3.39}
$$

Le potentiel de dissipation Φ est la somme du terme de dissipation intrinsèque Φ_1 (ou dissipation mécanique) et d'un terme de dissipation par conduction Φ_2. La dissipation intrinsèque est fonction de l'évolution des variables internes, ainsi que de forces thermodynamiques associées.

$$
\begin{aligned}
\phi_1 &= -\left\{A_k\right\}\left\{\dot{V}_k\right\} \\
\phi_2 &= -\overrightarrow{q} \cdot \frac{\overrightarrow{\operatorname{grad} T}}{T}
\end{aligned}
\tag{3.40}
$$

Les observations expérimentales montrent que les transformations de phase directe et inverse s'accompagnent d'un hystérésis, caractéristique d'une dissipation. Cet hystérésis n'est pas le même suivant les conditions de température et de contrainte : il diminue lorsque la contrainte augmente. Le processus de réorientation lors d'un cycle complet en traction-compression fait lui aussi apparaître un hystérésis mécanique. Par contre, le processus de déformation d'accommodation des macles, premier stade de la déformation de la martensite formée autoaccommodée, est considéré comme une déformation réversible sans hystérésis, car la dissipation associée à ce mécanisme est négligeable devant les autres phénomènes disspatifs. La dissipation par conduction est ici considérée nulle, car on suppose une température uniforme dans le VER. Le potentiel de dissipation mécanique est écrit en fonction de la dérivée temporelle des variables internes, et de forces critiques d'activation, supposées positives. L'expression de la dissipation étant nécessairement positive, on obtient :

$$
\begin{aligned}
\phi_{1f} &= F_f^{crit}(\dot{f})\dot{f} \\
\phi_{1\varepsilon^T} &= f F_{\varepsilon^T}^{max}(\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^{T}) \cdot \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^{T}
\end{aligned}
\tag{3.41}
$$

La dépendance de l'hystérésis par rapport aux conditions d'essais, est prise en compte en considérant une fonction de B, de T_0 et de $\dot{f}$, et en introduisant trois paramètres F_f^{max}, B_d et B_r :

$$\begin{aligned} F_f^{crit} &= F_f^{max} + (B_d - B)(T - T_0) \quad \text{si } \dot{f} > 0 \\ F_f^{crit} &= -F_f^{max} + (B_r - B)(T - T_0) \quad \text{si } \dot{f} < 0 \end{aligned} \tag{3.42}$$

L'étude du comportement de la martensite (chapitre 1) a montré l'effet de stabilisation de la martensite après une prédéformation, qui a été observé par plusieurs auteurs [Liu et Favier, 2000, Popov et Lagoudas, 2007, Piao *et al.*, 1993]. Popov et Lagoudas [Popov et Lagoudas, 2007] ont pris en compte cet effet de stabilisation de la martensite dans leur modèle, en décalant directement les températures de transformation inverse de la martensite orientée f^σ par rapport à la martensite thermique f^T. Il reste encore une discussion ouverte à propos de la source de cette stabilisation. Que ce soit une relaxation d'énergie élastique stockée, ou bien un travail mécanique lié à un frottement interne, dans tous les cas, ce phénomène peut être vu comme un processus dissipatif que l'on considère proportionnel à la déformation de transformation. En introduisant le paramètre de dépendance H_s, on peut écrire :

$$\phi_{1\,stab} = -H_s|\bar{\varepsilon}^T|\dot{f} \tag{3.43}$$

où $|\bar{\varepsilon}^T|$ représente une déformation équivalente au sens de von Mises :

$$|\bar{\varepsilon}^T| = \sqrt{\frac{2}{3}\bar{\varepsilon}^T_{ij}\bar{\varepsilon}^T_{ij}} \tag{3.44}$$

Cette forme indique une dissipation d'énergie positive lors de la transformation inverse $\dot{f} < 0$. Cette expression va favoriser la transformation martensitique directe lorsque la martensite apparaît orientée, ce qui est en accord avec les observations expérimentales. Plusieurs auteurs ont en effet comparé la température de transformation déterminée en extrapolant les contraintes limites de transformation lors d'essais superélastiques, avec la température de début de transformation sans contrainte obtenue par DSC [Sittner *et al.*, 2006, Guenin, 1997] (voir figures 3.3 3.4).
Le terme $F_f^{crit}(\dot{f})$ est positif lorsque $\dot{f} > 0$ et négatif lorsque $\dot{f} < 0$, ce qui respecte la positivité de la dissipation. On considère une valeur F_f^{max} constante, et les critères de transformation directe et inverse s'écrivent, par identification :

$$\begin{aligned} -A_f &= F_f^{max} + (B_d - B)(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T| \quad \text{sens A } \rightarrow \text{ M} \\ -A_f &= -F_f^{max} + (B_r - B)(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T| \quad \text{sens M } \rightarrow \text{ A} \end{aligned} \tag{3.45}$$

La valeur de l'hystéresis d'un cycle complet est égale à la somme de ces deux dissipations. Nous considérons qu'elles sont identiques, ce qui permet de définir la température d'équilibre T_0 en identifiant le paramètre F_f^{max}.

Des essais expérimentaux [Plietsch et Ehrlich, 1997] ont montré qu'un critère isotrope est suffisant pour décrire le seuil de réorientation, ce qui implique, en supposant un paramètre constant $F_{\varepsilon^T}^{max}$:

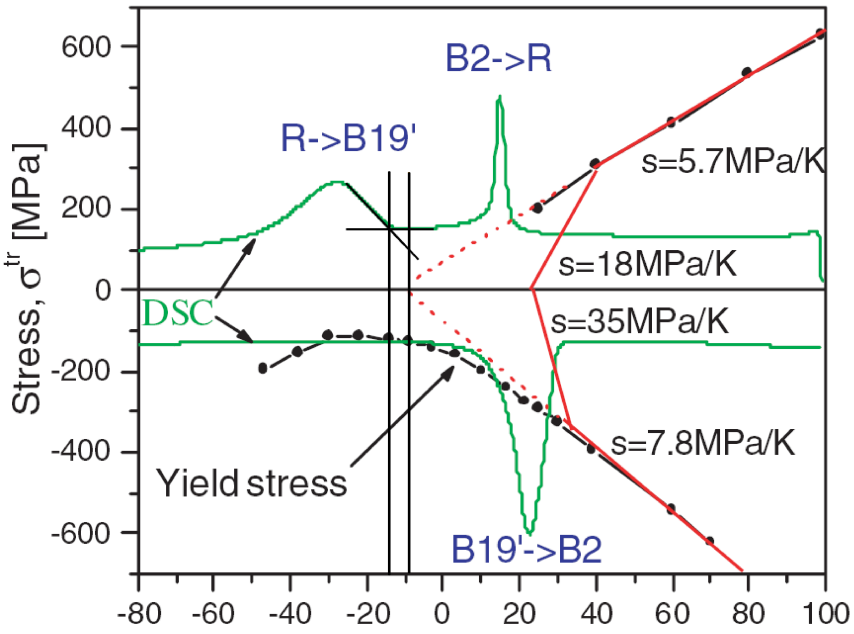

FIG. 3.3: *Comparaison entre les températures de transformation M_s extrapolées par des essais de traction, de compression avec celles obtenues par DSC, d'après [Sittner* et al.*, 2006]*

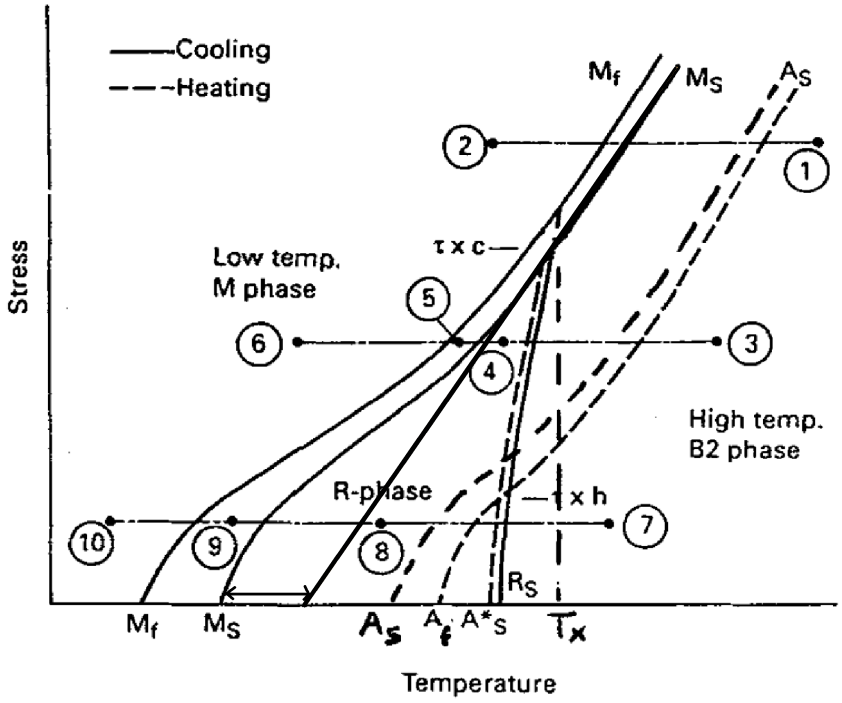

FIG. 3.4: *Pseudo-diagramme de phase avec mise en évidence du décalage des températures de début de transformation martensitique dans le diagramme de phase pour les basses contraintes, d'après [Guenin, 1997],*

$$| - A_{\varepsilon^T ij}| = f \cdot F_{\varepsilon^T}^{max} \tag{3.46}$$

$| - A_{\varepsilon^T ij}|$ correspond à la norme de von Mises en contrainte :

$$|X_{ij}|_\sigma = \sqrt{\frac{3}{2} X_{ij} X_{ij}} \tag{3.47}$$

En supposant $A_{\varepsilon^T ij} = f \cdot A^*_{\varepsilon^T ij}$, f étant supérieur à 0 on obtient :

$$| - A^*_{\varepsilon^T ij}| = F_{\varepsilon^T ij}^{max} \tag{3.48}$$

La force associée à l'accommodation n'est pas associée au potentiel de dissipation, sa valeur est alors toujours nulle :

$$- A_{\varepsilon^{twin} ij} = 0 \tag{3.49}$$

f^{FA} supérieur ou égal à 0, en écrivant $A_{\varepsilon^{twin} ij} = f^{FA} A^*_{\varepsilon^{twin} ij}$ on obtient :

$$- A^*_{\varepsilon^{twin} ij} = 0 \tag{3.50}$$

Les limitations physiques, exprimées par des bornes imposées aux valeurs des variables internes, doivent être prises en compte dans l'expression des forces thermodynamiques. Une solution est de considérer des multiplicateurs de Lagrange pour tenir compte de ces limitations.
Nous introduisons donc λ_0 pour prendre en compte la limitation $f \geqslant 0$:

$$\lambda_0 = 0 \text{ si } f \geqslant 0, \quad \lambda_0 > 0 \text{ sinon} \tag{3.51}$$

λ_1 permet d'assurer la condition $f \leqslant 1$

$$\lambda_1 = 0 \text{ si } f \leqslant 1, \quad \lambda_1 > 0 \text{ sinon} \tag{3.52}$$

λ_2 assure la dernière condition $|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \leqslant \varepsilon^T_{MAX}$

$$\lambda_{2ij} = 0 \quad \text{si } |\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \leqslant \varepsilon^T_{MAX}, \quad \lambda_2 > 0 \text{ sinon} \tag{3.53}$$

On peut alors réécrire l'expression modifiée F_k des forces thermodynamiques :
– les forces de transformation, liées à la variable f :

$$\begin{aligned} F_f &= -A_{f\, A\to M} - \lambda_0 - \lambda_1 \\ &= \Sigma_{ij} \bar{\varepsilon}^T_{ij} - B\,(T - T_0) - \frac{1}{2} H^T_\varepsilon \varepsilon^T_{ij} \varepsilon^T_{ij} - H_f f - \lambda_0 - \lambda_1 \end{aligned} \tag{3.54}$$

– la force d'orientation, liée à à variable $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$:

$$F_{\varepsilon^T_{ij}} = -A^*_{\varepsilon^T_{ij}} - \lambda_2 = \Sigma^D_{ij} - f H^T_\varepsilon \varepsilon^T_{ij} - \lambda_{2ij} \tag{3.55}$$

– la force d'accommodation des macles, liée à $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$:

$$F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}} = -A^*_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}} = \Sigma^D_{ij} - H_{twin}\bar{\varepsilon}_{kl}^{twin} \tag{3.56}$$

Nous avons obtenu ici les lois d'évolution des variables internes considérées, mais plusieurs points clés du comportement des AMF, tels les chargements partiels et la dissymétrie traction-compression, ne sont inclus dans la modélisation. Il est alors nécessaire de modifier les critères obtenus ici afin de tenir compte de ces comportements spécifiques.

3.1.5 Chargements partiels

Un modèle de comportement des AMF doit pouvoir décrire les chargements partiels mécaniques, thermiques ou thermomécaniques. Lors de ces cycles, la fraction volumique de martensite n'atteint pas sa valeur à saturation (0 ou 1 suivant le sens de la transformation). Le type d'alliage (base cuivre ou NiTi), les conditions d'élaboration de l'AMF (écrouissage, traitement thermique) et sa composition chimique influent fortement le comportement observé au cours de chargements partiels. Il faut donc définir une formulation suffisamment générale permettant de s'adapter au matériau considéré. Plusieurs auteurs ont proposé des formulations permettant de prendre en compte les chargements partiels [Tanaka *et al.*, 1995, Gillet *et al.*, 1998, Bouvet *et al.*, 2004, Peultier, 2005, Bo et Lagoudas, 1999b]. La figure 3.5 résume les différentes stratégies proposées. Le choix adopté ici s'inspire de la formulation proposée par Peultier. La formulation de Bouvet est plus précise, mais elle nécessite la mise en mémoire d'un nombre important de paramètres correspondant à l'histoire du chargement, ce qui augmente sensiblement le temps de calcul pour des structures complexes.
La formulation de Peultier repose sur la détection de points mémoire, lorsque le sens de la transformation s'inverse. On note alors la valeur de la force thermodynamique et la fraction volumique de martensite correspondante. Une nouvelle fonction de charge est alors définie, en introduisant deux fonctions, que nous présentons ici sous la forme d'une fonction d'écrouissage cinématique κ_f et d'une fonction d'écrouissage isotrope Γ_f. Ces deux fonctions dépendent d'un paramètre d'évolution de la transformation γ_f :

$$\gamma_f = \frac{|f - f^{mem}|}{f^{obj} - f^{mem}} \tag{3.57}$$

f^{mem} est la valeur de la fraction volumique mémorisée lors du changement de sens, et f^{obj} représente la fraction volumique de martensite limite de la boucle courante (1 lorsque la transformation est activée dans le sens austénite → martensite, et 0 dans le sens inverse) Ces fonctions d'écrouissage s'écrivent :

$$\kappa_f = (1 - \gamma_f)\, F_f^{mem} \tag{3.58}$$

$$\Gamma_f = (1 - \gamma_f)\, F_f^{min} + \gamma_f F_f^{max} \tag{3.59}$$

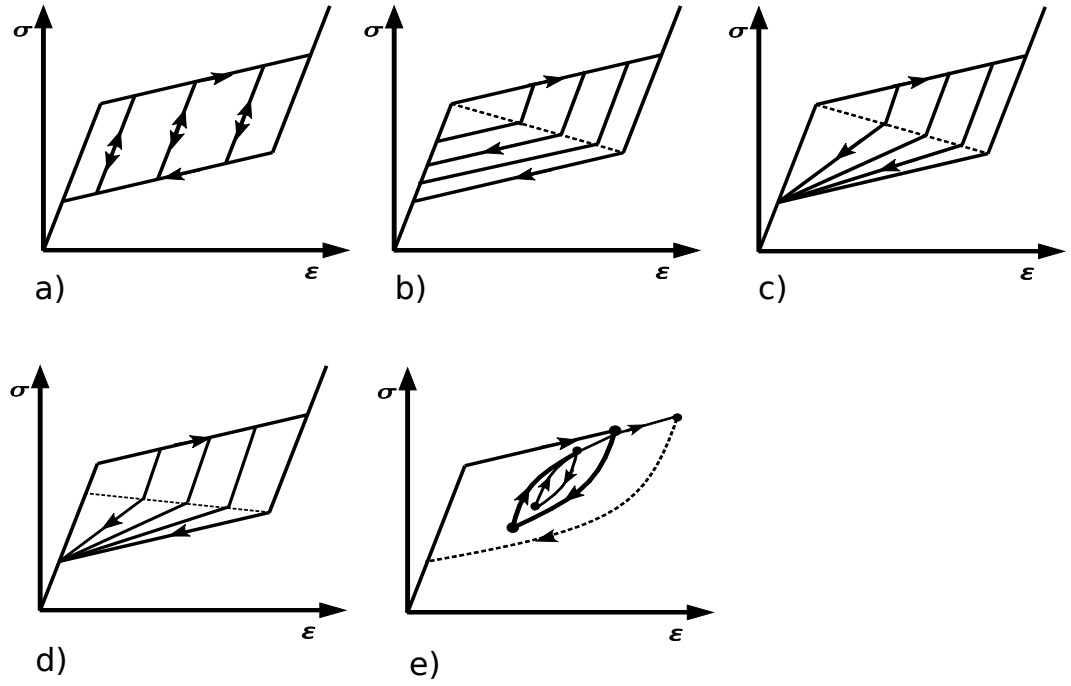

FIG. 3.5: *Stratégies de formulation des boucles internes : a) sans boucles internes, b) d'après [Tanaka* et al.*, 1995], c) d'après [Gillet* et al.*, 1998], d) d'après [Peultier, 2005], e) d'après [Bouvet* et al.*, 2004]*

F_f^{mem} correspond à la valeur de la force thermodynamique mémorisée lors de la dernière bifurcation observée, diminuée de F_f^{min} (voir figure 3.6). F_f^{min} et F_f^{max} définissent la forme des boucles internes.
Les critères de transformation directe et inverse deviennent :

$$\begin{aligned} F_f - \kappa_f &= \Gamma_f + (B_d - B)\cdot(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T| \quad \text{A} \rightarrow \text{M} \\ F_f - \kappa_f &= -\Gamma_f + (B_r - B)\cdot(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T| \quad \text{M} \rightarrow \text{A} \end{aligned} \tag{3.60}$$

Remarque : Quand $F_{min} = (B_r - B_d)(T - T_0)$ on retrouve le critère de Gillet [Gillet *et al.*, 1998], et quand $F_{min} = F_{max}$ on retrouve le comportement sans boucles internes. Au début du chargement, la valeur de F_f^{mem} vaut $-F_f^{max} + F_f^{min}$ (voir figure 3.6).

3.1.6 Dissymétrie traction-compression

Une dissymétrie de comportement entre la traction et la compression est observée dans les AMF. Une analyse micromécanique pour les AMF cuivreux a montré que cette dissymétrie était due à la faible symétrie cristallographique de la phase martensitique [Patoor *et al.*, 1995] par rapport à la phase austénitique, ce qui implique que les déformations de transformation à saturation dépendent de la direction de chargement. Il est alors nécessaire de décrire une surface seuil dans l'espace des déformations principales qui tienne compte de cette dissymétrie. D'un point de vue macroscopique, les mêmes auteurs ont montré qu'une

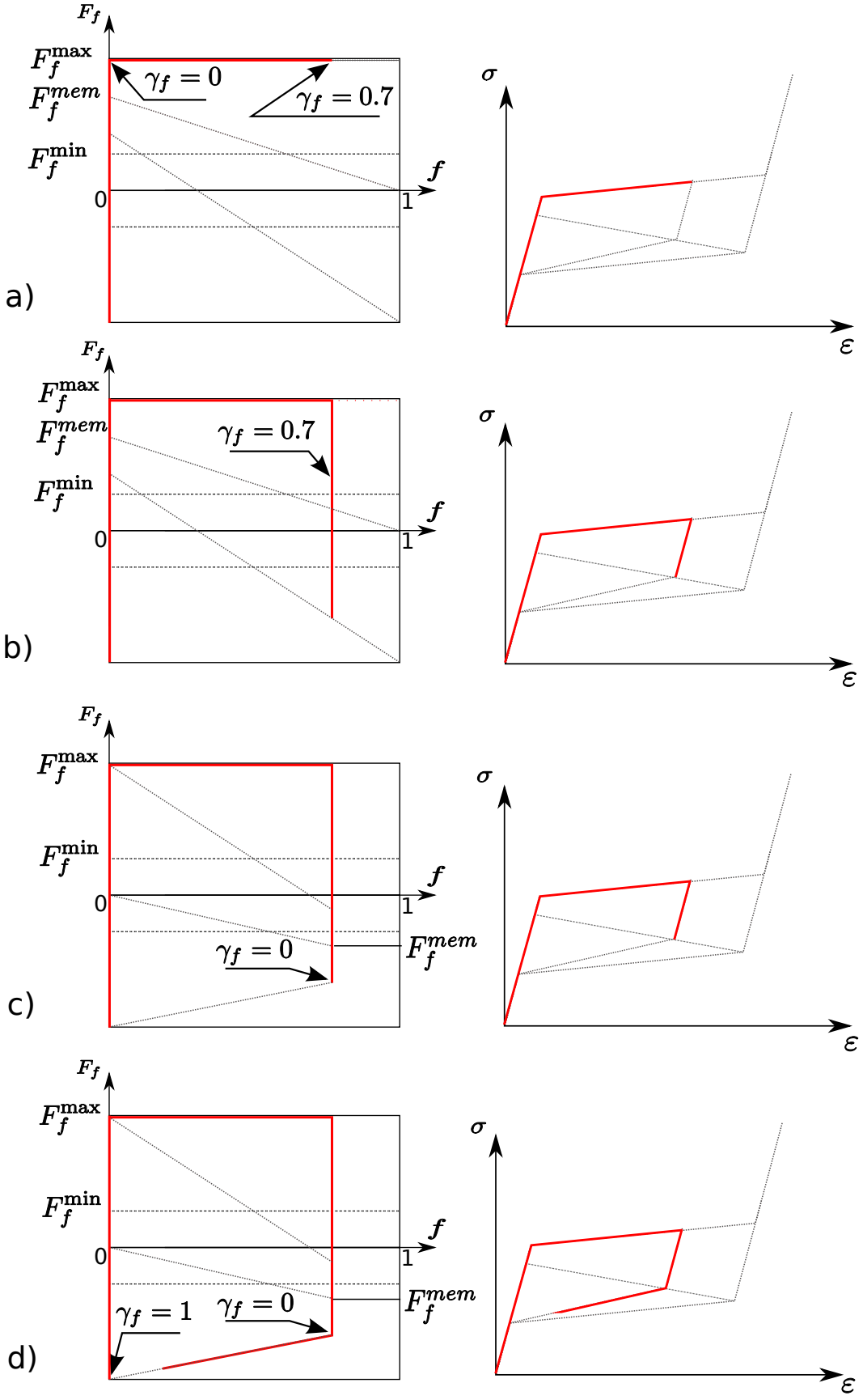

FIG. 3.6: *Evolution de la variable d'évolution de la transformation γ_f lors d'un chargement partiel superélastique*

surface de transformation exprimée dans l'espace des contraintes, fonction du second (J_2) et du troisième (J_3) invariant du déviateur tenseur des contraintes, permet de représenter correctement la surface de charge simulée avec un modèle micromécanique. D'autres auteurs ont, par la suite, proposé des formes de surface de charge dépendantes de ces invariants [Lexcellent et Schlomerkemper, 2006, Lexcellent *et al.*, 2006, Calloch *et al.*, 2006, Orgéas et Favier, 1998, Qidwai et Lagoudas, 2000].
Une expression de la déformation maximale de transformation, fonction du deuxième et du troisième invariant du tenseur des déformations moyennes de transformation, permet aussi de définir une surface de transformation. On peut alors, en une seule formulation, prendre à la fois en compte la limitation physique de la déformation de transformation, et le comportement dissymétrique dans l'espace des contraintes. Peultier [Peultier, 2005] a proposé une forme de déformation de transformation de ce type, mais la convexité de la surface de charge résultante dans l'espace des contraintes n'était pas assurée. Bouvet [Bouvet *et al.*, 2004] a lui aussi proposé une forme de déformation équivalente de transformation, qui dépendait du tenseur des contraintes, ce qui imposait d'utiliser une forme approchée. Ces formulations ne dépendent pas du type de chargement effectué (à partir de martensite autoaccomodée ou lorsque la martensite apparaît bien orientée). La définition d'une nouvelle expression de la déformation de transformation maximale est alors nécessaire. Nous rappelons l'expression du critère de type Prager exprimé par Patoor *et al.* [Patoor *et al.*, 1995], qui est fonction des 2^{eme} et 3^{eme} invariants du déviateur des contraintes :

$$F(J_2, J_3, K) = J_2 \left(1 + \beta \frac{J_3}{{J_2}^{\frac{3}{2}}}\right) - K_\sigma^2 = 0 \tag{3.61}$$

β est un paramètre caractéristique de la dissymétrie, K_σ représente une contrainte limite, J_2 et J_3 représentent respectivement les deuxième et troisième invariants du déviateur du tenseur des contraintes, définis ainsi :

$$\begin{aligned} J_2(X) &= \frac{1}{2} X_{ij} X_{ij} \\ J_3(X) &= \frac{1}{3} X_{ij} X_{jk} X_{ki} \end{aligned} \tag{3.62}$$

Patoor *et al.* [Patoor *et al.*, 1996] ont montré que ce critère permettait de représenter correctement la surface simulée à l'aide d'un modèle micromécanique. Nous supposons que pour une température donnée, la transformation se produira lorsque le produit $\sigma\varepsilon^T$ aura atteint une valeur critique. Nous pouvons alors définir une déformation critique associée à une contrainte critique, en considérant pour l'instant le cas d'une déformation de transformation induite par la formation de variantes bien orientées.

$$\sigma^{crit} \varepsilon_{SAT}^T = K \tag{3.63}$$

σ^{crit} représente la contrainte de début de transformation qui dépend, comme ε_{SAT}^T, de la direction de chargement. L'expression de la dissymétrie est alors reportée sur la déformation de transformation, en écrivant :

$$\varepsilon_{SAT}^{T} = K\left(1+\beta\frac{J_3'}{{J_2'}^{\frac{3}{2}}}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.64}$$

J_2' et J_3' représentent ici les invariants du tenseur des déformations moyennes de transformation. Cette forme n'est pas convexe quel que soit β, il faut généraliser ce critère au rang n, pour trouver un paramètre n qui assure la convexité de la surface de charge :

$$\varepsilon_{SAT}^{T} = K_{\varepsilon}\left(1+\beta\frac{J_3'}{{J_2'}^{\frac{3}{2}}}\right)^{\frac{1}{n}} \tag{3.65}$$

Les paramètres K_ε et β sont à déterminer. Dans le cas de la traction et de la compression uniaxiale, en considérant ε_{trac}^{T} et ε_{comp}^{T} les déformations à saturation observées respectivement en traction et en compression, la déformation de transformation s'exprime par :

$$\varepsilon_{ij}^{T} = \varepsilon_{trac}^{T}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}\end{pmatrix} \tag{3.66}$$

$$\varepsilon_{ij}^{T} = \varepsilon_{comp}^{T}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix} \tag{3.67}$$

On en déduit K_ε :

$$K_{\varepsilon} = \varepsilon_{trac}^{T}\left(1+\frac{\beta}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{n}} \tag{3.68}$$

α est une constante qui apparaît lors du calcul de J_2' et J_3' en sollicitation uniaxiale. On obtient :

$$\alpha = 4\cdot\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{3.69}$$

Le paramètre de dissymétrie β s'écrit :

$$\beta = \left(\frac{1-\gamma}{\gamma+1}\right)\alpha \tag{3.70}$$

En considérant γ le rapport des déformations de transformation à saturation en compression et en traction uniaxiales, élevé au rang n :

$$\gamma = \left(\frac{\varepsilon_{comp}^{T}}{\varepsilon_{trac}^{T}}\right)^{n} \tag{3.71}$$

β et K_ε sont les paramètres caractéristiques de la dissymétrie du comportement, mais nous avons montré qu'ils s'expriment en fonction des déformations de transformation à saturation en traction et en compression, plus faciles à identifier. Il est important de noter que cette formulation, qui limite la valeur de la déformation de transformation macroscopique, permet

d'obtenir une surface de charge dissymétrique dans l'espace des contraintes équivalente à celle exprimée par Patoor *et al* [Patoor *et al.*, 1995].

On peut alors réécrire l'équation 3.16 en tenant compte de la dissymétrie dans l'expression de la déformation à saturation, on obtient alors la déformation de transformation maximale qui dépend à la fois du type de martensite et de la direction de chargement :

$$\varepsilon^T_{MAX} = \varepsilon^T_{SAT}(J'_2, J'_3, K_\varepsilon, \beta) \cdot \left(1 - \frac{f^{FA}}{f}\eta_\varepsilon\right) \tag{3.72}$$

Si les deux déformations à saturation en traction et en compression sont égales, alors il n'y a pas de dissymétrie, et l'on montre que l'on retrouve le critère isotrope de von Mises, quel que soit n. Pour des déformations de transformation en traction $\varepsilon^T_{trac} = 0.05$ et $\varepsilon^{TFA}_{trac} = 0.04$, et en compression $\varepsilon^T_{comp} = 0.04$, les figures 3.7 et 3.8 montrent la forme des surfaces de transformation (dans le cas de la superélasticité) et d'orientation (à partir de l'état martensitique autoaccommodé) obtenues avec cette formulation. Le paramètre de convexité n vaut ici 5.

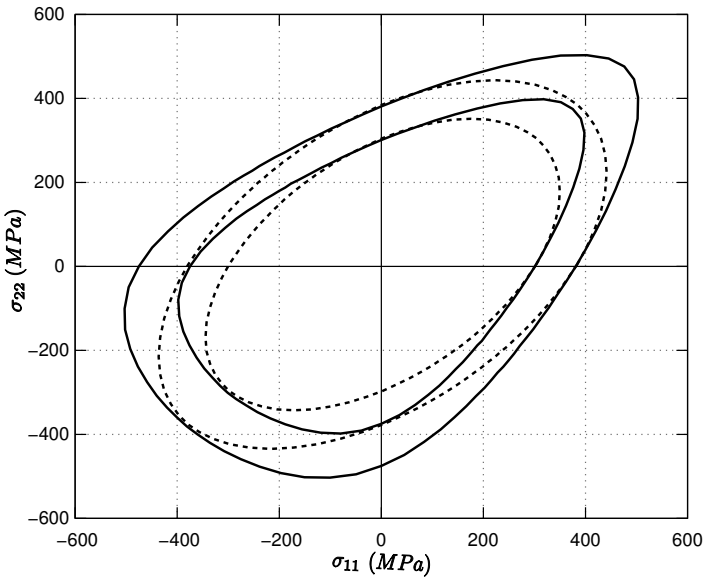

FIG. 3.7: *Surfaces de transformation initiale et finale dans l'espace des contraintes $\sigma_{11} - \sigma_{22}$ - comparaison avec une surface isotrope*

3.1.7 Conditions d'activation - lois d'évolutions

L'expression du potentiel de dissipation et du formalisme des boucles internes permet d'obtenir les conditions d'activation et les lois d'évolution du système :

– pour la force de transformation :

Si $F_{f\,A\to M} - \kappa_f = \Gamma_f + (B_d - B)(-T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T|$ **et** $|\frac{d|F_{f\,A\to M} - \kappa_f|}{dt}| > 0$

alors la force thermodynamique directe austénite → martensite est active. Dans ce

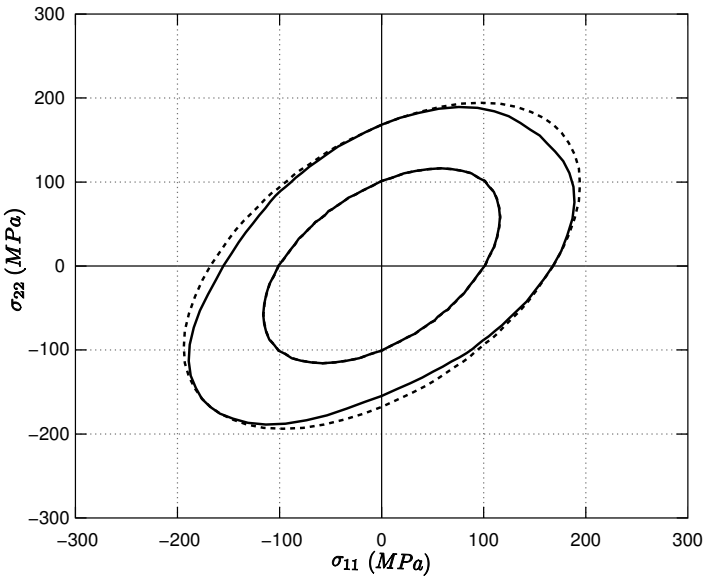

FIG. 3.8: *Surfaces d'orientation initiale et finale dans l'espace des contraintes $\sigma_{11} - \sigma_{22}$ - comparaison avec une surface isotrope*

cas, $\dot{f} > 0$.

Si $F_{f_{M\to A}} - \kappa_f = -\Gamma_f + (B_r - B)(-T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T|$ **et** $|\frac{d|F_{f_{M\to A}} - \kappa_f|}{dt}| < 0$
alors la force thermodynamique directe martensite → austénite est active. Dans ce cas, $\dot{f} < 0$.

Sinon la force thermodynamique est inactive. Dans ce cas, on suppose qu'il n'y a pas d'évolution de la variable interne associée, c'est-à-dire $\dot{f} = 0$

– pour la force d'orientation :
Des essais multiaxiaux effectués par Lexcellent *et al.* [Lexcellent *et al.*, 2002] ont montré que la direction d'écoulement de la déformation de transformation est normale à la surface de transformation. On suppose alors que la direction de la vitesse de déformation moyenne de transformation s'écrit suivant une loi de normalité par rapport à sa force thermodynamique associée :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}^T_{ij} = \dot{\lambda}_\varepsilon \frac{\partial |F_{\varepsilon^T}|}{\partial F_{\varepsilon^T ij}} \tag{3.73}$$

Les conditions d'activation du mécanisme d'orientation sont définies ci-dessous :

Si $|F_{\varepsilon^T ij}| = F^{crit}_{\varepsilon^T}$ **et** $|\frac{d|F_{\varepsilon^T ij}|}{dt}| > 0$
alors la force thermodynamique est active. Dans ce cas la variable interne associée évolue, c'est-à-dire $\dot{\bar{\varepsilon}}^T_{ij} \neq 0$

Si $|F_{\varepsilon^T ij}| < F^{crit}_{\varepsilon^T}$ **ou si** $|F_{\varepsilon^T ij}| = F^{crit}_{\varepsilon^T}$ **et** $|\frac{d|F_{\varepsilon^T ij}|}{dt}| \leqslant 0$
alors la force thermodynamique est inactive.

Dans ce cas, il faut définir des lois supplémentaires pour l'évolution de la déformation moyenne de transformation. En effet, lorsque le critère d'orientation est actif, l'évolution de la déformation moyenne de transformation est définie par la force d'orientation, quelle que soit l'évolution de la fraction volumique de martensite. Mais dans le cas où l'orientation est inactive, cette déformation de transformation peut évoluer en fonction de l'évolution de la fraction volumique de martensite.

Si la transfomation est activée dans le sens direct ($\dot{f} > 0$), alors, étant donné que le critère d'orientation est inactif, la martensite qui va se former sera de structure autoaccommodée. Dans ce cas, la déformation de transformation macroscopique est constante ($\dot{E}^T = 0$), ce qui implique la condition suivante pour la déformation moyenne de transformation :

$$f\bar{\varepsilon}_{ij}^T = C^{te}, \quad \text{d'où} \quad \dot{f}\bar{\varepsilon}_{ij}^T + f\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0 \tag{3.74}$$

Si la transformation est activée dans le sens inverse ($\dot{f} < 0$), la déformation moyenne de la martensite est considérée constante. On a alors :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0 \tag{3.75}$$

Si la transformation n'est pas activée ($\dot{f} = 0$), alors la déformation moyenne de transformation est là aussi inchangée :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0 \tag{3.76}$$

Pour la force d'accommodation des macles, on a nécessairement $|F_{\varepsilon^{twin}ij}| = 0$, la variable associée $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$ va évoluer de façon à respecter cette condition.

Les différents cas possibles sont récapitulés dans le tableau 3.1.

TAB. 3.1: *Récapitulatif des cas possibles*

Transformation activée	Orientation activée	Evolution de f et $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$
non	non	$\dot{f} = 0 \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0$
non	oui	$\dot{f} = 0 \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T \neq 0$
oui	oui	$\dot{f} \neq 0 \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T \neq 0$
oui, sens direct	non	$\dot{f} \neq 0 \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T \neq 0$
oui, sens inverse	non	$\dot{f} \neq 0 \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = 0$

La fraction volumique de martensite formée autoaccommodée f^{FA} doit être définie. Cette fraction dépend de l'histoire de la transformation martensitique, en tenant compte de la valeur de la déformation de transformation de la martensite au moment où elle apparaît. On peut définir l'évolution de cette fraction en fonction de la déformation moyenne de la martensite et de la déformation maximale de la transformation à l'instant t ainsi que de l'évolution de la fraction volumique de martensite :

$$\dot{f^{FA}} = \dot{f}\frac{\varepsilon^T_{SAT} - \varepsilon^T_{eq}}{\varepsilon^T_{SAT}} \quad \text{si} \quad \dot{f} > 0 \tag{3.77}$$

Le ratio $\frac{\varepsilon^T_{sat} - \varepsilon^T_{eq}}{\varepsilon^T_{sat}}$ représente la fraction non-orientée de la martensite formée à l'instant t. La déformation de transformation équivalente ε^T_{eq} est une déformation équivalente au sens de von Mises.
La fraction volumique de martensite formée autoaccommodée est supposée répartie de façon homogène dans le VER, on a donc :

$$\frac{f^{FA}}{f} = C^{te} \quad \text{si} \quad \dot{f} \leqslant 0 \tag{3.78}$$

Les lois d'évolutions du modèle sont maintenant toutes définies, ainsi que les critères d'activation des différents mécanismes de déformation. Des limitations physiques sur les variables internes ont été intégrées dans la formulation des forces thermodynamiques. Cependant la complexité des couplages pris en compte dans le modèle ne permet pas de déterminer une solution analytique pour déterminer les variables internes. Il est alors nécessaire de définir un moyen robuste de déterminer une solution numérique de ce système d'équations, c'est-à-dire déterminer les valeurs des variables internes en respectant l'ensemble des conditions imposées pour un cas de chargement thermomécanique donné.

3.2 Intégration numérique

Afin d'effectuer des calculs de structures complexes, la loi définie dans la première partie de ce chapitre doit être implémentée dans un code de calcul de structures tel que `ABAQUS`. Il faut, pour cela, développer une routine compatible avec ce logiciel, appelée `UMAT` (pour User MATerial). Mais, dans l'optique d'analyser le comportement des AMF pour des sollicitations simples et homogènes (traction uniaxiale, cisaillement simple, etc.), de valider la loi de comportement et de déterminer rapidement les paramètres matériau, il est nécessaire de présenter le modèle sous une forme numérique générale qui puisse s'adapter à plusieurs codes de calculs, et de disposer d'un outil de test pour des trajets de chargements uniformes.
Il est aussi nécessaire de présenter le modèle de façon à le rendre le plus adaptatif possible, et en permettre l'évolution. Nous avons pour cela choisi de travailler avec le langage orienté objet `C++`, qui permet d'utiliser des fonctions génériques et des objets évolués, afin de faciliter le support et la compréhension de la routine. De plus, des outils mathématiques regroupés dans une bibliothèque nommée `SIMULA+` [1], écrite en `C++`, est supportée au laboratoire et au LAMAV de Valenciennes. Cette bibliothèque a été réalisée dans le but de faciliter la résolution numérique de lois de comportement et de permettre des simulations numériques de type éléments finis. Une interopérabilité et une compatibilité avec d'autres lois de comportement et d'autres schémas d'intégration numérique est alors possible, et pourra être très utile lors de développements futurs.

[1] SIMULA+, URL http ://www.univ-valenciennes.fr/lamav/Simula+/

3.2.1 Mise en équation du problème

La loi macroscopique définie précédemment peut être considérée comme un système de plusieurs équations à résoudre, chaque équation correspondant à l'équilibre d'une force thermodynamique. Les variables qui sont utilisées dans la résolution de ces équations sont :
– Les variables de pilotage : E_{ij} et T
– Les variables inconnues : Σ_{ij}, f, $\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}$, $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$
Lors d'un problème aux conditions limites mixtes en contraintes et en déformations, une estimation de la déformation sera effectuée par un schéma de prédiction élastique-correction. La plupart des codes éléments finis utilisent ce type de résolution. Afin de résoudre notre système, il est impératif de choisir le schéma d'intégration le plus adapté aux exigences que l'on s'est fixées. D'une manière générale, un schéma d'intégration est choisi suivant les critères suivants :

1. La précision de la solution.
2. Le temps de calcul nécessaire.
3. La stabilité de la solution.

Plusieurs schémas d'intégration numérique sont possibles pour résoudre des problèmes non linéaires de ce type (explicite, implicite, semi-implicite). Dans tous les cas le problème (chargement thermomécanique) est discrétisé en n incréments de temps. On cherche alors, à partir de l'état à l'incrément n, les variables inconnues à l'incrément $n+1$. La loi de comportement présentée implique plusieurs forces thermodynamiques qui sont représentées par un système d'équations à résoudre. On cherche à simuler des chargements thermomécaniques complexes, non-proportionnels, ce qui implique une bonne précision et une stabilité inconditionnelle de la solution. De plus, de fortes bifurcations de comportement sont présentes. Le schéma d'intégration implicite est donc naturellement le meilleur choix, car l'utilisation d'incréments de temps importants permettent de diminuer le temps de calcul lorsque des modèles de comportements complexes sont implémentés dans un code éléments finis. Ce point a par exemple été vérifié par Haddag lors de l'intégration de lois élastoplastiques dans `ABAQUS` [Haddag, 2007].

3.2.2 Intégration implicite

Le problème présenté précédemment peut être écrit de façon générale comme un système d'équations $\mathcal{F}(X,Y)$, qui lie des variables inconnues X et des variables de pilotage Y. A chaque début d'incrément, ce système est équilibré. On peut trouver une forme de $\mathcal{F}$, notée $\mathcal{R}$ qui vérifie :

$$\mathcal{R}(X,Y) = 0 \tag{3.79}$$

La méthode de perturbation consiste à introduire un incrément ΔY de manière à déséquilibrer le système. On obtient alors la forme générale suivante :

$$\mathcal{R}(X, Y+\Delta Y) \neq 0 \tag{3.80}$$

Un algorithme de résolution numérique est alors utilisé afin de déterminer l'incrément des variables inconnues ΔX qui permet d'équilibrer le système, et d'obtenir :

$$\mathcal{R}\left(X + \Delta X, Y + \Delta Y\right) = 0 \tag{3.81}$$

Si un des mécanismes de déformation (transformation ou orientation) est activé, ce qui indique un comportement non-élastique, alors l'algorithme va effectuer des itérations jusqu'à ce que le système soit équilibré. Ce type d'algorithme, appelé prédiction élastique / correction , a été largement utilisé en plasticité (voir par exemple [Simo et Hughes, 2000, Chaboche et Cailletaud, 1996]).
Les codes éléments finis décomposent la consigne en température et en déformation macroscopique, en incréments de déformations et de température. On connait alors, à l'incrément $n+1$, les incréments de déformation ΔE et de température ΔT, E et T étant les variables de pilotage. Afin de ne pas alourdir les notations, quand l'incrément n'est pas spécifié la variable est considérée à l'état $n+1$.

3.2.3 Gestion des saturations

La gestion numérique des limitations physiques est un problème non trivial. En effet, si l'expression des multiplicateurs de Lagrange permet la définition d'un système d'équations dans tous les cas, lorsque les multiplicateurs de Lagrange prennent une valeur positive les fonctions thermodynamiques ne sont pas continues au point de saturation. Une recherche de solutions numériques ne peut prendre en compte ces discontinuités. Il faut donc obtenir des fonctions continues pour l'expression du système d'équations, en définissant une forme des multiplicateurs de Lagrange dépendante de la variable associée, ce qui garantit la continuité des fonctions thermodynamiques. Plusieurs formes sont possibles, qui ont leurs avantages et leurs inconvénients. Une première forme est définie ci-dessous :

$$\lambda_0 = \alpha_0 \frac{f-1}{f} \tag{3.82}$$

$$\lambda_1 = \alpha_1 \frac{f}{1-f} \tag{3.83}$$

$$\lambda_{2\ ij} = \alpha_2 \left(\frac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\varepsilon^T_{MAX} - \varepsilon^T_{eq}} \right) \tag{3.84}$$

Ce type de formulation a l'avantage d'introduire des arrondis de transformation et d'orientation lorsque les valeurs des variables internes sont proches de leurs limites respectives. Les courbes de comportement simulées ne sont alors plus multilinéaires. Par contre dans le cas de la limite d'orientation, lors de chargements non-proportionnels la valeur maximale de déformation de transformation évolue au cours du chargement. Dans de rares cas, il peut alors arriver que la déformation moyenne de transformation déterminée à l'incrément $n+1$ dépasse sa valeur maximale. Pour gérer ce cas, une formulation similaire à celle utilisée pour la gestion

des contacts dans ABAQUS [Simulia, 2008] est alors utilisée en introduisant deux paramètres, p_2 et c_2 :

$$\lambda'_{2\ ij} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \frac{p_2}{e-1} \cdot \left(\frac{\frac{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\varepsilon^T_{MAX}} - 1}{c_2} + 1 \right) \left(exp \left(\frac{\frac{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\varepsilon^T_{MAX}} - 1}{c_2} + 1 \right) - 1 \right) \tag{3.85}$$

Dans ce cas, il n'y a plus d'asymptote verticale au niveau de la valeur à saturation, mais une forte pente qui permet d'équilibrer la solution en cas de dépassement. La figure 3.9 illustre le problème en comparant, pour une valeur de déformation maximale de 5%, les deux fonctions λ_2 et λ'_2 définies. Cette expression de la limitation remplace alors la limitation liée à la définition d'une déformation maximale de transformation (équation 3.17), en supposant un écrouissage très important au voisinage de cette déformation maximale. Ce choix permet de déterminer une solution qui ne dépasse que de très peu la valeur de déformation de transformation maximale, dans de rares cas. Cette formulation est utilisée lorsque des trajets de chargement non-proportionnels sont attendus, en particulier lors de l'utilisation d'un code de calculs par éléments finis.

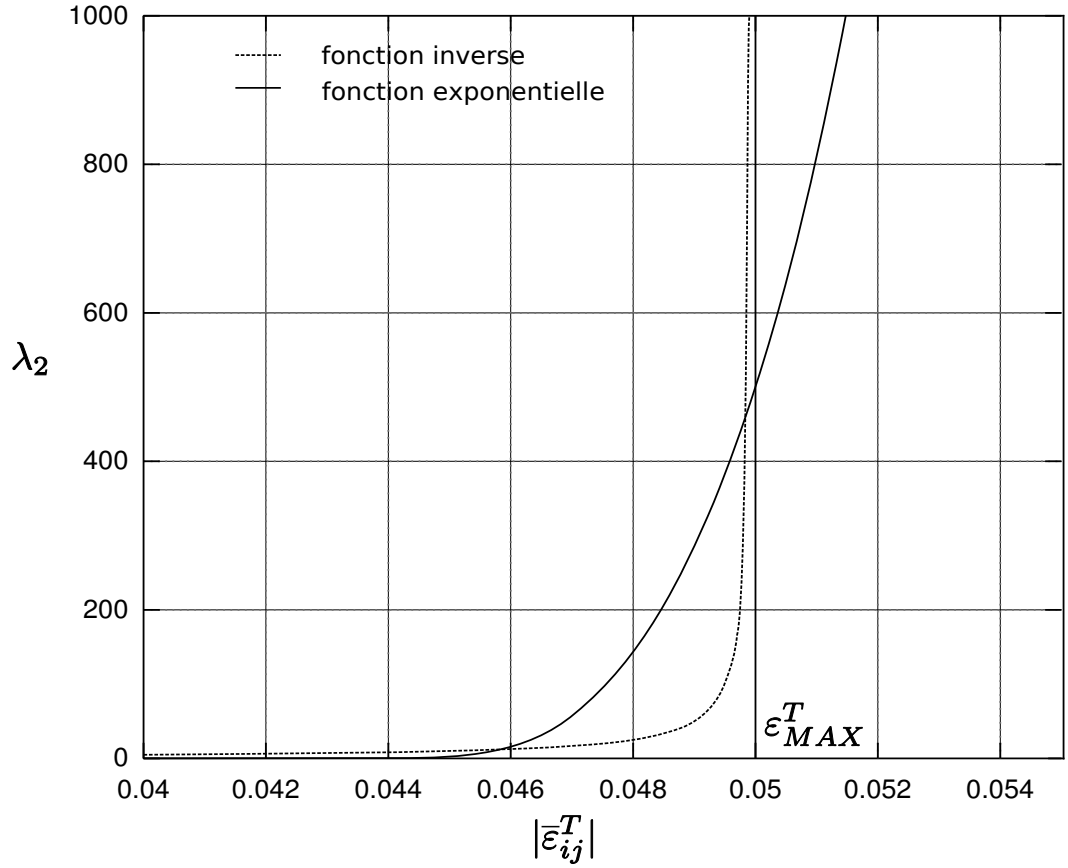

FIG. 3.9: *Comparaison des deux stratégies de limitations pour la variable* $\bar{\varepsilon}^T_{ij}$.

3.2.4 Expression du système d'équations, calcul des résidus

Nous avons vu qu'il existe plusieurs cas possibles, suivant l'activation du critère de transformation et/ou du critère d'orientation. L'expression d'un système particulier pour chaque cas est une solution, mais cela implique de définir une méthode de résolution pour chaque système. Le choix est fait ici de définir un système d'équations généralisé, sous forme de résidus à équilibrer. Le système est composé de :

1. Un résidu de transformation R_f, scalaire
2. Un résidu d'orientation R_ε^T, scalaire
3. Un résidu de direction de la déformation de transformation R_d, tensoriel d'ordre 2.
4. Un résidu élastique R_s qui vient de l'équilibre thermoélastique, tensoriel d'ordre 2.

Il n'y a aucun résidu sur la variable $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$ et sa force thermodynamique associée, car on peut directement exprimer sa valeur en fonction de σ_{ij}^D et de H_{twin}. On peut alors exprimer la condition sur $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$ dans le résidu élastique, ce qui respecte le schéma d'intégration implicite car cette variable est réactualisée à chaque itération. On définit pour cela un tenseur H_{ijkl}^{twin}, tel que $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin} = H_{ijkl}^{twin}\ \sigma_{kl}^D$.

Une prédiction élastique va permettre de déterminer une estimation de la contrainte à l'incrément $n+1$. Notons que dans le cas de l'intégration numérique, cette estimation peut mener à une expression des forces thermodynamiques supérieures à la dissipation correspondante, ce qui permet de détecter l'activation d'un mécanisme de déformation. A la fin de l'incrément, une solution est obtenue si les résidus sont équilibrés, à une erreur numérique près. Les différentes étapes de la résolution numérique sont les suivantes :

Etape 1 : prédiction élastique : $\Sigma_{ij}^{n+1} = \Sigma_{ij}^n + E_{ijkl}\Delta E_{kl}$

Etape 2 : estimation des forces thermodynamiques F_f^{n+1}, $F_{\varepsilon^T}^{n+1}$, à l'aide de la prédiction élastique

Etape 3 : tests d'activation des mécanismes de transformation et d'orientation

Si $F_f - \kappa_f > \Gamma_f + (B_d - B)(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}_{eq}^T|$ **et** $\Delta F_{f\,A\to M} > 0$, la transformation est activée dans le sens direct ($Tr = 1$).

Si $F_f - \kappa_f < -\Gamma_f + (B_r - B)(T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}_{eq}^T|$ **et** $\Delta F_{f\,M\to A} < 0$, la transformation est activée dans le sens inverse ($Tr = -1$).

Sinon , la transformation n'est pas activée ($Tr = 0$).

Si $|F_\varepsilon^T| > F^{max}{}_{\varepsilon^T}$, l'orientation est activée ($O = 1$).

Sinon , l'orientation n'est pas activée ($O = 0$).

Etape 4 : test de changement de sens en transformation

Si $Tr^{n+1} \neq Tr^n$, alors il y a un changement de sens, les variables γ_f et F_f^{mem} sont réactualisées.

Sinon , il n'y a pas de changement de sens.

Etape 5 : définition du système d'équations à résoudre :

Si $Tr = 1$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f + (B_d - B)(T - T_0) + H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d\ ij} = \Delta\varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T_{ij}}}{\left|F_{\varepsilon^T_{ij}}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.86}$$

Si $Tr = -1$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = -F_{f\,M\to A} + \kappa_f + (B_r - B)(T - T_0) - \Gamma_f - H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d\ ij} = \Delta\varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T_{ij}}}{\left|F_{\varepsilon^T_{ij}}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.87}$$

Si $Tr = 0$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = \Delta f \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d\ ij} = \Delta\varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T_{ij}}}{\left|F_{\varepsilon^T_{ij}}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.88}$$

Si $Tr = 1$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f + (B_d - B)\dot{(}T - T_0) + H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta|E^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta E^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{2}{3}\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.89}$$

Si $Tr = -1$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = R_f = -F_f + \kappa_f - \Gamma_f - (B_r - B)\dot{(}T - T_0) - H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq}| \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{2}{3}\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.90}$$

Si $Tr = 0$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = \Delta f \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{2}{3}\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{3.91}$$

Avec, dans chaque cas, l'équation supplémentaire $\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} = H^{twin}_{ijkl}\ \sigma^D_{kl}$. Le système d'équations à résoudre fait alors apparaître les inconnues suivantes :

- l'incrément de la fraction volumique de martensite Δf
- l'incrément de déformation moyenne de transformation $\Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}$
- le multiplicateur $\dot{\lambda}_{\varepsilon^T}$
- l'incrément de contrainte $\Delta\sigma$

Ces variables sont les inconnues nommées ΔX. Il faut aussi nécessairement prendre en compte la condition $\varepsilon^T_{kk} = 0$. Pour cela, il faut supprimer une relation sur l'un des termes diagonaux du résidu de direction de transformation, et l'exprimer en fonction des deux autres termes diagonaux.

Etape 6 : résolution du système d'équations

Le système est résolu en utilisant un algorithme de Newton-Raphson. Les variables de pilotage exprimées à l'état Y^{n+1} vont déséquilibrer le système, ce qui induit $\mathcal{R}(X, Y + \Delta Y) \neq 0$. La prédiction élastique donne une première estimation de ΔX, que l'on note ΔX^0. On obtient alors le système $\mathcal{R}\left(X + \Delta X^0, Y + \Delta Y\right) \neq 0$.

L'algorithme de Newton Raphson utilise l'approximation du développement de Taylor au premier ordre au voisinage d'un état $X + \Delta X_0$. Il faut pour cela déterminer les dérivées partielles de chaque résidu par rapport aux variables inconnues. Dans le schéma d'intégration choisi, notons que nous avons exprimé le résidu de la direction de la transformation en fonction d'un multiplicateur λ_ε, et de la direction d'écoulement exprimée en fonction de la force d'orientation ou de la variable d'orientation, suivant l'état

d'activation du processus de réorientation. Ce multiplicateur est aussi une inconnue du système.

Le schéma de Newton Raphson est le suivant :

1. Initialement, le système est déséquilibré par l'incrément des variables de pilotage et la prédiction élastique

$$\mathcal{R}\left(X + \Delta X^0, Y + \Delta Y\right) \neq 0 \tag{3.92}$$

2. L'approximation de Newton est un développement au premier ordre du système

$$\mathcal{R}\left(X + \Delta X^{i+1}, Y + \Delta Y\right) = \mathcal{R}\left(X + \Delta X^i, Y + \Delta Y\right) + \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \Delta X}(\Delta X^i)(\Delta X^{i+1} - \Delta X^i) \tag{3.93}$$

   $\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \Delta X}$ est le jacobien $\mathcal{J}$ du système.

3. On en déduit $(\Delta X^{i+1} - \Delta X^i)$:

$$(\Delta X^{i+1} - \Delta X^i) = J^{-1}\left(-\mathcal{R}\left(X + \Delta X^i, Y + \Delta Y\right)\right) \tag{3.94}$$

4. La correction obtenue est amortie d'un facteur $\alpha(X_i)$ pour que les variables internes restent dans leurs bornes (voir explications ci-dessous).

5. Mise à jour de l'incrément :

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

6. Tant que $\mathcal{R}\left(X + \Delta X^{i+1}, Y + \Delta Y\right) \neq 0$ à un résidu numérique près, $i \leftarrow i + 1$, ce qui relance la boucle.

Le calcul du jacobien est détaillé en annexe.

Les expressions des limitations font apparaître des asymptotes verticales aux fonctions de forces thermodynamiques pour les valeurs extrêmes des variables internes. La recherche d'une solution basée sur un algorithme de Newton-Raphson utilise la dérivée au premier ordre pour déterminer une solution approchée. Lorsque l'on est proche de ces points saturés, la solution approchée déterminée peut donc dépasser l'intervalle de définition des variables, et se trouver dans un cas indéterminé. Il est nécessaire de déterminer une méthode de résolution de ces cas saturés, qui impose de rester dans les bornes de définition des variables. Une solution (adoptée par Peultier [Peultier, 2005]) est d'amortir le vecteur solution par un facteur α compris entre 0 et 1. Si l'amortissement est nécessaire, on considère un facteur $\alpha = 0,5$. Sinon, $\alpha = 1$

Il faut alors itérer l'amortissement jusqu'à ce que le vecteur solution respecte à la fois les conditions sur f et sur $\vec{\varepsilon}_{ij}^T$. Le vecteur solution tend vers un vecteur solution nul, de sorte que l'on s'assure de toujours rester dans les bornes définies.

Mais cette solution n'assure pas la convergence de l'incrément, car l'amortissement de toutes les variables peut bloquer la résolution lorsque l'une de celles-ci est proche de ses bornes. De plus la contrainte, qui n'est pas bornée, est elle aussi amortie. Une autre solution est d'amortir uniquement les variables qui sont en dehors de leurs bornes. Dans ce cas, le nouveau vecteur solution n'est plus proportionnel à celui obtenu en sortie de la boucle d'itérations de Newton-Raphson, mais cela n'influe pas sur la convergence du système et permet d'augmenter la rapidité de l'algorithme. Le facteur α dépend alors de la variable X_i. De plus, lors de l'utilisation du multiplicateur de Lagrange exponentiel pour la gestion de chargements non-proportionnels, il n'y a pas d'amortissement de la déformation moyenne de transformation, car on autorise un léger dépassement de la valeur maximale.

Pour sortir de la boucle d'itérations du système, il est nécessaire de déterminer une erreur numérique ζ qui soit caractéristique de l'approximation $\mathcal{R} \approx 0$. Cette estimation de l'erreur est importante, car elle détermine la convergence du sytème. Ainsi, une solution est acceptable si :

$$\zeta < \iota \tag{3.95}$$

où ι est une constante quasi-nulle. La forme donnée à ζ et la limite ι sont déterminantes dans la vitesse de convergence du système, et la précision de la solution. Afin de s'assurer d'une précision constante au cours des simulations, il est impératif de déterminer une erreur adimensionelle qui ne dépende pas de la taille d'incréments choisie. Le calcul de ζ est donné en annexe.

Etape 7 : Module tangent cohérents

Dans un schéma d'intégration implicite, comme celui implémenté dans `ABAQUS / STANDARD`, il est nécessaire de déterminer les modules tangents mécaniques, ou thermiques et mécaniques dans le cas d'un problème couplé, afin de déterminer une solution implicite au problème de l'équilibre de la structure. Ces modules tangents agissent comme l'expression d'une partie du jacobien de la structure entière. La forme du module tangent déterminée en fin d'incrément n'influe pas sur la précision de la solution (si une solution est trouvée), mais peut influencer de manière significative la vitesse et les conditions de convergence du problème, comme l'ont montré Simo et Taylor [Simo et Taylor, 1985], et Chaboche et Cailletaud [Chaboche et Cailletaud, 1996]. Pour obtenir des performances optimales, il faut renvoyer un module tangent cohérent avec le schéma d'intégration utilisé pour déterminer les variables inconnues au nœud considéré. Dans le cadre de la loi proposée ici, le problème est thermomécanique mais on considère une température uniforme, donc la température n'est pas une inconnue du problème, comme dans le cas de conditions aux limites en températures (cas adiabatique, convexion imposée, etc.). Il faut dans ce cas uniquement renvoyer le module tangent mécanique.

Le module tangent correspond à l'approximation linéaire de la fonction reliant la

contrainte macroscopique à la déformation macroscopique, au voisinage de la solution à $t = n + 1$ (fin d'incrément). Si l'on suppose une perturbation δE_{ij}, la perturbation correspondante en contrainte $\delta\Sigma_{ij}$ sera déterminée par :

$$\delta\Sigma_{ij} = \mathcal{L}_{ijkl}\delta E_{kl} \tag{3.96}$$

où $\mathcal{L}_{ijkl}$ est le module tangent :

$$\mathcal{L}_{ijkl} = \frac{\delta\Sigma_{ij}}{\delta E_{kl}} \tag{3.97}$$

Dans le cas d'une intégration implicite en utilisant une résolution de type Newton-Raphson, le module tangent peut directement être déterminé à partir du jacobien calculé au dernier incrément. Une petite perturbation des variables de pilotage $\delta\Delta Y$ va modifier les variables inconnues d'une valeur $\delta\Delta X$. En respectant l'équilibre de la solution, on peut écrire :

$$\delta\mathcal{R} = 0 \tag{3.98}$$

$$\mathcal{J}_X\delta\Delta X + \mathcal{J}_Y\delta\Delta Y = 0 \tag{3.99}$$

$$\delta\Delta X = -\mathcal{J}_X^{-1}\mathcal{J}_Y\delta\Delta Y \tag{3.100}$$

avec les jacobiens $\mathcal{J}_X = \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\Delta X}$ et $\mathcal{J}_Y = \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\Delta Y}$.
Comme nous nous intéressons uniquement au module tangent mécanique, on exprime directement $\mathcal{J}_E$ qui concerne les termes dépendants de la déformation macroscopique : $\mathcal{J}_E = \frac{\partial R_s}{\partial\Delta E} = -I_{ijkl}$.
J_X^{-1} est calculé pour chaque itération de Newton-Raphson, en particulier pour le dernier incrément. On extrait $\mathcal{J}_\Sigma$, qui vaut $\mathcal{J}_\Sigma = \frac{\partial\Sigma}{\partial R_s}$.
Le module tangent cohérent mécanique $\mathcal{L}$, qui est extrait de $-\mathcal{J}_X^{-1}\mathcal{J}_Y$, vaut alors :

$$\mathcal{L}_{ijkl} = \frac{\partial\Delta\Sigma_{ij}}{\partial\Delta E_{kl}} = \frac{\partial\Sigma_{ij}}{\partial R_{s\ kl}} \tag{3.101}$$

3.2.5 Prise en compte des rotations finies

La loi de comportement proposée est écrite avec le formalisme des petites déformations, qui est une approximation raisonnable pour des déformations inférieures à 10%. Mais cette formulation n'est pas objective lorsque la structure considérée est soumise à des rotations de corps rigides, par exemple dans le cas de la torsion d'un fil. Afin de rendre la formulation en petites déformations objective, `ABAQUS` utilise l'algorithme de Hughes et Winget [Hughes et Winget, 1980] qui permet de prendre en compte ces rotations dans le calcul des tenseurs des contraintes et des déformations globales. Dans le cas d'un matériau défini par

l'utilisateur (UMAT), cette rotation n'est pas appliquée aux variables internes tensorielles. Une comparaison effectuée par Hartl *et al.* [Hartl *et al.*, 2008] montre l'importance d'utiliser cette formulation pour simuler des structures en AMF soumises à des chargements en torsion et/ou en flexion. La loi de comportement définie dans ce chapitre ayant pour vocation de simuler ces types de chargements, la prise en compte de ces rotations finies est une nécessité. Le tenseur des contraintes obtenu à l'incrément n est alors la somme de la contribution de l'incrément de contrainte calculé et du tenseur des contraintes correspondant à l'incrément précédent $n-1$ auquel on applique la rotation de corps rigide :

$$\begin{aligned} \sigma^n &= \underline{\sigma}^n + \Delta\sigma^n \\ &= Q\sigma^{n-1}Q^t + \Delta\sigma^n \end{aligned} \tag{3.102}$$

Le tenseur de rotation Q est calculé à partir de la partie antisymétrique de l'approximation discrète du gradient des vitesses au cours du pas $n+1$, en utilisant la méthode du point milieu généralisé. La transposée de ce tenseur est notée Q^t. La contrainte peut s'exprimer à l'incrément n suivant une expression analogue à celle proposée par Hartl *et al.* [Hartl *et al.*, 2008], dans le cas de matériaux isotropes (où C_{ijkl}, tenseur des modules élastiques, est invariant par rotation de Q) :

$$\sigma^n = C_n : \left(\underline{\varepsilon}_n - \underline{\varepsilon}_n^{in}\right) + C_n : \left(\Delta\varepsilon_n - \Delta\varepsilon_n^{th} - \Delta\varepsilon_n^{in}\right) \tag{3.103}$$

ε_n^{in} représente alors la déformation inélastique. Ainsi, pour obtenir l'expression objective des contraintes à l'état n, il est suffisant d'appliquer la rotation de corps rigide aux tenseurs des déformations. Dans le logiciel ABAQUS, lorsque l'option de gestion des non-linéarités géométriques est activée (`NLGEOM = YES`), avant de passer les données d'entrée à la routine UMAT, le solveur détermine les tenseurs des contraintes $\underline{\sigma}^n$ et des déformations $\underline{\varepsilon}^n$ en appliquant la rotation de corps rigide appropriée. C'est la routine UMAT qui prend en charge la rotation des variables internes, et des constantes tensorielles qui doivent être objectives. Dans notre modèle, la déformation inélastique objective s'exprime par :

$$\underline{\underline{\varepsilon^{in}}}^n_{ij} = f\underline{\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}}^n + f^{FA}\underline{\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}}^n \tag{3.104}$$

Nous avons vu que la déformation $\bar{\varepsilon}_{ij}^{twin}$ peut être directement déterminée par le tenseur des contraintes, elle sera donc automatiquement objective lors de la résolution. La variable $\underline{\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}}$ doit, par contre, être actualisée lors du lancement de la routine UMAT :

$$\underline{\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}} = Q\bar{\varepsilon}_{ij}^{T}Q^t \tag{3.105}$$

Ainsi, au début de chaque pas de calcul, les expressions de toutes les variables internes sont objectives.
Le détail des opérations effectuées lors de la résolution numérique est présenté de manière synthétique figure 3.10.

Conclusion du chapitre

Tout au long de ce chapitre, nous avons développé un modèle macroscopique de comportement des alliages à mémoire de forme basé sur la thermodynamique des processus irréversibles. Les comportements habituels des AMF, mais aussi les comportements spécifiques des Nickel-Titane, ont été pris en compte. L'approche adoptée ici est une approche dite à champ moyen, en considérant notamment comme variable interne la déformation moyenne de transformation. Ce type de formulation permet de simuler beaucoup de comportements couramment observés dans les AMF, tels que la réorientation, la dissymétrie traction-compression et l'effet de stabilisation de la martensite. L'utilisation de la fraction volumique de martensite en tant que variable interne permet quant à elle de prendre en compte, outre la transformation de phase et ses comportements liés, l'effet des boucles internes observées lorsque la transformation martensitique est incomplète. La déformation liée à l'accommodation des macles, reliée à la fraction volumique de martensite formée autoaccommodée, permet de définir le comportement de la martensite pour des NiTi, et de différencier son comportement en fonction de la façon dont elle est apparue. La description correcte de la déformation maximale de transformation est la clé de toutes les dissymétries observées. La formulation proposée ici a, en outre, l'avantage de ne dépendre que de paramètres matériaux facilement identifiables sur des courbes de traction et de compression.
Les avantages apportés par l'utilisation de variables internes tensorielles se payent au niveau de l'implémentation numérique du modèle. Le système à résoudre est alors plus complexe, car dans le cas de chargements non-proportionnels la direction de la déformation de transformation n'est pas automatiquement déterminée. De plus, l'équilibrage d'une surface de charge en orientation et en transformation peut induire des instabilités lors de la résolution numérique, et la convergence s'en trouve limitée. Il faut dans ce cas utiliser des pas de calculs relativement faibles, ce qui induit des temps de calculs longs. Ce type de modèle doit alors être utilisé lorsque le trajet thermomécanique à simuler est complexe, et va provoquer l'activation de plusieurs mécanismes de déformation. Dans des cas plus simples (chargement superélastique proportionnel), certains modèles existants sont largements suffisants et certainement beaucoup plus rapides.

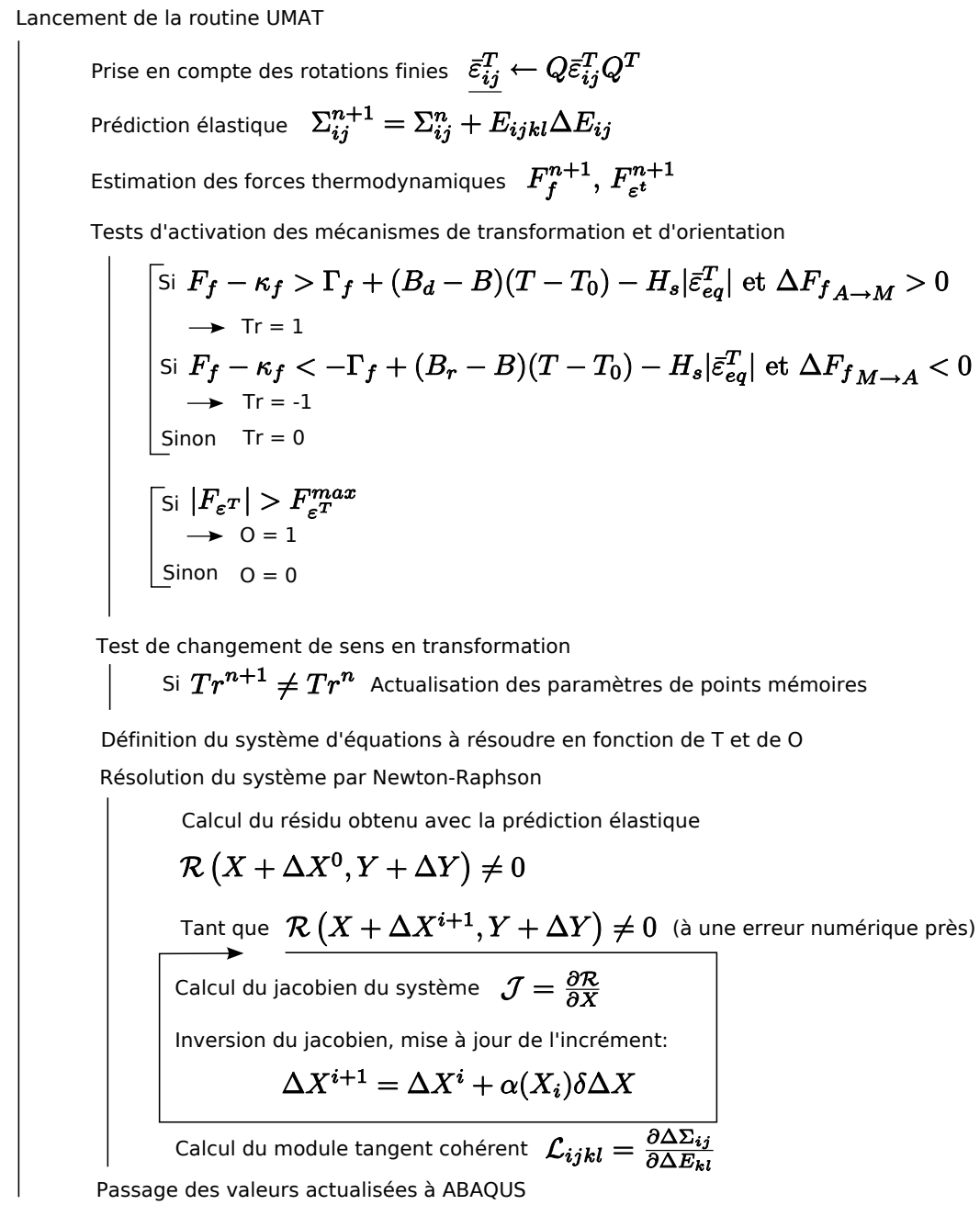

FIG. 3.10: *Présentation synthétique de la routine UMAT utilisée dans* ***ABAQUS***

4

Validation du modèle

Sommaire

4.1 Identification des paramètres matériaux . . . 104
4.2 Validation numérique . . . 110
4.2.1 Pseudo-diagrammes de phase . . . 111
4.2.2 Essais thermomécaniques uniaxiaux . . . 114
4.2.3 Essais multiaxiaux . . . 120
4.3 Comparaison modèle - base de données expérimentale . . . 122
4.3.1 Descriptif de la base expérimentale . . . 122
4.3.2 Identification des paramètres . . . 125
4.3.3 Essais isothermes uniaxiaux de traction . . . 126
4.3.4 Cycles thermiques à contrainte constante . . . 128
4.3.5 Essais isothermes de traction-torsion . . . 128
4.3.6 Retour contraint . . . 138
Conclusion . . . 138

Le modèle de comportement des alliages à mémoire de forme développé au chapitre précédent a pour objectif de simuler tous types de chargements thermomécaniques, qu'ils soient uniaxiaux, multiaxiaux, proportionnels et non-proportionnels. Disposer d'une base de données expérimentale regroupant ces types de chargements est alors nécessaire afin d'évaluer la précision des simulations, et surtout la capacité de prédiction de chargements thermomécaniques variés, à partir d'une identification simple des paramètres matériaux.
Dans ce chapitre, nous utilisons une base de données expérimentale réalisée sur des fils en NiTi par une équipe de l'IP ASCR de Prague, dirigée par P. Sittner. Elle regroupe des essais thermomécaniques de plusieurs types : chargements isothermes, chauffage-refroidissement à contrainte constante, retours contraints et essais non proportionnels de traction-torsion. Cette base a été choisie car elle a été réalisée spécifiquement, afin de tester divers modèles lors d'un Workshop sur la simulation des AMF [Sittner, 2008]. Cela permettra de situer le modèle proposé par rapport à d'autres modèles existants, dont certains ont été présentés dans le chapitre 2.

4.1 Identification des paramètres matériaux

L'une des préoccupations lors de la définition d'un modèle de comportement de matériaux destiné au calcul de structures concerne la définition des paramètres du matériau, qui doivent représenter les spécificités liées à la variété de comportements observés. Ils doivent aussi être facilement identifiables pour un matériau donné, afin que l'utilisateur puisse les déterminer à partir d'un minimum d'essais simples à réaliser. Dans certains cas, ces deux critères ne sont pas compatibles ; il faut alors mettre en place d'autres stratégies, qui consistent soit à mener une campagne expérimentale plus complète, soit à utiliser et au besoin extrapoler les résultats de la littérature soit à utiliser des résultats numériques issus d'approches par transition d'échelles.
La mise en œuvre du modèle formulé au chapitre précédent nécessite l'identification de 16 paramètres. La plupart sont obtenus à partir de l'analyse des résultats de quatre essais de traction isothermes réalisés à différentes températures. Déterminer le paramètre de dissymétrie nécessite un essai de traction-compression supplémentaire, plus difficile à réaliser en raison des problèmes de frottement inhérents aux essais de compression. Le paramètre correspondant à la stabilisation de la martensite demande, quant à lui, un essai de DSC ou de résistivité électrique lors d'un chauffage à partir de la phase martensite à l'état autoaccommodé, afin de déterminer les températures de retour austénitique.
Plusieurs paramètres correspondent à une grandeur mesurable et peuvent être facilement identifiés sur une courbe de traction (module d'Young E, déformation maximale en traction ε^T_{trac} par exemple), mais d'autres ont été introduits de façon moins directe en privilégiant leur signification thermodynamique. C'est le cas des forces critiques de transformation et d'orientation. Si, au niveau thermodynamique, ces paramètres correspondent à une notion bien compréhensible, ils sont difficilement identifiables en tant que tels. Il est alors nécessaire

de déterminer une méthode d'identification appropriée, c'est-à-dire trouver un lien avec une grandeur mesurable. Les paramètres matériaux peuvent être séparés en cinq catégories :
Paramètres indépendants de la transformation martensitique. C'est le cas du module d'Young E, du coefficient de Poisson ν et de la dilatation thermique α, supposés identiques pour les deux phases. L'identification de ces paramètres ne pose pas de problèmes particuliers.

Paramètres liés à l'énergie chimique. Il s'agit de la température T_0 et des paramètres de dépendance contrainte-température B, B_d et B_r. Pour les déterminer, considérons une courbe de traction superélastique, on note σ_{11} la composante de contrainte uniaxiale, et $\bar{\varepsilon}^T_{trac}$ la déformation moyenne de transformation maximale en traction. On écrit alors les critères de transformation directs et inverses (équation 3.45, chapitre 3) lorsque $f = 0$, ce qui correspond aux points de début de transformation directe et de fin de transformation inverse lors d'un cycle complet :

$$\begin{aligned}
&\sigma^s_{11\ A\to M}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B(T-T_0) - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} = F_f^{max} + (B_d - B)(T-T_0) - H_s\bar{\varepsilon}^T_{trac} \\
&\qquad \text{critère direct} \\
&\sigma^f_{11\ A\to M}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B(T-T_0) - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} = -F_f^{max} + (B_r - B)(T-T_0) - H_s\bar{\varepsilon}^T_{trac} \\
&\qquad \text{critère inverse}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Ces critères s'appliquent également dans le cas particulier d'un trajet de chargement thermique à contrainte nulle :

$$F_f^{max} = B_d(T_0 - M_s) = B_r(T_0 - A_f) \tag{4.2}$$

Ce qui conduit à l'expression suivante de T_0 :

$$T_0 = \frac{B_d M_s + B_r A_f}{B_d + B_r} \tag{4.3}$$

Si l'on considère des conditions de chargement telles que la martensite formée soit orientée par les contraintes σ_{11}, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\sigma_{11}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B_d(T-T_0) &= C^{te} \\
\sigma_{11}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B_r(T-T_0) &= C^{te}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

La réalisation d'essais superélastiques à différentes températures permet de définir un pseudo-diagramme de phase. En relevant sur ce diagramme les pentes de transformation directe et inverse $b_{d\ trac}$ et $b_{r\ trac}$, qui correspondent à des situations où la martensite apparaît de façon bien orientée lors de chargements de traction uniaxiale, il est possible de déterminer les paramètres B_d et B_r en écrivant :

$$\begin{aligned}
B_d &= b_{d\ trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} \\
B_r &= b_{r\ trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac}
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Les paramètres matériaux qu'il faut identifier sont donc $b_{d\ trac}$, $b_{r\ trac}$, M_s et A_f. Le paramètre B n'a pas besoin d'être identifié, car son expression disparaît lors du développement des critères de transformation ; la connaissance des paramètres B_d et B_r suffit.

Paramètres caractéristiques des forces critiques de transformation. Ils sont au nombre de trois : la force maximale de transformation F_f^{max}, la force minimale de transformation F_f^{min} et la force critique d'orientation $F_{\varepsilon^T}^{max}$. La signification de ces paramètres est illustrée sur la figure 4.1 a. F_f^{max} n'a pas besoin d'être identifié car il dépend d'autres paramètres (équation 4.2). Comme il est caractéristique d'un hystérésis, il peut aussi être déterminé en fonction de l'hystérésis en contrainte lors d'un chargement superélastique en traction. On s'assure alors de la cohérence des paramètres identifiés. En notant $\sigma^S_{11\ A\to M}$ la contrainte de début de transformation et $\sigma^S_{11\ M\to A}$ la contrainte de fin de transformation inverse, on obtient :

$$2F_f^{max} = \left[\sigma^S_{11\ A\to M} - \sigma^S_{11\ M\to A} + (b_r - b_d)(T - T_0)\right] \bar{\varepsilon}^T_{trac} \tag{4.6}$$

Le paramètre F_f^{min} peut être identifié sur une courbe superélastique présentant un cycle complet et un cycle partiel. Il faut pour cela déterminer les contraintes $\sigma_{11\ complet}$ et $\sigma_{11\ partiel}$ correspondant respectivement aux points de début des transformations inverses du cycle complet et du cycle partiel. La détermination de ce paramètre, en fonction de la fraction volumique de martensite $f_{partiel}$ présente lors du début de transformation inverse pour le cycle partiel, s'écrit alors :

$$\sigma_{11\ partiel} - \sigma_{11\ complet} + H_f(1 - f_{partiel}) = 2(1 - f_{partiel})(F_f^{max} - F_f^{min}) \tag{4.7}$$

Lors d'une charge superélastique, on suppose que la déformation macroscopique de transformation est proportionnelle à la fraction volumique de martensite, comme l'ont montré Calloch *et al.* [Calloch *et al.*, 2006]. On peut alors déterminer $f_{partiel}$ et en déduire F_f^{min}.
Une autre méthode consiste à extrapoler la limite de transformation inverse, jusqu'à une fraction volumique quasi-nulle. Nous pouvons alors identifier plus facilement le paramètre F_f^{min}, comme montré figure 4.1 b. Il faut cependant faire attention à respecter la limite $F_{min} \geqslant (B_r - B_d)(T - T_0)$, qui suppose une température limite d'utilisation du critère. Au-delà, la limite de transformation inverse peut être supérieure à la limite de transformation directe. Pour les paramètres usuels du NiTi, cette température limite correspond à des chargements pseudo-superélastiques qui feraient apparaître des déformations plastiques. La transformation de phase dans ces conditions n'est plus gouvernée uniquement par un couplage température-contrainte, elle est induite par les déformations plastiques. Les équations de ce modèle ne sont pas adaptées pour traiter ce cas. Le paramètre F_f^{min} n'est alors pas limité dans les cas où l'on n'observe pas de déformations plastiques.
Dans le modèle, on utilise pour caractériser le rapport des forces minimales et maximales de transformation le paramètre $r_f = 1 - \frac{F_f^{min}}{F_f^{max}}$. Ainsi, quand $r_f = 0$ il n'y a pas de boucle interne.

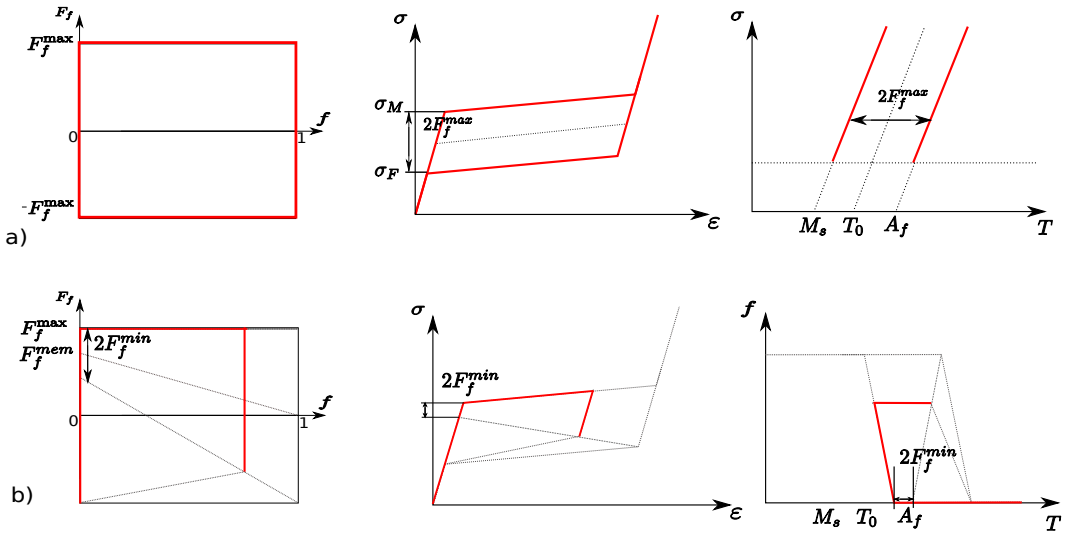

FIG. 4.1: *a) Identification du paramètre F_f^{max} à partir d'une courbe de comportement superélastique ou du pseudo-diagramme de phase, à partir d'une contrainte permettant la formation de martensite orientée. b) Identification du paramètre F_f^{min} sur une courbe superélastique ou sur une courbe fraction volumique de martensite - température.*

Pour identifier le paramètre $F_{\varepsilon^T}^{max}$, un essai de traction uniaxial sur un échantillon en phase martensitique à l'état autoaccommodé permet de définir la contrainte limite de réorientation σ^{re} du matériau. Lorsque la déformation de transformation est nulle la force critique de transformation $F_{\varepsilon^T}^{max}$ est égale, selon le critère de réorientation, à $|\sigma_{ij}^{D\ re}|$ qui est la norme au sens de Von Mises en traction du déviateur des contraintes $\sigma_{ij}^{D\ re}$. Cette norme est identique pour un tenseur et son déviateur, on obtient alors ${F_{\varepsilon^T}}^{max} = \sigma^{re}$ (voir figure 4.2).

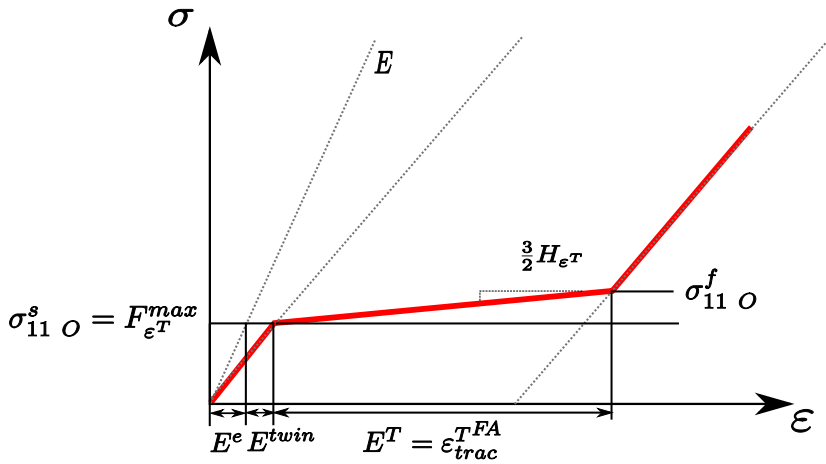

FIG. 4.2: *Identification des paramètres ${F_\varepsilon^T}^{max}$, H_ε^T et ${\varepsilon_{trac}^T}^{FA}$ à partir d'une courbe de comportement de martensite initialement autoaccommodée, en traction uniaxiale. Pour la clarté du schéma, l'influence de la déformation élastique sur l'identification de la déformation maximale de la martensite autoaccommodée est négligée*

Paramètres de déformations à saturation. Il faut identifier, sur un essai uniaxial super-

élastique, les déformations à saturation en traction ε^T_{trac} et en compression ε^T_{comp} (voir figure 4.3). Sur un essai de traction à partir de martensite autoaccommodée, on peut identifier $\varepsilon^T_{trac}{}^{FA}$ (voir figure 4.2).

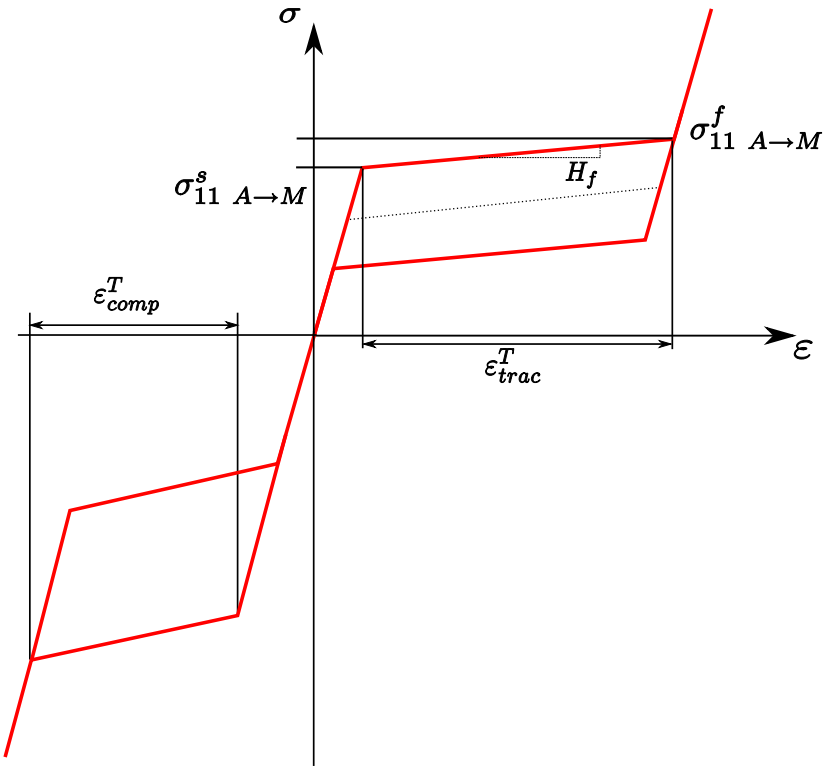

FIG. 4.3: *Identification des déformations maximales en traction et en compression, et du paramètre de pseudo-écrouissage en transformation H_f. Pour la clarté du schéma, l'influence de la déformation élastique sur l'identification des déformations maximales est négligée*

Paramètres d'interactions. Ils sont au nombre de quatre ; H_f, H_{ε^T}, H_{twin} et H_s. H_f représente les interactions inter-variantes. Lors d'un chargement superélastique complet, ce paramètre peut être déterminé en considérant les contraintes $\sigma^s_{11\ A\to M}$ et $\sigma^f_{11\ A\to M}$, qui correspondent respectivement aux points de début et de fin de transformation directe d'un cycle complet :

$$\begin{aligned} F_f^{max} - H_s\bar{\varepsilon}^T_{trac} &= \sigma^s_{11\ A\to M}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B_d(T-T_0) - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} \\ F_f^{max} - H_s\bar{\varepsilon}^T_{trac} &= \sigma^f_{11\ A\to M}\bar{\varepsilon}^T_{trac} - B_d(T-T_0) - H_f - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} \end{aligned} \tag{4.8}$$

On en déduit $H_f = \left(\sigma^f_{11\ A\to M} - \sigma^s_{11\ A\to M}\right)\bar{\varepsilon}^T_{trac}$. Si l'on mesure la pente de transformation $\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon}_{|f}$, on obtient la relation suivante :

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon}_{|f} = \frac{H_f}{\bar{\varepsilon}^{T\ 2}_{trac}} \tag{4.9}$$

Le paramètre H_{ε^T} se détermine en identifiant les contraintes de début $\sigma^s_{11\ O}$ et de fin $\sigma^f_{11\ O}$ de réorientation (voir figure 4.2). Le déviateur des contraintes correspondant à $\sigma^f_{ij\ O}$ s'écrit $\sigma^{D\ f}_{ij\ O}$. On obtient :

$$F^{T\,max}_{\varepsilon} = \sigma^s_{11\ O} = |\sigma^{D\ f}{}_{ij\ O} - H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac\ ij}| \tag{4.10}$$

La résolution du critère à ce niveau de contraintes permet de déterminer la valeur de H_{ε^T} :

$$H_{\varepsilon^T} = \frac{2}{3}\frac{\sigma^f_{11\ O} - \sigma^s_{11\ O}}{\bar{\varepsilon}^T_{trac}} \tag{4.11}$$

La pente de réorientation vaut donc :

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon_{\ |\varepsilon^T}} = \frac{3}{2}H_{\varepsilon^T} \tag{4.12}$$

En utilisant une méthode similaire, le paramètre H_{twin} est déterminé en identifiant la déformation par accommodation des macles $\varepsilon^{twin}_{trac}$ pour un niveau de contraintes correspondant à la limite de réorientation $\sigma^s_{11\ O}$ (voir figure 4.2), avec la relation $\sigma^{D\ s}_{ij\ O} - H_{twin}\bar{\varepsilon}^{twin}_{trac\ ij} = 0$, ce qui implique $H_{twin} = \frac{3}{2}\frac{\sigma^s_{11\ O}}{\bar{\varepsilon}^{twin}_{trac}}$.
Le paramètre H_s est caractéristique de l'effet de stabilisation de la martensite, lorsque cette phase a été prédéformée. Pour l'identifier, il est nécessaire de connaître la température notée A_f correspondant à la fin de la transformation inverse du retour austénitique à partir de martensite autoaccommodée, et la température A'_f correspondant à un retour à partir de martensite orientée à saturation lors d'un chargement en traction. On obtient alors les relations suivantes :

$$-F^{max}_f = -B_r(A_f - T_0) - F^{max}_f - H_s\bar{\varepsilon}^T_{trac} = -B_r(A'_f - T_0) - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}\bar{\varepsilon}^T_{trac} \tag{4.13}$$

On obtient alors $H_s = b_{r\ trac}\left(A'_f - A_f\right) - \frac{1}{2}H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{trac}$

Finalement, les paramètres matériaux utilisés dans ce modèle peuvent tous être identifiés à l'aide de trois courbes uniaxiales de superélasticité, afin de reporter les points de début et de fin de transformation de la martensite orientée sur le pseudo-diagramme de phase. Sur l'une de ces courbes il est possible d'identifier les paramètres de forces critiques de transformation et d'interaction en transformation. Une courbe de réorientation permet d'identifier les paramètres matériaux propres à ce mécanisme de déformation. Une mesure des températures de transformation de la martensite autoaccommodée (DSC ou résistivité électrique) permet d'identifier le paramètre de stabilisation de la martensite. Un dernier essai de traction-compression permet de mesurer le paramètre de dissymétrie. Le tableau 4.1 résume l'ensemble des paramètres du modèle.

TAB. 4.1: *Paramètres matériaux du modèle macroscopique*

Paramètre	Unité	Description
E	(MPa)	Module d'Young
ν		Coefficient de Poisson
α	$(°C)^{-1}$	Coefficient de dilatation thermique
ε^T_{trac}		Déformation de transformation maximale en traction
$\varepsilon^{TFA}_{tract}$		Déformation de transformation maximale en traction
		à partir de martensite formée autoaccommodée
ε^T_{comp}		Déformation de transformation maximale en compression
b_d	$(MPa/°C)$	Pente de transformation directe en traction dans le diagramme (σ, T)
b_r	$(MPa/°C)$	Pente de transformation inverse en traction dans le diagramme (σ, T)
M_s	$(°C)$	Température de début de transformation austénite $\rightarrow$ martensite
A_f	$(°C)$	Température de fin de transformation martensite $\rightarrow$ austénite
r_f		Coefficient définissant l'amplitude des boucles internes
F_{ε^T}	(MPa)	Contrainte limite de début de réorientation
H_f	(MPa)	Pseudo-écrouissage de transformation
H_{ε^T}	(MPa)	Pseudo-écrouissage de réorientation
H_{twin}	(MPa)	Pseudo-écrouissage d'accommodation des macles
H_s	(MPa)	Décalage des températures de retour austénitique
		de la martensite orientée

4.2 Validation numérique

Des simulations numériques vont permettre d'évaluer la capacité du modèle de prédire divers comportements des AMF, et de valider la prise en compte des chargements non-proportionnels. Nous utilisons dans cette étape un programme pilote de chargement externe développé dans l'optique de simuler des trajets mixtes (conditions aux limites en contrainte et en déformation) non-proportionnels. L'utilisation d'ABAQUS est tout à fait possible, mais pour des cas de chargements homogènes l'utilisation d'un code éléments finis n'est pas nécessaire.

Il faut noter que toutes les simulations numériques considèrent comme état initial l'état austénitique. L'évolution de l'état de la martensite simulée par le modèle dépend du trajet de chargement parcouru depuis cet état austénitique initial. Ainsi, pour simuler un chargement isotherme en phase martensitique il faut au préalable simuler un refroidissement à contrainte nulle, même si cette étape n'est pas représentée dans les courbes de comportements qui vont suivre afin de ne pas alourdir les représentations des résultats obtenus.

Les paramètres matériaux utilisés dans cette partie correspondent à ceux couramment utilisés pour des NiTi industriels. Ils sont résumés dans le tableau 4.2.

TAB. 4.2: *Paramètres matériaux typiques d'un AMF NiTi*

$E(MPa)$	ν	$\alpha(℃)^{-1}$	$\varepsilon^T_{tracmax}$	$\varepsilon^{TFA}_{tractmax}$	$\varepsilon^T_{compmax}$
70000	0,3	$8 \cdot 10^{-6}$	0,05	0,04	0,04
$b_d(MPa/℃)$	$b_r(MPa/℃)$	M_S (℃)	A_f (℃)	r_f	
5	6	20	60	0,6	
$F_\varepsilon(MPa)$	$H_f(MPa)$	$H_{\varepsilon^T}(MPa)$	$H_{twin}(MPa)$	$H_s(MPa)$	
100	4	1000	40000	50	

4.2.1 Pseudo-diagrammes de phase

La force de transformation est liée à la déformation moyenne de transformation. Les limites de transformation dépendent alors du trajet thermomécanique appliqué au matériau. Par exemple, le décalage des températures de transformation inverse lié à la stabilisation de la martensite (voir chapitre 1) est l'un de ces effets. A partir du modèle implémenté nous pouvons, en utilisant un programme itératif spécifique, retracer les diagrammes de phase pour des chargements thermiques et mécaniques. La figure 4.4 montre les pentes de transformation lors de chargements mécaniques en traction isotherme.

On observe dans ce cas une limite de transformation verticale pour les basses contraintes, qui correspond à la limite de formation de la martensite autoaccommodée. A partir d'une contrainte limite, qui correspond à la contrainte limite de début de réorientation, une faible pente de transformation est observée. Pour un niveau de contraintes encore plus important (contrainte de fin de réorientation), on observe une pente de transformation constante plus importante. En ce qui concerne les limites de transformation inverses, la pente est constante quelle que soit la valeur de contrainte. Cette différence de forme des limites de transformation directe et inverse s'explique par l'évolution de la valeur de la déformation moyenne de transformation. Au début du chargement, cette déformation moyenne est nulle. Au moment où la contrainte dépasse la limite de fin de réorientation de la martensite, la déformation moyenne de transformation devient maximale. La transformation de phase est principalement gouvernée par le couplage entre $\sigma_{ij}\bar{\varepsilon}^T_{ij}$ et $B(T - T_0)$ (voir équation 3.54). On remarque bien l'effet de la déformation moyenne de transformation. Lorsque la norme de cette dernière est nulle, la température de transformation est constante dans le plan (σ, T). Lorsque cette déformation est faible, la transformation reste principalement gouvernée par la température. Lorsque la déformation de transformation moyenne est maximale, on observe une pente de transformation. Lors de la décharge, la déformation de transformation moyenne étant maximale (on suppose un chargement à saturation), on observe une pente de transformation inverse constante à tous les niveaux de contrainte. On met aussi ici en évidence la différence de pentes

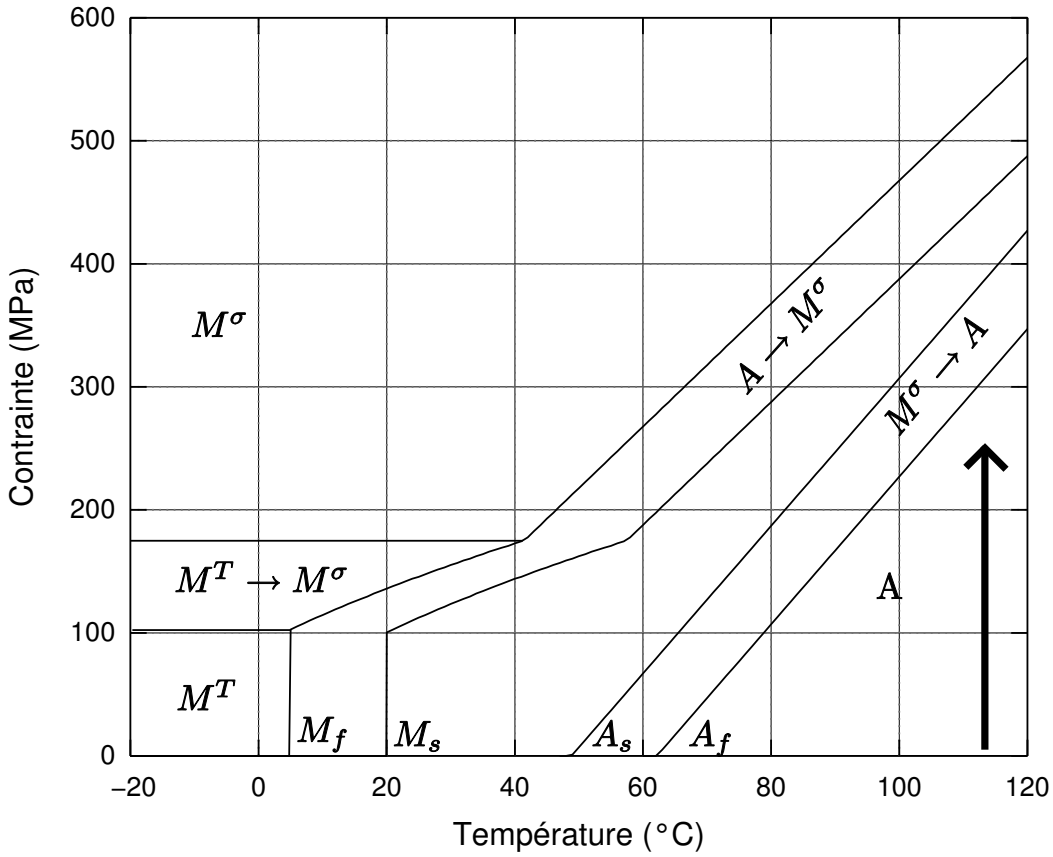

FIG. 4.4: *Diagramme de phase tracé à partir de simulations en traction isotherme*

de transformation suivant le sens de la transformation, correspondant aux paramètres b_d et b_r.

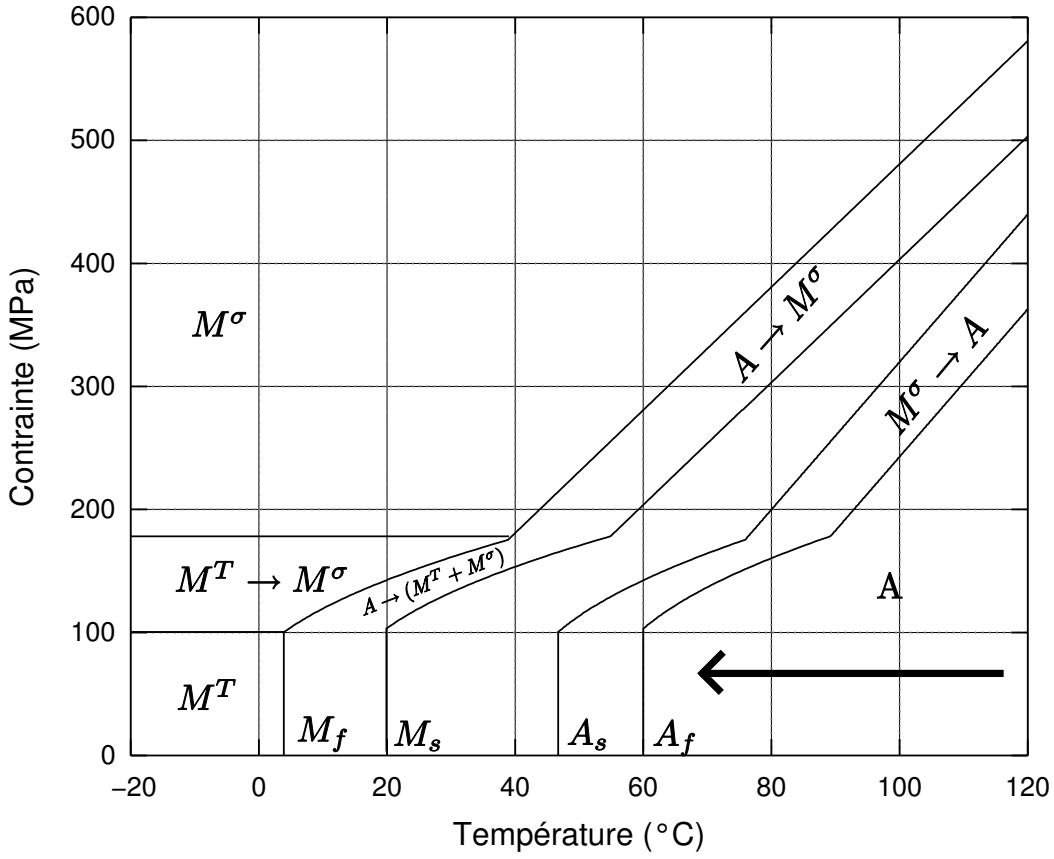

FIG. 4.5: *Diagramme de phase tracé à partir de simulations en refroidissement-chauffage à contrainte constante*

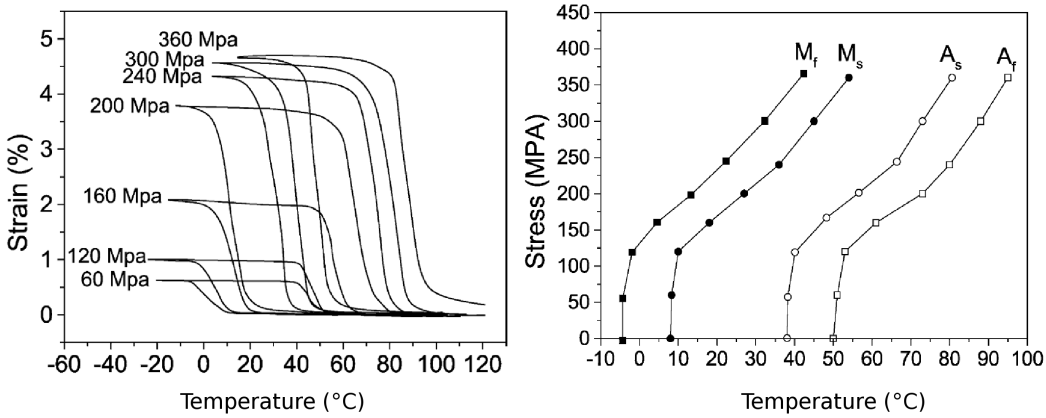

FIG. 4.6: *Essais de refroidissement-chauffage à contrainte constante (à gauche). Pseudo-diagramme de phase réalisé à partir de ces essais (à droite), d'après Wu [Wu* et al.*, 2003]*

Par contre, lors d'un refroidissement-chauffage à contrainte constante de traction (voir figure

4.5), le comportement à basse contrainte est différent de celui observé pour des chargements mécaniques isothermes. Ici la déformation moyenne de transformation, qui dépend de la contrainte appliquée, reste constante tout au long du chargement. On obtient alors des formes de limites de transformation similaires quelque soit le sens de la transformation. Le pseudo-diagramme de phase établi par Wu *et al.* [Wu *et al.*, 2003] à partir d'essais de refroidissement-chauffage à contrainte constante sur des échantillons de NiTi confirme la forme de diagramme simulé (voir figure 4.6). On observe clairement trois zones, qui correspondent à une valeur de la déformation de transformation. Pour la première zone (basses contraintes, inférieures à $100MPa$), on n'observe pas de variations des températures de transformation par rapport aux températures de transformation observées à contrainte nulle (mesurées par différence de résistivité électrique). La deuxième zone est délimitée par les contraintes de début de réorientation (environ $100MPa$) et de fin de réorientation (environ $200MPa$), et correspond à une faible pente de transformation dans le diagramme (σ, T). La dernière zone, au dessus de $200MPa$, correspond à une déformation de transformation saturée, la pente de transformation est constante. En comparant les deux diagrammes de phases simulés, lors du retour austénitique on met en évidence le décalage des températures A_f et A'_f, suivant que la martensite est autoaccommodée ou orientée.
La figure 4.7 montre les limites de transformation observées pour des chargements isothermes en traction et en compression. On observe une dissymétrie entre les deux chargements. Les pentes correspondant à une déformation moyenne de transformation saturée sont différentes. Si l'on reprend le pseudo-diagramme de phase établi par Sittner [Sittner *et al.*, 2006] (voir figure 4.8), on remarque un rapport entre les pentes de transformation en traction et en compression de $0,73$. Sur le diagramme que nous avons établi ce rapport est de $0,8$, ce qui correspond en fait au rapport des déformations maximales en traction et en compression.

4.2.2 Essais thermomécaniques uniaxiaux

Afin de valider de manière qualitative la prise en compte des différents comportements observés dans les alliages à mémoire de forme, plusieurs trajets de chargements thermomécaniques uniaxiaux vont être simulés :
- un trajet correspondant à l'effet mémoire de forme
- des trajets de chargements isothermes (essais de réorientation, essais au voisinages des températures de transformation, essais superélastiques)
- des trajets thermiques à contrainte constante
- un trajet de retour contraint

Le premier test est un essai de mémoire de forme. Un refroidissement de 100 à 0°C (en-dessous de M_f), puis un chargement isotherme sont appliqués pour atteindre une déformation de 1, 3 et 5%, suivi d'une décharge à contrainte nulle. On applique ensuite un chauffage à contrainte nulle jusqu'à la température initiale (Fig. 4.9). Le modèle permet de simuler ce trajet correspondant à l'effet mémoire de forme, pour différents niveaux de déformations. Entre un retour à déformation nulle et une réorientation après déformation à 5%, les températures de

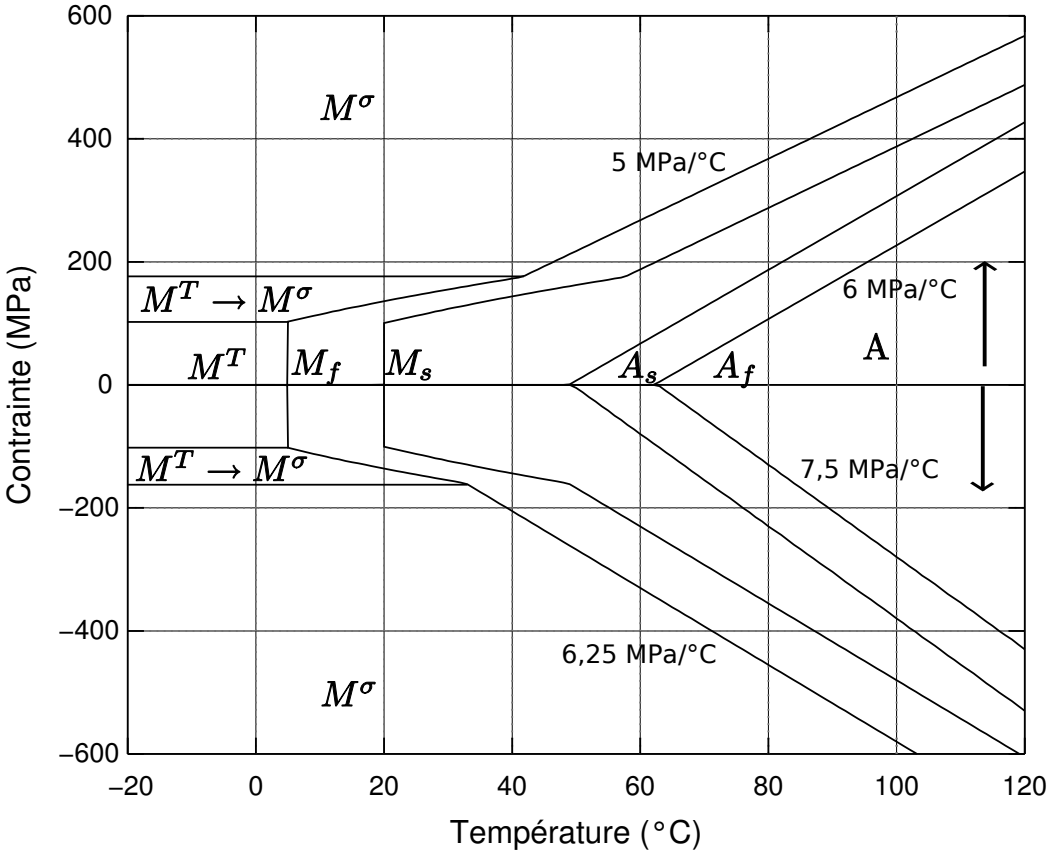

FIG. 4.7: *Diagramme de phase tracé à partir de simulations en traction et compression isothermes, mise en évidence de la dissymétrie des pentes de transformation.*

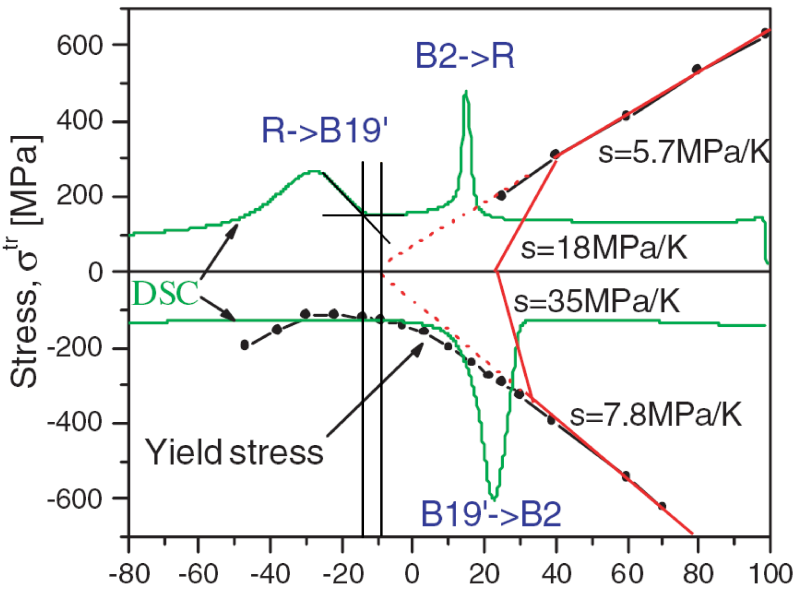

FIG. 4.8: *Mise en évidence de la différence de pentes des limites de transformation en traction et en compression, d'après ([Sittner* et al.*, 2006])*

retour austénitique sont décalées vers le haut pour la martensite orientée (Fig. 4.10), ce qui est conforme aux observations de Liu et Favier [Liu et Favier, 2000] et de Popov et Lagoudas [Popov et Lagoudas, 2007], même si ici le décalage des températures est faible (il dépend du paramètre H_s).

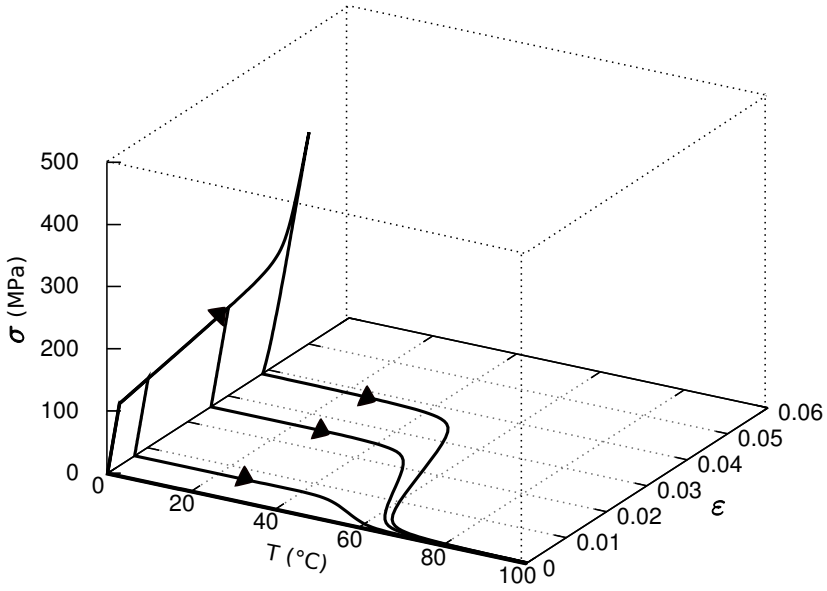

FIG. 4.9: *Chargements mémoires pour différents niveaux de déformation.*

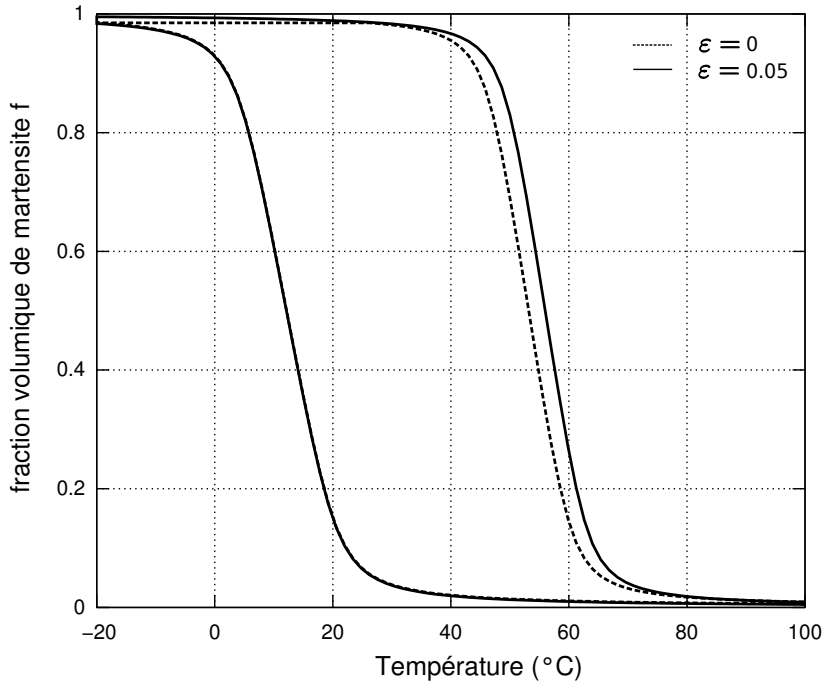

FIG. 4.10: *Comparaison des températures de retour austénitique entre des martensites orientée et autoaccommodée*

Afin de montrer l'impact de la déformation d'accommodation des macles sur le comportement global, plusieurs chargements isothermes sont réalisés à des températures au voisinage de M_s ($M_s - 20$℃, M_s et $M_s + 20$℃, voir Fig. 4.11). La variation des pentes lors du premier stade du comportement de l'alliage est observée, suivant que l'état du matériau est martensitique de structure autoaccommodée ($T < M_f$) ou complètement austénitique ($T > M_s$). On observe aussi la différence des déformations maximales de transformation obtenues suivant l'état initial.

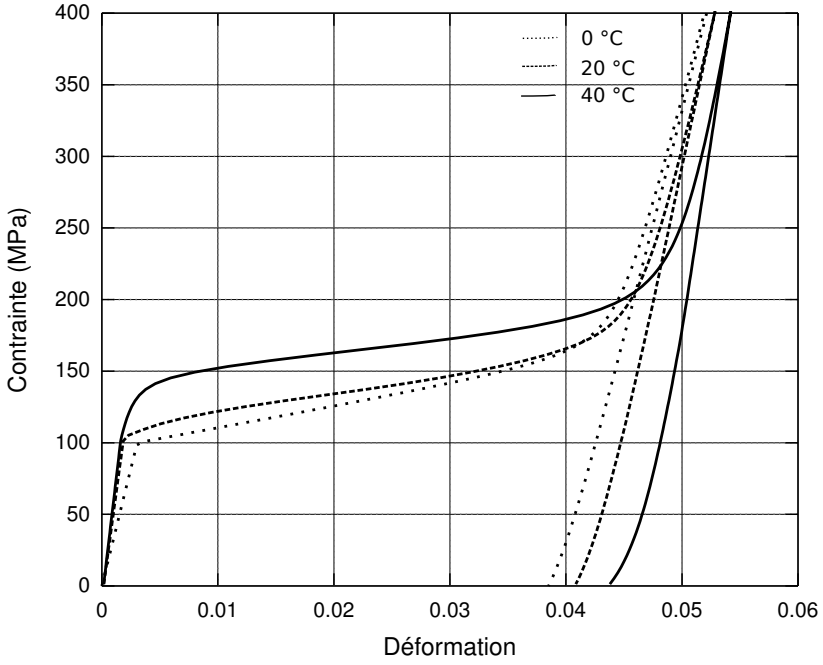

FIG. 4.11: *Chargements isothermes pour des températures au voisinage de M_s*

Plusieurs tests de trajets superélastiques en traction et en compression sont menés à une température de 100℃ (Fig. 4.12). L'objectif est de valider le comportement des boucles internes pour ce type de chargement, et aussi la prise en compte de la dissymétrie. On observe entre les comportements en traction et en compression une différence non seulement au niveau des contraintes critiques de transformation, mais aussi de la déformation à saturation, de l'hystérésis et des pseudo-pentes d'écrouissage. Pour montrer comment la formulation en déformation de transformation maximale présentée plus haut influence ces différentes caractéristiques, le calcul des pentes de transformation et des contraintes critiques est effectué analytiquement ci-dessous, dans le cas d'un cycle complet. La force critique de transformation F_f^{max} vaut :

$$F_f^{max} = B_d(T_0 - M_s) = 3,75 \tag{4.14}$$

L'hystérésis en contraintes s'écrit alors :

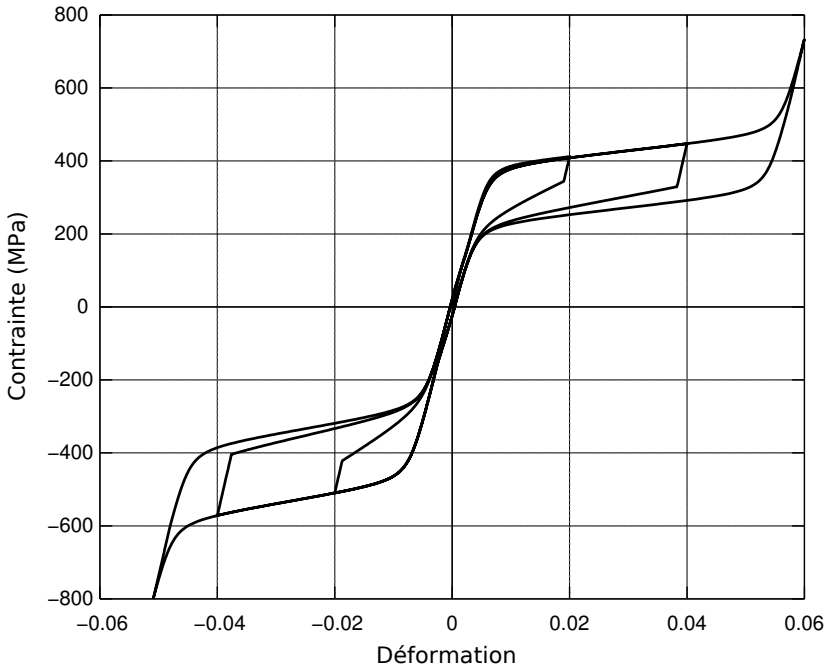

FIG. 4.12: *Chargements en traction et en compression pour différents niveaux de déformation - mise en évidence de la dissymétrie de comportement et des boucles internes*

$$\begin{aligned} \Delta\Sigma_{trac} &= 2\frac{F_f^{max}}{\bar{\varepsilon}_{trac}^T} = 150MPa \\ \Delta\Sigma_{comp} &= 2\frac{F_f^{max}}{\bar{\varepsilon}_{comp}^T} = 187,5MPa \end{aligned} \tag{4.15}$$

On peut aussi déterminer les pentes de transformation dans les deux cas :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Sigma_{trac}}{\Delta E_{trac}^T} &= \frac{H_f}{{\bar{\varepsilon}_{trac}^T}^2} = 16MPa \\ \frac{\Delta\Sigma_{comp}}{\Delta E_{comp}^T} &= \frac{H_f}{{\bar{\varepsilon}_{comp}^T}^2} = 25MPa \end{aligned} \tag{4.16}$$

Dans chacun des cas, les dissymétries de comportement observées en traction et en compression sont liées au produit $\sigma_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij}^T$. La déformation moyenne maximale de transformation de la martensite dépend ici du trajet de chargement, et prend des valeurs comprises entre $\bar{\varepsilon}_{trac}^T$ et $\bar{\varepsilon}_{comp}^T$. La formulation des boucles internes considérée induit une variation de l'hystérésis en fonction de l'état de la transformation et une modification de la pente apparente du retour austénitique. Des simulations de refroidissement-chauffage à contrainte constante ont été réalisés (voir figure 4.13). L'objectif est de voir si le modèle est capable de prévoir l'évolution des températures de transformation en fonction de la contrainte appliquée. Il apparaît qu'en-dessous de la contrainte limite de réorientation ($100MPa$), la déformation observée est due uniquement à l'accommodation des macles dans la martensite. Au-delà, la martensite

est orientée par la contrainte, on observe donc une variation importante de la déformation tout au long du cycle thermique. Les simulations réalisées ici sont qualitativement proches des résultats expérimentaux présentés par Wu *et al.* [Wu *et al.*, 2003].

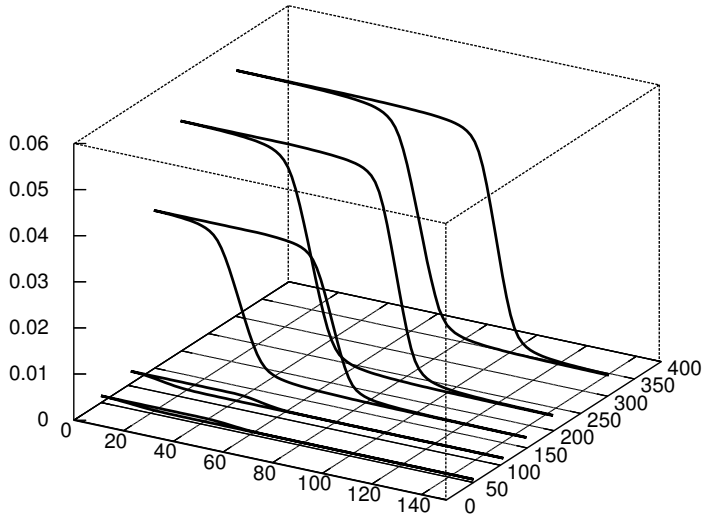

FIG. 4.13: *Chargements thermiques à contrainte constante, pour différents niveaux de contraintes.*

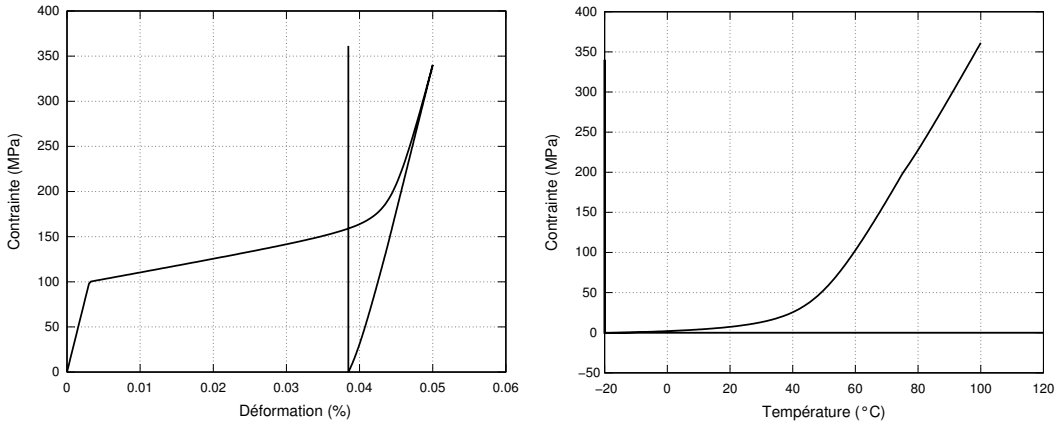

FIG. 4.14: *Simulation d'un retour contraint*

Le dernier trajet de chargement uniaxial correspond à un retour contraint. Ce type de chargement est largement utilisé pour diverses applications (dispositif Frangibolt, manchons Raychem par exemple). Ces chargements consistent à déformer l'echantillon jusqu'à une valeur imposée, puis bloquer la déformation et augmenter la température. La transformation inverse va alors se produire, en raison du chauffage, ce qui va induire une diminution de la déformation de transformation. La déformation macroscopique imposée étant constante, ce sont alors les déformations élastiques (tant que les contraintes ne sont pas trop élevées) qui vont compenser cette diminution de la déformation de transformation. On observe alors une augmentation du niveau de contrainte. Une simulation de cet effet est effectuée en appliquant un refroidissement jusqu'à une température $T = -20$℃ inférieure à M_f, puis en imposant

une déformation de 5% suivie d'une décharge jusqu'à une contrainte nulle. La déformation est ensuite considérée constante, et un chauffage est effectué jusqu'à une température de 100°C. La figure 4.14 montre le résultat de cette simulation.

Les essais uniaxiaux présentés ici ont permis de valider la capacité du modèle à prendre en compte les différents comportements des alliages à mémoire de forme, pour des trajets thermomécaniques très divers.

4.2.3 Essais multiaxiaux

Les chargements thermomécaniques permettant de valider la prise en compte du comportement thermomécanique ont été simulées dans le cas uniaxial, mais un modèle de comportement des AMF intégré dans un code éléments finis doit également prendre en compte des chargements multiaxiaux et non-proportionnels. Afin de valider la capacité de modélisation des chargements de ce type, des trajets de chargements multiaxiaux de type carré dans le plan de contrainte axiale - contrainte de cisaillement similaires à ceux effectués par Panico et Brinson [Panico et Brinson, 2007] sont réalisés pour des températures de 0, 40 et 80°C, respectivement (voir figure 4.15). La réponse, de forme similaire à ceux réalisés par Panico et Brinson, montre de plus l'effet de la dissymétrie traction-compression. On peut remarquer aussi l'effet de l'expression de la déformation maximale de transformation qui est fonction de la fraction volumique de martensite formée autoaccommodée. A 0°C, cette fraction volumique est importante, la déformation maximale de transformation sera donc plus faible qu'à 40°C ou 80°C.
Grabe et Bruhns [Grabe et Bruhns, 2009] ont réalisé des essais de traction/compression - torsion sur des tubes fins de NiTi, en effectuant plusieurs types de trajets de chargements dans le plan des déformations axiales - déformations de cisaillement. En considérant des déformations homogènes dans une section du tube (le rapport épaisseur/diamètre est supérieur à 5), il est possible de représenter le comportement de ces éprouvettes dans des diagrammes contraintes-déformations. Le matériau utilisé est superélastique à la température de l'essai (27°C). Des trajets non-proportionnels du même type seront alors simulés en utilisant les paramètres définis dans le tableau 4.2, à une température de 100°C, afin d'obtenir un comportement superélastique. Il sera alors possible de comparer les comportements expérimentaux et simulés de manière qualitative. La figure 4.16 présente deux chargements de type "carrés" en déformation imposée. La déformation axiale est notée ε et la déformation de cisaillement en torsion est noté γ. La contrainte axiale est notée σ, et la contrainte de cisaillement τ. Les résultats sont présentés en considérant une déformation de cisaillement équivalent $\gamma' = \frac{\gamma}{\sqrt{3}}$ et une contrainte de cisaillement équivalente $\tau' = \sqrt{3}\tau$. Deux autres chargements dans l'espace des déformations axiales - déformation de cisaillement en "ailes de papillons" sont présentés figure 4.17.
Bien que les paramètres matériaux utilisés n'aient pas été identifiés à partir des essais menés par Grabe et Bruhns [Grabe et Bruhns, 2009], nous pouvons observer d'une manière qualita-

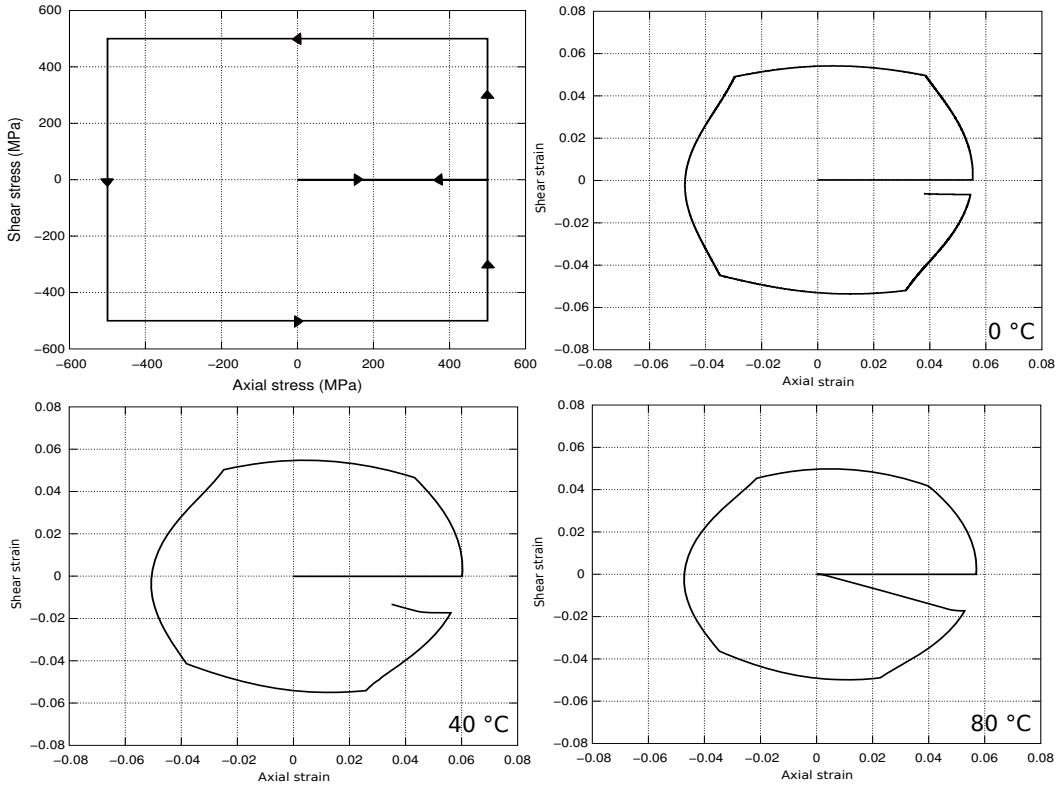

FIG. 4.15: *Chargements "carrés" dans le plan des contraintes axiales - contraintes de cisaillement isothermes à différentes températures*

tive une bonne concordance entre les essais et les simulations. Dans les deux cas, la dissymétrie traction-compression induit une réponse dépendante du sens sélectionné pour effectuer le trajet de chargement. Les contraintes de transformations sont également plus importantes lorsque le matériau est sollicité en compression.

4.3 Comparaison modèle - base de données expérimentale

Une base de données importante a été élaborée par l'équipe de l'IP ASCR de Prague en réalisant des sollicitations thermomécaniques diverses et complexes sur des fils en NiTi. Cette base a servi de support à l'organisation d'un Workshop portant sur la modélisation des AMF. L'objectif de cette base de données est de permettre d'évaluer et de comparer la capacité de prédiction des différents modèles macroscopiques de comportement des AMF. Les différentes équipes impliquées dans cette comparaison de modèles macroscopiques des AMF sont présentées dans le tableau 4.3. Une deuxième session de ce workshop aura lieu en septembre 2009 (conférence ESOMAT). Les différents trajets thermomécaniques ont été réalisés afin de tester en particulier la prise en compte de certains points particuliers du comportement de ces alliages :

1. La variété des mécanismes de déformation présents dans les AMF
2. La prise en compte des cycles partiels
3. Le comportement lors de chargements variés (couplés ou non) thermiques et mécaniques
4. Le comportement multiaxial et non-proportionnel
5. Le comportement en présence de gradients de contraintes (déformations)

TAB. 4.3: *Equipes participantes au Workshop de comparaison des modèles, ESOMAT, 2009*

N°	Equipe	Pays	Directeurs d'équipes	Membres impliqués
1	LPMM - LEMTA	France	Patoor, Ben-Zineb	Chemisky, Duval
2	LMARC	France	Lexcellent	Gibeau
3	IP ASCR	Rép. Tchèque	Sittner	Sedlak, Frost
4	Pavia Univ.	Italie	Aurichio	Reali
5	Northwestern Univ.	Etats-Unis	Brinson	Panico
6	L3SR - LG2M	France	Favier, Rio	
7	Texas A&M	Etats-Unis	Lagoudas	Texas A&M modellers

4.3.1 Descriptif de la base expérimentale

Les indications données ci-dessous sont extraites de la présentation de la base expérimentale [Sittner, 2008]. Un fil en NiTi de diamètre $0,1mm$ superélastique à température ambiante, obtenu chez Fort Wayne Metals a été cyclé 100 fois en traction uniaxiale (jusqu'à 8% de

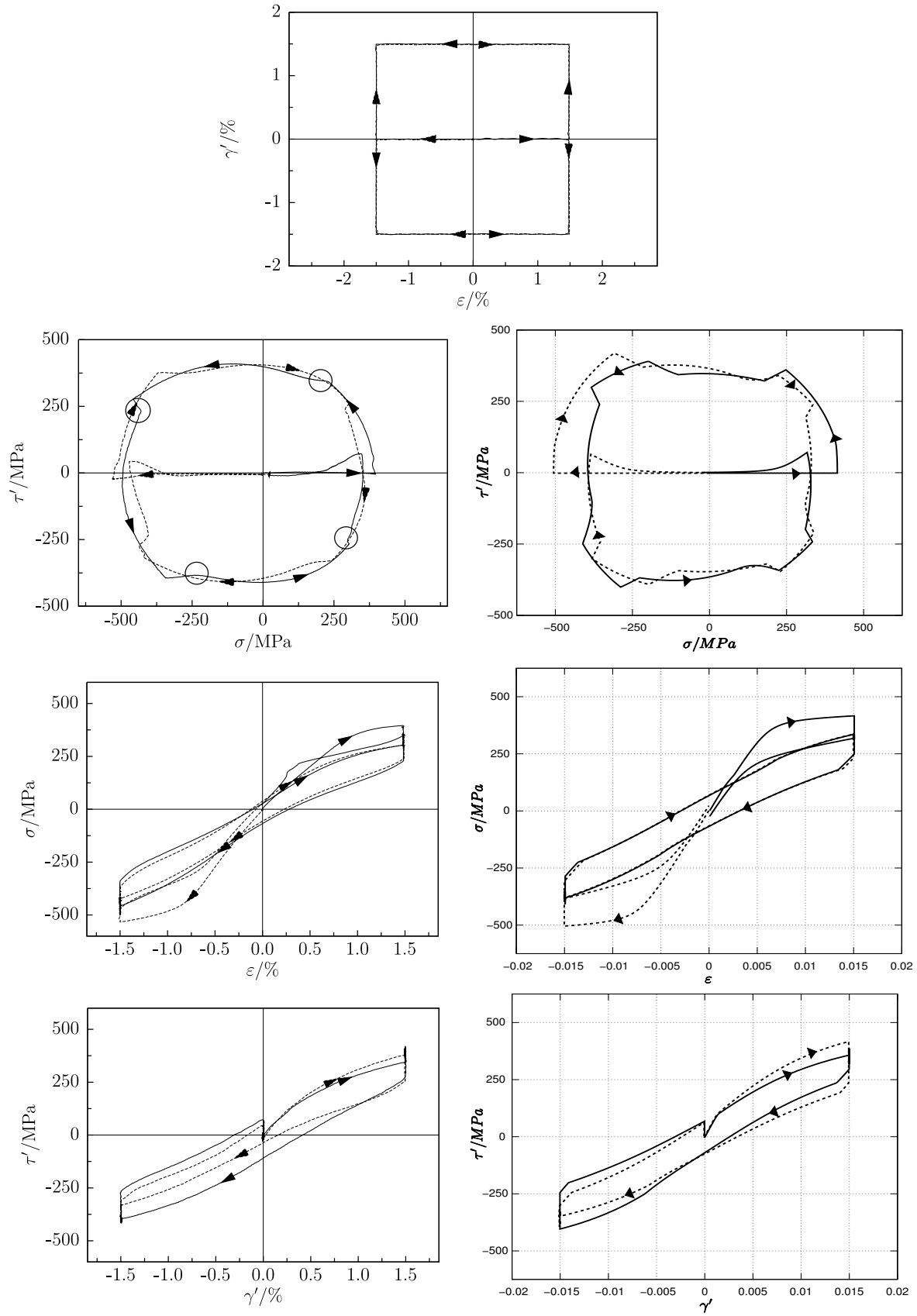

FIG. 4.16: *Chargements "carrés" dans le plan des déformations axiales - déformations de cisaillement. A gauche : résultats obtenus sur des tubes en NiTi, d'après [Grabe et Bruhns, 2009]. A droite, simulations numériques pour des chargements similaires*

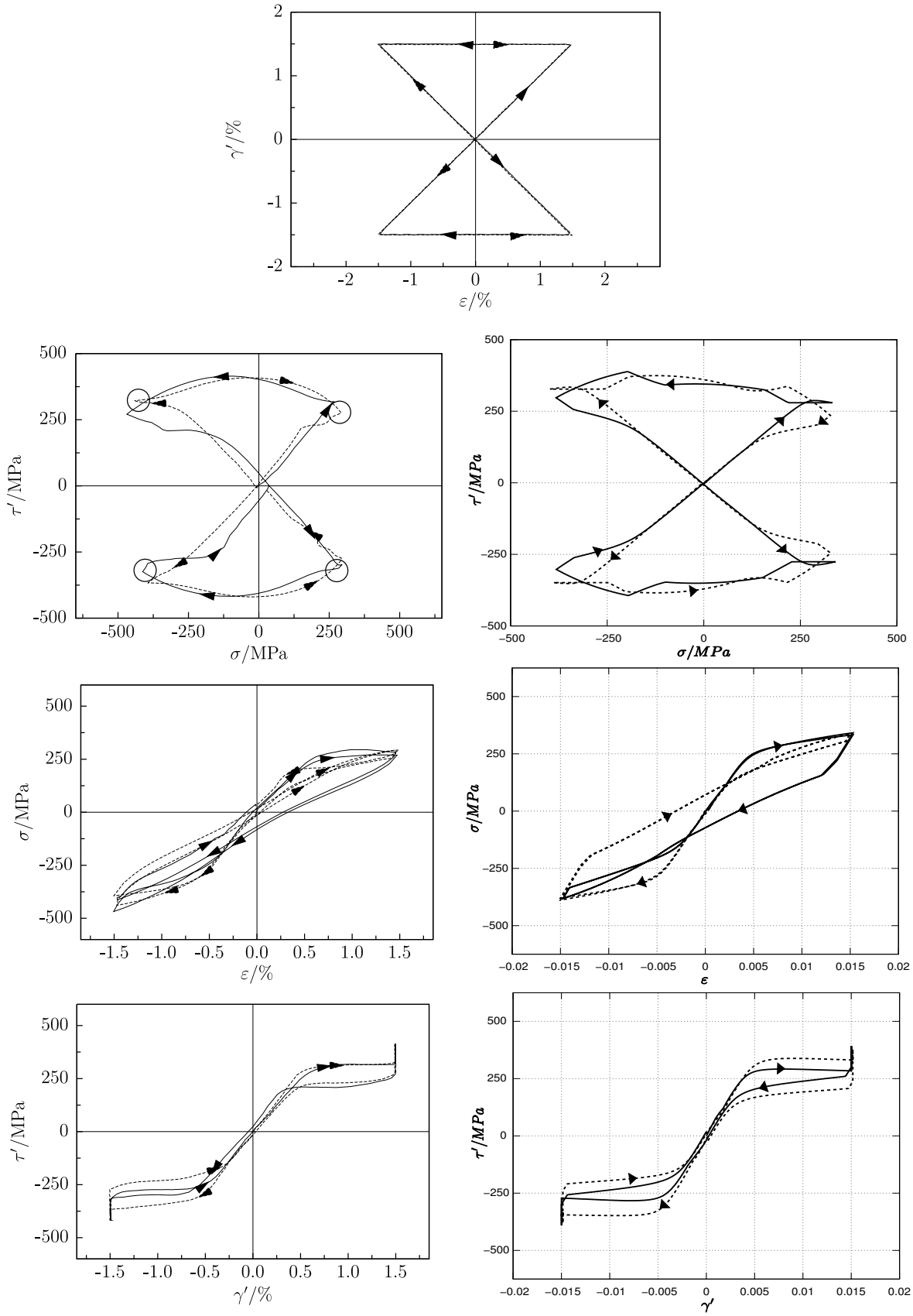

FIG. 4.17: *Chargements en "ailes de papillon" dans le plan des déformations axiales - déformations de cisaillement. A gauche : résultats obtenus sur des tubes en NiTi, d'après [Grabe et Bruhns, 2009]. A droite, simulations numériques pour des chargements similaires*

déformation) afin de stabiliser le comportement du matériau. Avant chaque essai, le matériau est porté à une température de 120°C puis refroidi, afin de s'assurer de démarrer à partir du même état initial. Quatre types d'essais ont été réalisés, en relation avec les points d'intérêts précités :

- Des tests de traction uniaxiale à différentes températures, pour des cycles complets et partiels. L'objectif est de tester la prise en compte de la dépendance du comportement à la température et des cycles partiels (points 1, 2 et 3).
- Des cycles thermiques à contrainte constante, afin de vérifier si les modèles sont capables de prédire la déformation de transformation observée lors de trajets non-isothermes (points 1 et 2).
- Des trajets de chargements en torsion et traction-torsion isothermes, afin de valider la possibilité de simuler des trajets multiaxiaux et non-proportionnels (points 1, 2, 4 et 5).
- Des essais de retour contraint, afin de vérifier la capacité des modèles à simuler des trajets propres aux actionneurs (points 2 et 3)

4.3.2 Identification des paramètres

L'identification des paramètres du matériau utilisé dans cette base de données pose plusieurs difficultés :

- Les tests de traction sur des fils font apparaître une forte localisation de la transformation. Cet effet rend difficile la détermination du paramètre H_f, car la pente apparente de transformation est très faible lorsque la transformation est localisée. Sur les essais de traction-torsion il n'y a pas de localisation, mais la présence d'un gradient de contraintes dans la structure empêche la détermination simple des paramètres matériaux.
- Un essai de DSC n'a pas permis d'observer des pics de transformation, en raison a priori d'un écrouissage important du fil, qui étale la transformation sur une large plage de températures. Les températures de transformation directe et inverse à contrainte nulle pour la martensite autoaccommodée n'ont pas pu être déterminés, ce qui empêche l'identification du paramètre de stabilisation H_s. Ce dernier sera alors déterminé de façon à faire coïncider les températures de transformation de la martensite autoaccommodée et orientée.
- Aucun essai de traction à partir de martensite autoaccommodée n'a été effectué. Les paramètres propres au comportement de réorientation ne sont alors pas directement mesurables, ils devront être estimés.
- Aucun essai ne permet de déterminer le paramètre de dissymétrie traction-compression. Le rapport entre les déformations de traction et de compression est alors estimé à 0,8.

Compte tenu de ces difficultés d'identification, les choix suivants sont proposés :

- Les paramètres matériaux sont identifiés à partir des chargements uniaxiaux isothermes, pour les températures de -20°C et 20°C (voir figures 4.19). Le pseudo-diagramme de phase est élaboré à partir des essais superélastiques à 20, 40 et 60°C. On peut alors déterminer les pentes de transformation, et par extrapolation les températures M_s et A_f (voir figure

4.18). Sur cette figure les contraintes de début et de fin de transformation de tous les essais uniaxiaux ont été reportées (ainsi que les essais thermiques à contrainte constante), afin d'évaluer les écarts possibles entre les pentes de transformation utilisées pour le modèle et les résultats expérimentaux.

– Les paramètres liés au mécanisme de réorientation sont estimés à partir de l'essai effectué à −20°C. On tient aussi compte du fait que lors d'un refroidissement-chauffage à 300 MPa, il n'y a pas de transformation martensitique observée pour la plage de température −20 → 100°C. On peut alors donner une estimation de la limite de réorientation et de la pente de pseudo-écrouissage en réorientation.
– La valeur du paramètre d'accommodation des macles ne pourra pas être prise en compte. Une valeur par défaut lui sera attribuée, sachant que ce paramètre ne perturbera pas les simulations ; dans toutes les simultations présentées, le cas de formation de martensite autoaccommodée n'arrive jamais.
– Le paramètre de stabilisation de la martensite H_s est déterminé de façon à faire coïncider les températures de transformation pour une martensite autoaccommodée et orientée.

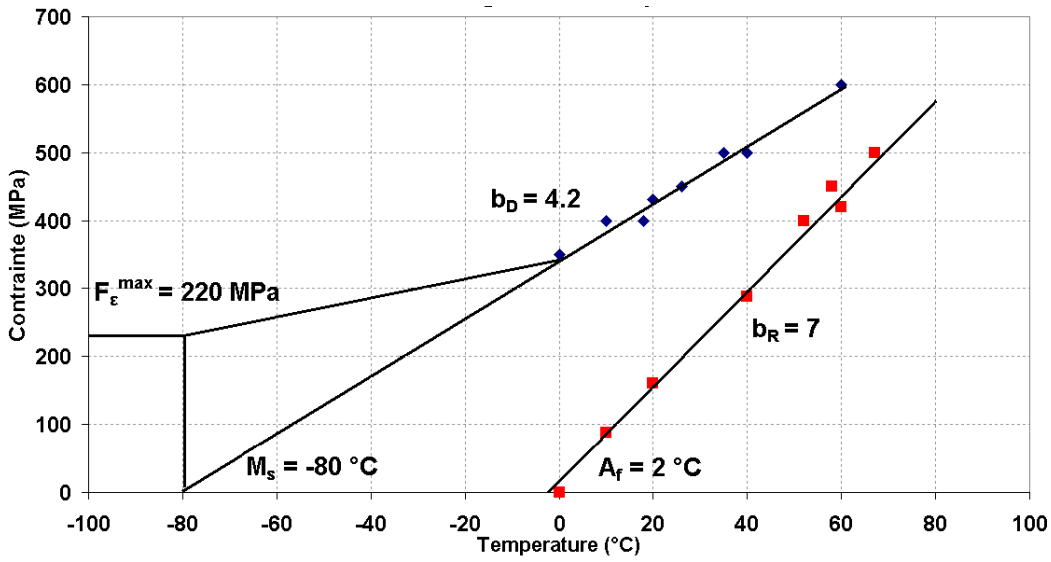

FIG. 4.18: *Pseudo-diagramme de phase identifié à partir des résultats d'essais uniaxiaux*

Tous les paramètres matériaux utilisés sont reportés dans la table 4.4.

4.3.3 Essais isothermes uniaxiaux de traction

Deux types d'essais de traction isothermes ont été réalisés : des cycles complets et des chargements présentant une boucle interne et un cycle complet, pour les températures de −20, −10, 0, 10, 20, 40 et 60°C. Les comparaisons entre les simulations et les essais sont reportées sur les figures 4.20, 4.21 et 4.22.

Quelques remarques générales peuvent être formulées sur la comparaison entre les simulations effectuées et les expériences réalisées en traction uniaxiale.

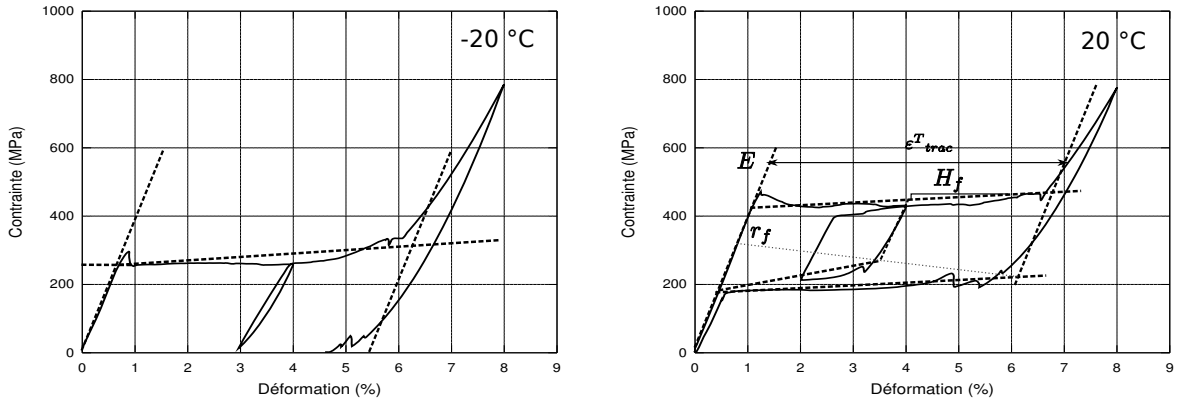

FIG. 4.19: *Courbes isothermes de traction utilisées pour la détermination des paramètres matériaux*

TAB. 4.4: *Paramètres matériaux typiques d'un AMF NiTi*

$E(MPa)$	ν	$\alpha(°C)^{-1}$	$\varepsilon^T_{tracmax}$	$\varepsilon^{TFA}_{tractmax}$	$\varepsilon^T_{compmax}$ (estimé)
39500	0.3	0	0.056	0.053	0.044
$b_d(MPa/°C)$	$b_r(MPa/°C)$	M_S (°C)	A_f (°C)	r_f	
4.2	7	-80	-2	0.25	
$F_\varepsilon(MPa)$	$H_f(MPa)$	$H_{\varepsilon^T}(MPa)$	$H_{twin}(MPa)$	$H_s(MPa)$	
220	2	1635	25000 (estimé)	68.5 (estimé)	

Premièrement le module apparent de l'austénite, qui a été estimé à partir de l'essai à 20°C, n'est pas le même pour tous les essais. Il est légèrement plus faible pour les températures inférieures, et plus fort pour les températures de 40 et 60°C. Le matériau étant supposé austénitique en début d'essai (porté à 120°C), il est peu problable que cet effet résulte du comportement d'une fraction volumique de martensite résiduelle, car dans ce cas, il serait aussi observé pour les essais à 40 et 60°C. Ce comportement est alors peut être lié à la présence de la phase R au début du chargement. La transformation austénite → R a déjà été observée sur des échantillons de NiTi par diffraction de neutrons lors de la première phase de chargement superélastique [Sittner *et al.*, 2006]. Au-delà de 40°C, la formation de la phase R n'est plus observée, le module apparent correspond alors à celui de l'austénite. Le paramètre E que nous avons identifié correspond donc au module apparent du matériau à 20°C, et non au module d'élasticité de l'austénite.

Tous les essais de traction présentent aussi un module apparent de la martensite plus faible que celui de l'austénite. La réversibilité de la transformation, pour les essais à $T > A_f$ écarte la possibilité d'une déformation plastique. Deux hypothèses (complémentaires) permettent d'expliquer cette différence :

– Les interfaces entre variantes de martensite étant mobiles, les variantes formées lors de la transformation martensitique, qui étaient peut être moins bien orientées à cause de contraintes internes, s'orientent progressivement lorsque les contraintes macroscopiques deviennent élevées.
– Le module d'élasticité de la martensite est intrinséquement moins élevé que celui de l'austénite dans les alliages NiTi.

On observe aussi un écart entre la contrainte limite de transformation prédite et celle observée lors des chargements à -10 et -20°C. Le modèle prédit une contrainte de début de transformation plus importante. Cet écart est attribué à la prédiction de la contrainte limite de réorientation, qui influence la contrainte limite de transformation lorsque la déformation moyenne de transformation n'est pas saturée. L'absence d'un essai de réorientation ne permet pas d'affiner l'identification de ce paramètre.
Le comportement simulé à 60°C montre aussi des écarts importants par rapport à la courbe expérimentale. Le pseudo-écrouissage de la transformation mesuré est sensiblement différent de celui observé aux autres températures, on observe une augmentation de la contrainte importante après un premier palier de transformation (vers 550 MPa), ce qui explique les différences observées.
Pour les autres cas, les simulations sont très proches du comportement expérimental, et les limites de transformation directes et inverses ainsi que les boucles internes sont correctement simulées. On peut donc en conclure que le modèle permet de prendre en compte la dépendance à la température du comportement en traction d'un fil NiTi.

4.3.4 Cycles thermiques à contrainte constante

La base de données comporte six essais de refroidissement-chauffage à contrainte constante, pour différents niveaux de contraintes. Les comparaisons entre les simulations et les courbes expérimentales sont présentées figure 4.23. Pour une plage de -20 à 100°C, les essais à 100, 200 et 300 MPa ne présentent pas de transformation martensitique. La faible variation de déformation observée (moins de 1%) est attribuée à la phase R. Le modèle ne prédit pas de transformation martensitique pour ces trois simulations, la variation de déformation est alors nulle sur cette plage de températures. Pour les essais à 400, 450 et 500 MPa, les températures de transformation sont correctement prédites, ainsi que la variation de déformation observée. Il n'y a que les températures de transformation austénite $\rightarrow$ martensite qui sont légèrement surévaluées. Le modèle est donc bien capable, à partir d'une évaluation des paramètres sur des chargements mécaniques, de prédire le comportement du matériau lors d'un cycle thermique à contrainte constante.

4.3.5 Essais isothermes de traction-torsion

Les résultats d'une série d'essais de traction-torsion sont disponibles dans la base de données, à différentes températures et pour différentes valeurs de contrainte axiale (constante durant

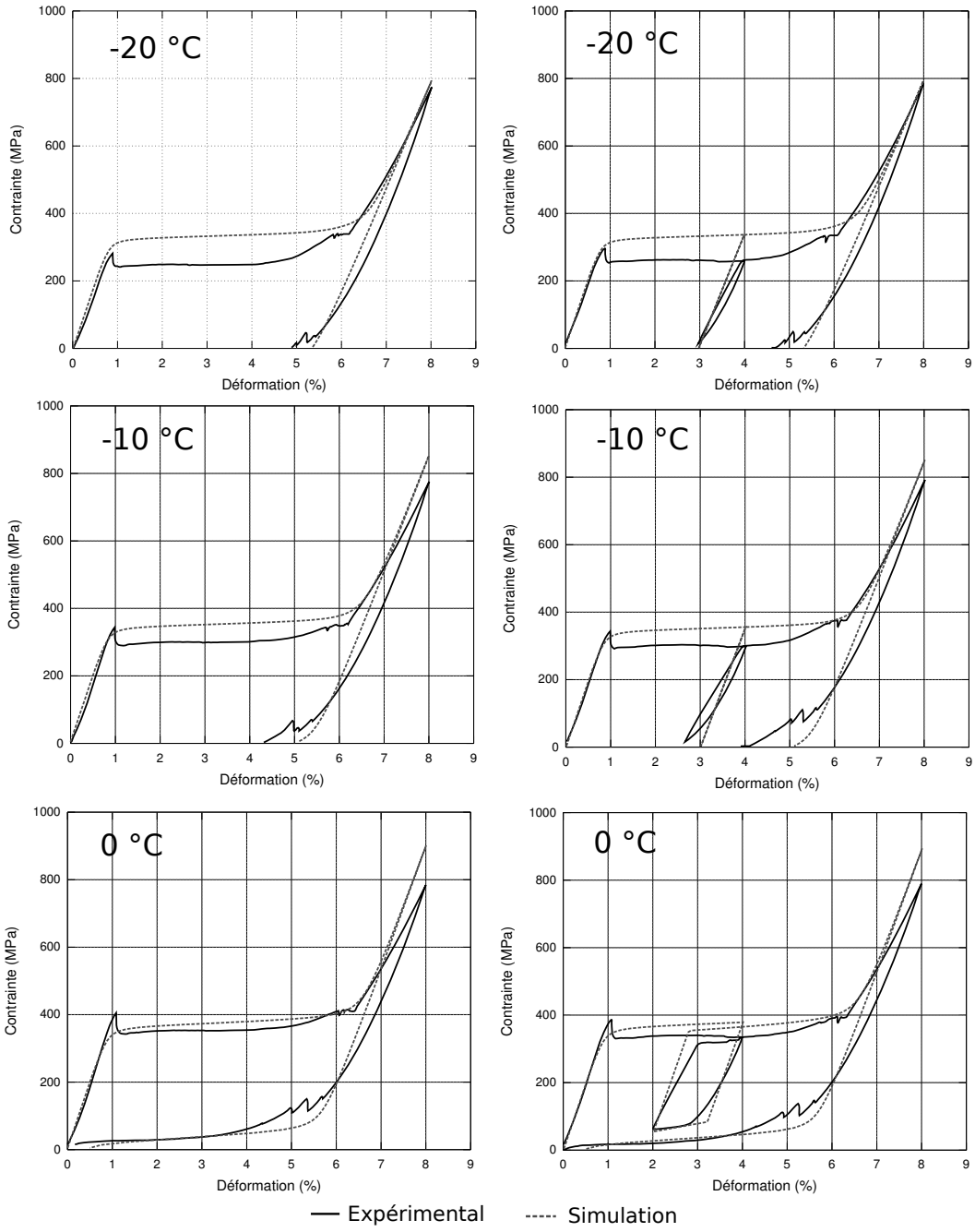

FIG. 4.20: *Traction uniaxiale isotherme - partie 1*

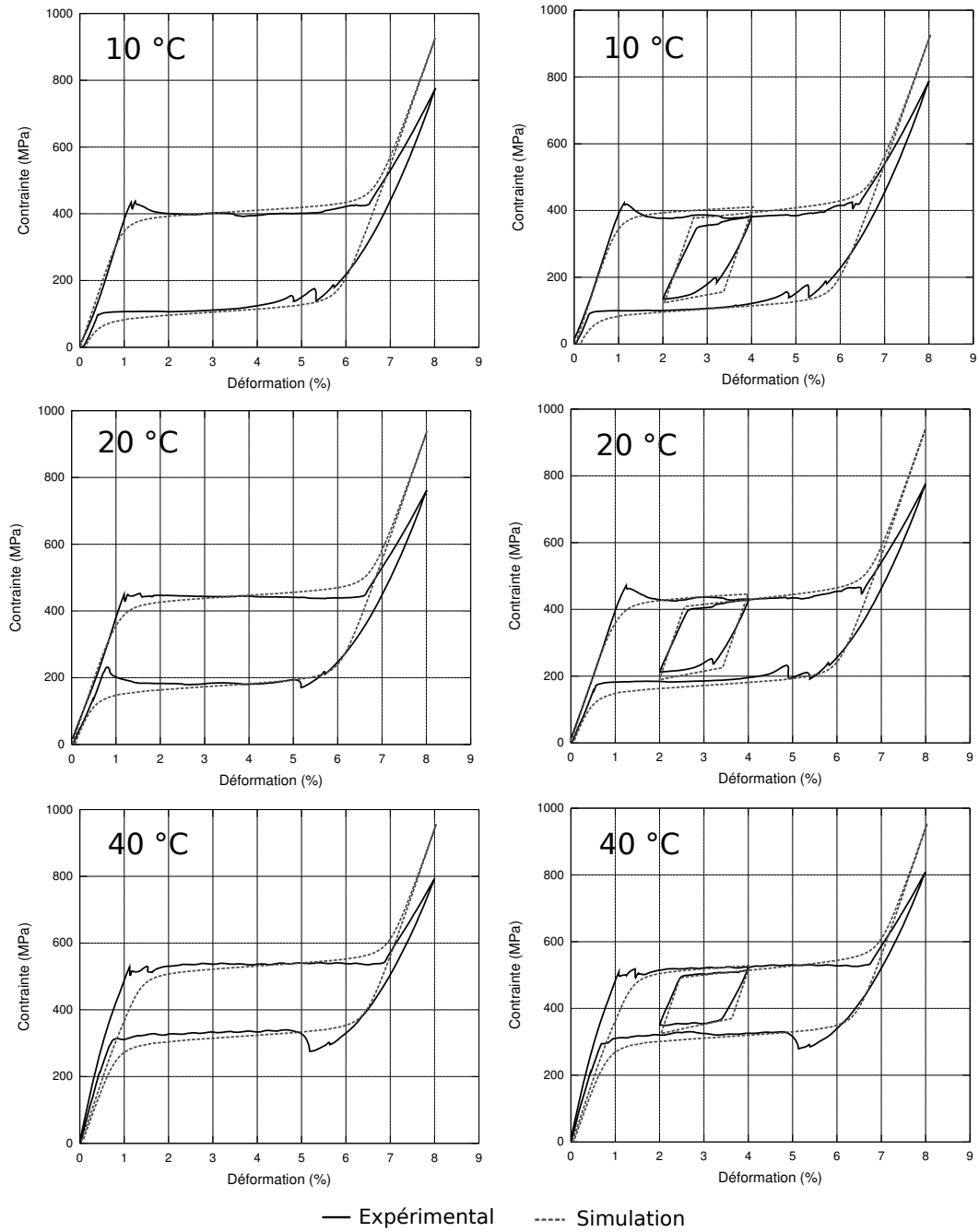

FIG. 4.21: *Traction uniaxiale isotherme - partie 2*

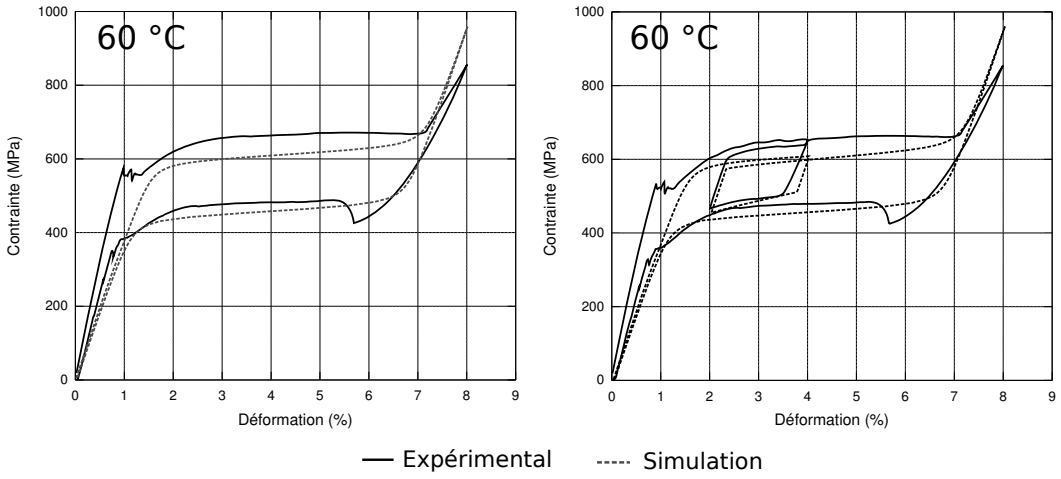

FIG. 4.22: *Traction uniaxiale isotherme - partie 3*

l'essai). Le déplacement angulaire du fil testé est imposé, alternativement, dans un sens puis dans l'autre (10 cycles). Ce type de chargement est alors fortement non-proportionnel et présente un gradient de contraintes et de déformations dans le fil. Ce dernier point impose l'utilisation d'un moyen de calcul permettant de simuler un chargement sur une structure, avec des conditions aux limites variables d'un point à un autre. Nous utilisons alors le code élément finis `ABAQUS`. Le modèle numérique est composé de 8 éléments quadratiques par section, pour 3 sections de fil représentant au total une longueur de $0,1mm$. Seuls quatre cycles complets de torsion (au lieu de 10) sont simulés afin de limiter les temps de calculs, tout en essayant cependant de reproduire certains effets liés au cyclage non-proportionnel.
Les essais sont menés pour les températures de 50, 0, -20 et -40°C, pour deux valeurs de contraintes axiales imposées (24 et 127 MPa). Ils représentent une variété importante de comportements différents, les trois dernières températures étant situées dans une plage proche des températures de transformation. Les comparaisons entre les résultats issus des simulations numériques et la base expérimentale sont présentés figures 4.24, 4.25, 4.26 et 4.27. A chaque essai, l'évolution du couple de torsion en fonction du déplacement radial et l'évolution de la déformation axiale en fonction du déplacement radial sont représentés.
D'une façon générale, nous pouvons observer des écarts importants au niveau de la prédiction du couple de torsion. Le pseudo-écrouissage prédit en transformation est plus faible que celui observé expérimentalement et la déformation de transformation à saturation est atteinte plus rapidement sur les courbes expérimentales. Plusieurs hypothèses permettent d'expliquer cet écart :

– Les observations montrent qu'il n'y a pas de localisation de la défomation en torsion. Or les paramètres de pseudo-écrouissage ont été évalués sur des courbes de traction, qui présentaient une forte localisation de la déformation de transformation. Dans ce cas, la transformation évolue à contrainte quasi-constante et le paramètre de pseudo-écrouissage identifié en traction est donc sous-évalué.
– Pour obtenir un fil de ce diamètre ($0,1mm$), il est nécessaire d'effectuer de multiples passes

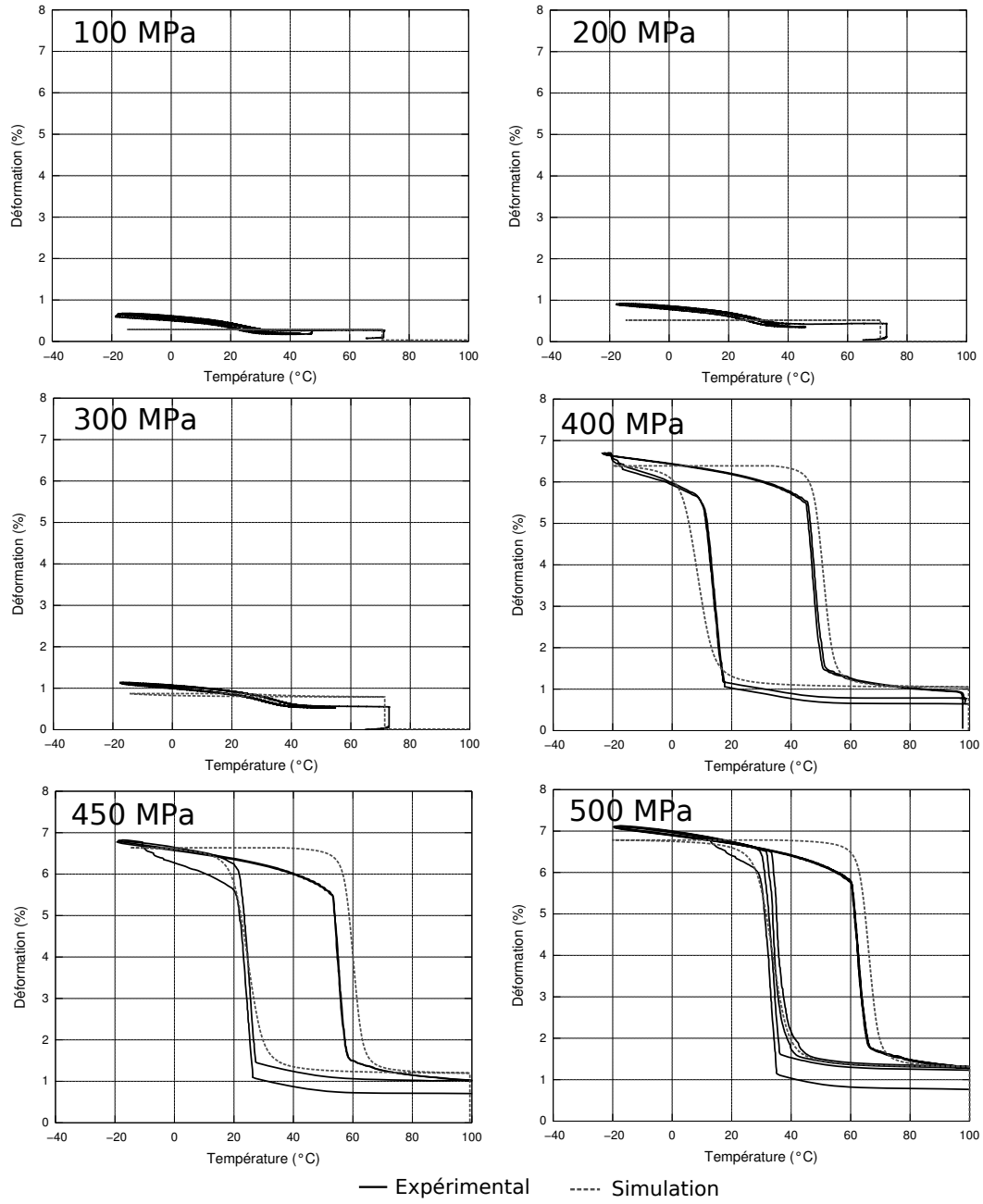

FIG. 4.23: *Cycles thermiques à contrainte constante*

de tréfilage, ce qui induit un écrouissage important et modifie la texture du matériau. Dans le cas d'un matériau fortement texturé, l'expression de la déformation à saturation adoptée dans le modèle (équation 3.64, chapitre 3) n'est plus adaptée. L'effet d'une forte texture permettrait d'expliquer la déformation de transformation plus faible observée lors de sollicitations dans le plan transverse.

– Si les fils ont été traités thermiquement en présence d'oxygène, il est probable qu'une couche d'oxyde se soit formée. Dans ce cas, la présence d'une couche rigide sur la surface du fil aura une influence plus importante lors de chargements en torsion par rapport au comportement en traction, car la contribution de la surface est plus importante dans le cas de la torsion. Nous ne disponsons pas d'informations précises sur les traitements thermiques réalisés pour affirmer ou infirmer cette hypothèse.

Les comportements observés et simulés à -40°C sont ceux qui présentent le moins de différences. Les paramètres matériaux qui concernent les comportements de réorientation semblent moins affectés par la direction de chargement. Cette observation privilégie la thèse de l'effet de localisation de la transformation, par rapport aux effets de texture et d'une possible couche d'oxyde. Par contre, la déformation de transformation observée dans ce cas est plus faible que lors de chargements en traction. On peut supposer que la déformation de transformation macroscopique varie en fonction de la forme du champ de contraintes macroscopiques appliquées (homogène ou hétérogène), car dans ce dernier cas, une multitude de variantes peuvent se former dans un grain en raison à la fois du gradient des contraintes macroscopiques et des contraintes internes dans ce grain. L'interaction entre les variantes formées va alors limiter la valeur maximale de déformation de transformation.
L'évolution de la déformation axiale en fonction du déplacement radial est correctement prise en compte pour presque toutes les simulations. Elle est légèrement sous-évaluée pour les essais à -40°C. Cette concordance atteste de la capacité du modèle à prédire les effets liés à la non-proportionnalité du chargement.
Nous avons montré ici que la simulation de chargements non-proportionnels, dans des structures présentant un gradient de contraintes, est une difficulté majeure en raison des multiples phénomènes pouvant influencer la réponse du matériau. En particulier, les phénomènes de localisation sont très difficiles à détecter et à intégrer dans des modèles de comportement, car ils ne dépendent pas uniquement du matériau, mais aussi de forts couplages entre les propriétés matériaux, la géométrie de la structure et le type de chargement imposé. Pour évaluer les paramètres matériaux en vue de simulations numériques de cas complexes de ce type, il est nécessaire de recourir à des méthodes d'identification plus complexes. Il faudrait développer des méthodes d'identification inverses à partir de mesures de champs, dans le cas de chargements hétérogènes par exemple. Mais ces techniques, au vu du nombre de paramètres et des types de comportements très différents observés pour les AMF, sont complexes à mettre en œuvre. Elles peuvent malgré tout s'avérer indispensables si l'on cherche une bonne précision des simulations de comportement de structures complexes. Ce type de méthodes a déja été

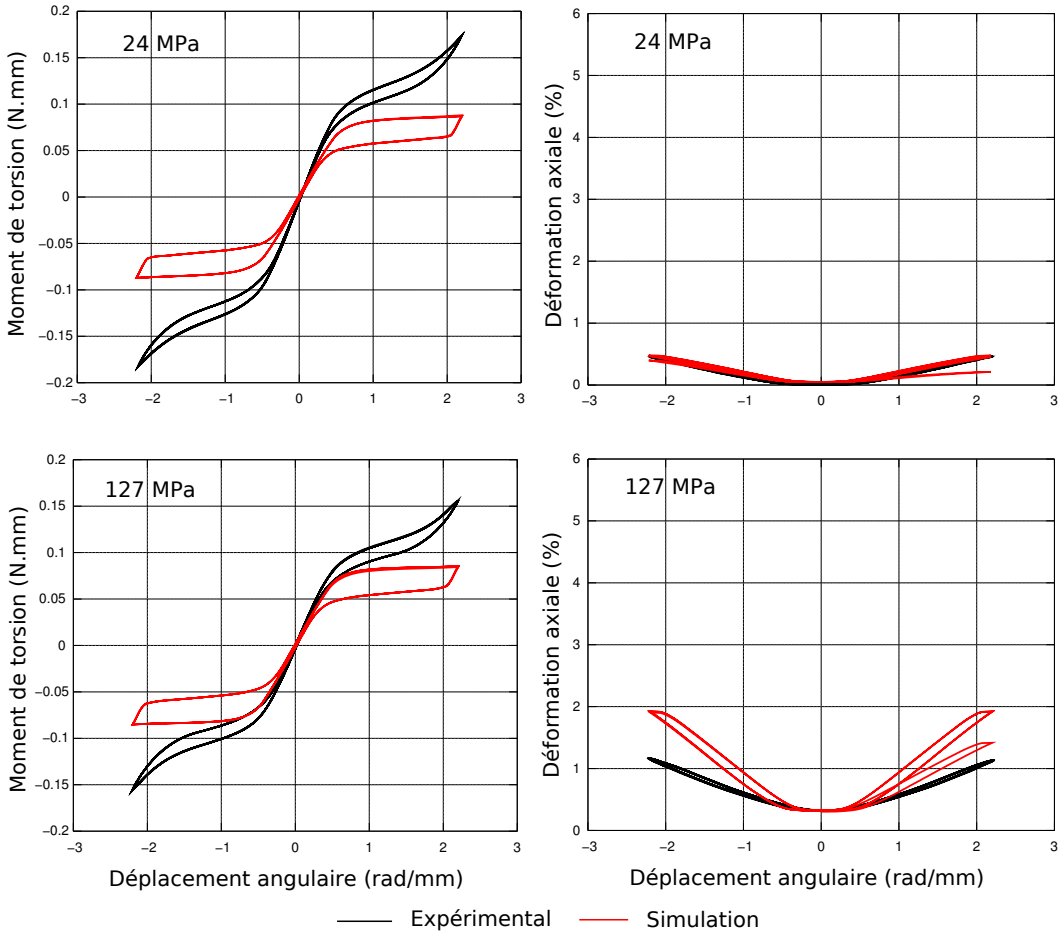

FIG. 4.24: *Cycles de traction - torsion (contrainte axiale imposée) à* 50°C

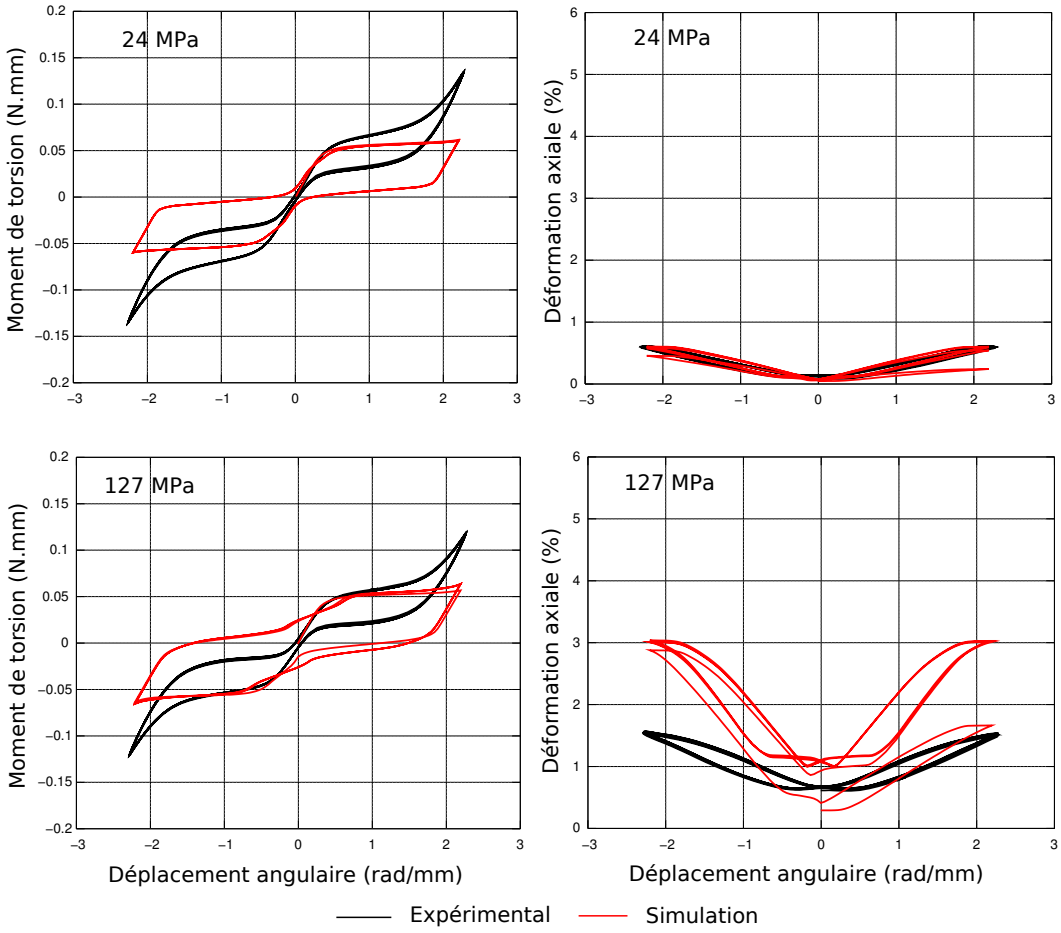

FIG. 4.25: *Cycles de traction - torsion (contrainte axiale imposée) à* 0°C

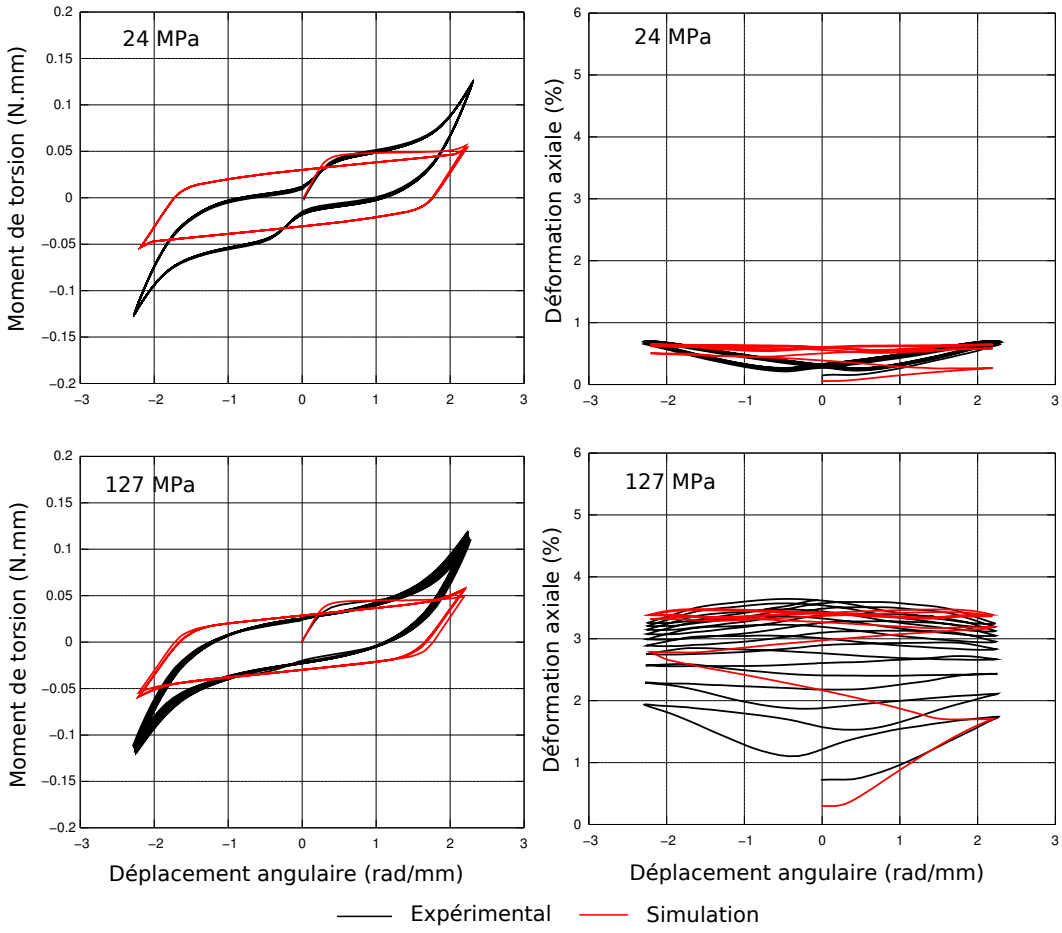

FIG. 4.26: *Cycles de traction - torsion (contrainte axiale imposée) à* -20°C

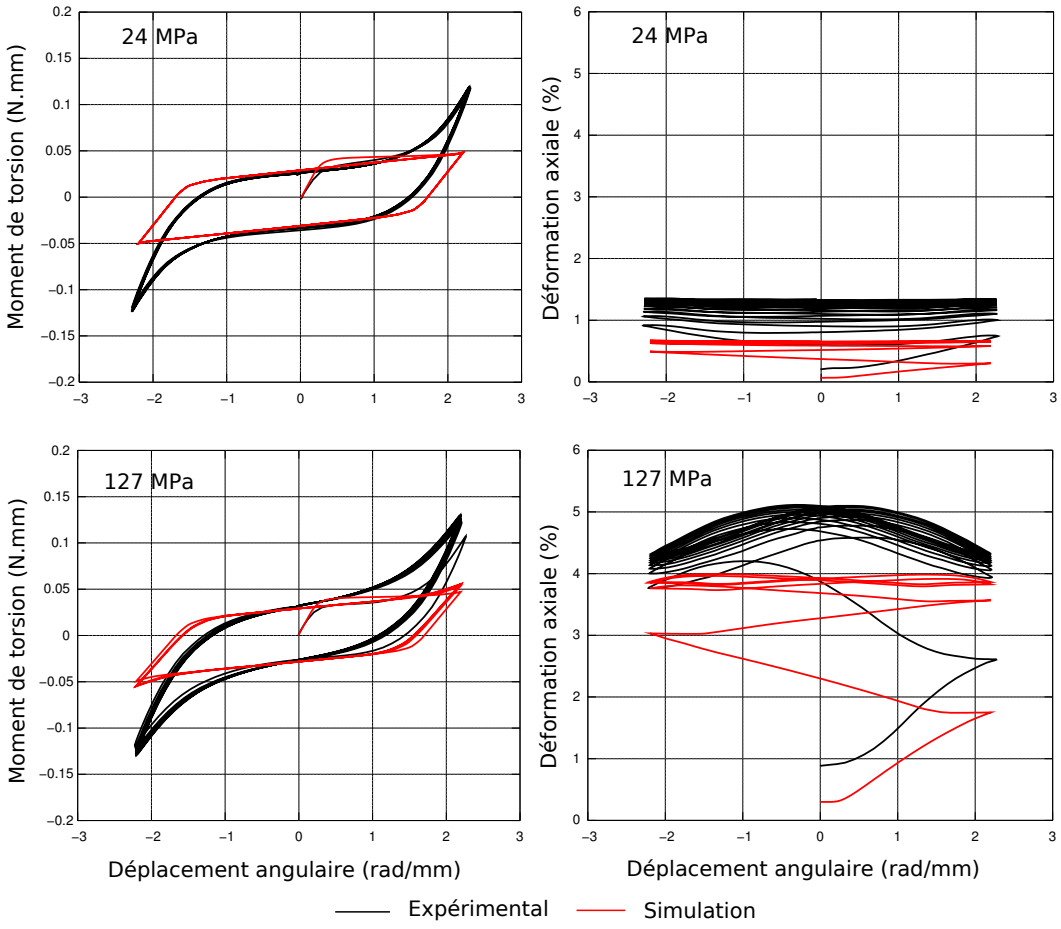

FIG. 4.27: *Cycles de traction - torsion (contrainte axiale imposée) à* -40°C

utilisée pour observer les modes de déformations hétérogènes et les effets de localisations sur des tubes de NiTi [Favier *et al.*, 2007].

4.3.6 Retour contraint

La base de données expérimentale proposée comporte six essais de retour contraints effectués à partir de la température ambiante (23℃). Trois essais sont réalisés pour des déformations imposées de 2%, 3,5% et 5%, en bloquant la déformation sur le plateau supérieur (plateau de transformation austénite → martensite). Trois autres essais sont réalisés sur le plateau inférieur (martensite → austénite) pour les mêmes valeurs de déformations. La comparaison entre le comportement expérimental et les simulations de ces trajets de chargements est présentée sur les figures 4.28 et 4.29. Le comportement mécanique est correctement modélisé, en tenant compte des remarques formulées lors de la comparaison des chargements isothermes en traction. Le point important ici, est d'observer le comportement lors du chauffage et du refroidissement et, en particulier, la valeur de la contrainte maximale obtenue pour chacun des cycles. A ce niveau, le modèle est très prédictif, et les pentes de transformation dans le diagramme (σ, T) sont globalement bien prises en compte. Ce modèle est donc bien adapté pour déterminer la réponse d'actionneurs en AMF dans le cas unidimensionnel. Pour des cas de chargements multiaxiaux et non-proportionnels, il faut tenir compte des remarques explicitées lors de l'interprétation des simulations en traction-torsion.

Conclusion du chapitre

L'objectif de ce chapitre était de présenter, à travers une étude numérique et une comparaison entre les résultats fournis par la simulation et une base de données expérimentale, la capacité de prédiction du modèle développé au chapitre précédent. D'une manière générale, nous observons que de nombreux comportements liés à des trajets de chargements thermomécaniques spécifiques peuvent être modélisés. L'utilisation de la base expérimentale réalisée par l'équipe de l'IP ASCR de Prague nous a permis de valider la méthode d'identification des paramètres matériaux dans le cas uniaxial et de comparer les résultats issus du modèle avec ceux de cette base. La réponse du modèle est alors très proche des résultats expérimentaux, dans la plupart des cas présentés. L'utilisation de cette base a aussi permis de montrer les limites du modèle lors de chargements en traction-torsion. Malgré tout, les tendances observées dans ce dernier cas nous poussent à mettre en cause d'autres phénomènes tels la localisation ou l'influence de la texture cristallographique plutôt que la capacité intrinsèque du modèle de gérer les chargements de ce type.

Plusieurs perspectives de recherche se dégagent de cette comparaison. La première concerne la prise en compte de phénomènes liés à la géométrie et la mise en forme des structures en AMF. Les effets de localisation devront être pris en compte en utilisant, par exemple, des méthodes non-locales, qui supposent une dépendance de l'état local par rapport à un champ caractéristique au voisinage du point considéré. D'un autre côté, l'expression de la déformation à saturation doit prendre en compte les effets de texture du matériau. A plus

long terme, l'influence de la triaxialité des contraintes, ainsi que la présence de forts gradients de contraintes, sur la morphologie de la martensite devront être considérés. Les limites d'utilisation du modèle pourront ainsi être considérablement étendues.
La prise en compte de ces phénomènes doit s'accompagner d'une méthode d'identification des paramètres plus performante. Les mesures de champs sembles bien adaptées, car elles permettent, d'un part, de recueillir un nombre important d'informations à partir d'un essai unique, mais aussi de tester des structures ne présentant pas de phénomènes de localisation.

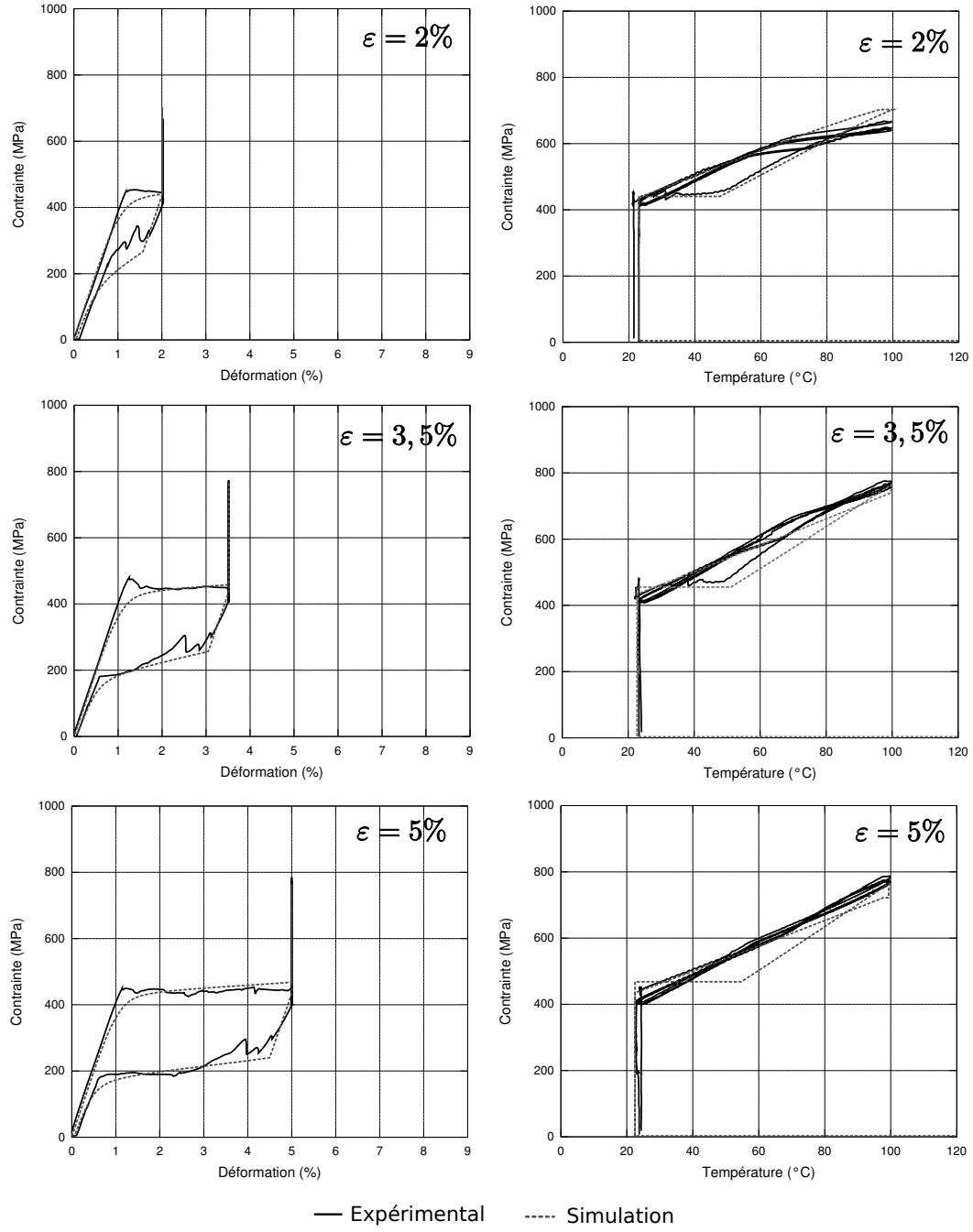

FIG. 4.28: *Cycles de retours contraints - plateau supérieur*

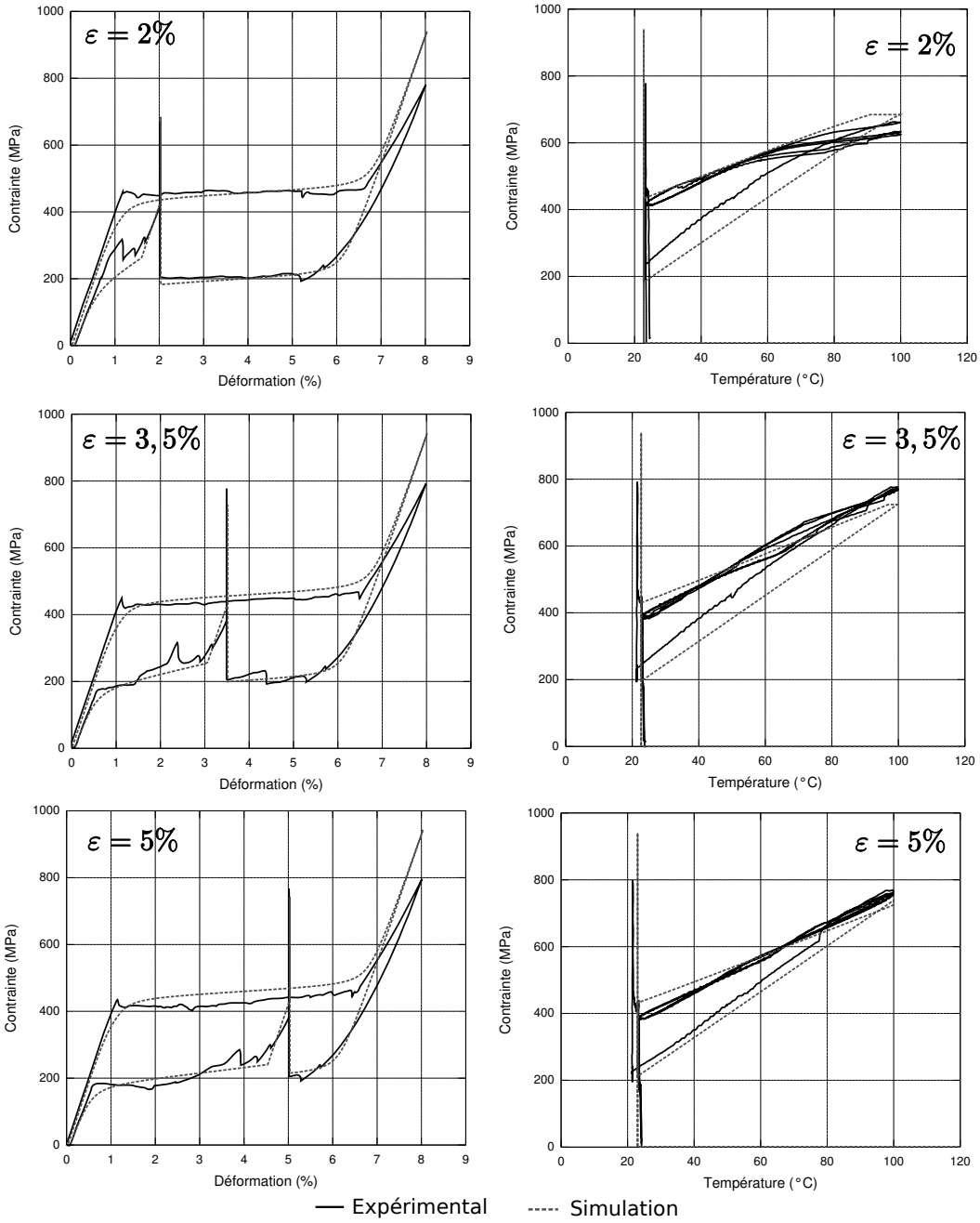

FIG. 4.29: *Cycles de retours contraints - plateau inférieur*

5

Comportement d'un composite alliage à mémoire de forme / élastomère

Sommaire

5.1 Choix et caractérisation des composants et conception du composite 148
5.1.1 Choix des matériaux 149
5.1.2 Caractérisation des constituants 149
5.2 Elaboration des rubans composites 151
5.3 Définition du modèle numérique 153
5.3.1 Etude des interactions structurales 153
5.3.2 Simulation du comportement thermomécanique du composite 159
5.4 Elaboration d'un ruban actionneur linéaire 162
Conclusion 164

L'allégement des structures, l'ajout de propriétés fonctionnelles aux matériaux de structures, constituent une source de défis scientifiques et technologiques majeurs pour les ingénieurs et les scientifiques d'aujourd'hui. Le développement de matériaux composites plus fonctionnels, dit adaptatifs, est l'une des réponses possibles à ces défis. En général, les composites adaptatifs sont constitués d'une matrice polymère dans laquelle sont incorporés des céramiques piézoélectriques ou des alliages à mémoire de forme [Wei *et al.*, 1997]. De nombreux travaux portent sur la caractérisation des propriétés de ces matériaux et sur leur aptitude à apporter des solutions innovantes à des problèmes tels que la réalisation d'ailes à profil variable [Gao *et al.*, 2005], le contrôle des vibrations [Zhang *et al.*, 2006] ou l'augmentation de la résistance aux impacts [Roh et Kim, 2003]. Dans la plupart des composites mis en œuvre dans ces applications, le rôle joué par la matrice reste essentiellement passif. Le caractère adaptatif de leur comportement provient uniquement de l'activation des fils ou des rubans en alliage à mémoire de forme (ou piézoélectriques) qui y sont incorporés. Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à un composite pour lequel le caractère adaptatif est conféré à la fois par les propriétés des fils en AMF qui le constituent, et par les propriétés de la matrice. Pour cela nous utilisons une matrice élastomère, matériau dont les propriétés mécaniques évoluent fortement avec la température. Depuis une vingtaine d'années, le développement d'applications dans des domaines tels que la robotique [Escher *et al.*, 1992, Mertmann *et al.*, 1994], la biomimétique [Garner *et al.*, 2000] ou la transmission de puissance [Neuking *et al.*, 2005] a mis en évidence l'intérêt multiple de la contribution de la matrice élastomère dans le comportement mécanique global de ces matériaux composites. Outre sa capacité à supporter de grandes déformations réversibles, l'élastomère peut faciliter la reprise de forme de l'alliage [Thumann *et al.*, 1986] ou compléter la fonctionnalité de l'AMF par ses propriétés amortissantes. Le couplage des propriétés thermomécaniques des matériaux associés peut de plus mener à des caractéristiques thermomécaniques spécifiques.

Ce type de composite possède un potentiel de développement conséquent, en raison des diversités de comportement et de couplage qu'il présente, mais également pour l'importance des déformations réversibles qu'il est capable de subir sans dommage. La décohésion fibre/matrice constitue, en effet, un problème très important pour les applications des composites de type AMF/époxy [Poon *et al.*, 2005, Payandeh *et al.*, 2009]. Dans le cas des composites AMF/élastomère, la matrice présente une capacité de déformation réversible bien supérieure à celle des matériaux superélastiques les plus performants, ce qui retarde l'apparition des phénomènes de délaminage. Le problème le plus important reste alors celui du dimensionnement des applications utilisant des composites AMF/élastomères, en raison de la complexité des comportements propres des deux constituants et des interactions structurales se produisant entre la fibre et la matrice. Dans une étude portant sur un composite CuAlBe/silicone, Tahiri *et al.* [Tahiri *et al.*, 2004] ont mis en évidence l'importance jouée par les interactions structurales sur le comportement de ce type de composite. Les auteurs ont

étudié le comportement en compression d'un plot constitué d'un ressort superélastique en alliage CuAlBe enrobé dans une matrice silicone (voir figure 5.1).

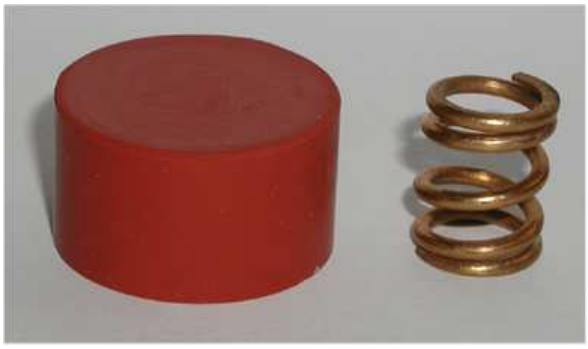

FIG. 5.1: *Constituants du plot composite : cylindre en silicone et ressort en CuAlBe, d'après [Tahiri* et al.*, 2004]*

Les paramètres matériaux (M_s et température de transition vitreuse T_g) et les données géométriques (hauteur H et diamètre D_0 du plot, diamètre d'enroulement D et diamètre d du fil AMF) sont indiqués dans le tableau 5.1.

TAB. 5.1: *Paramètres matériaux et données géométriques du plot composite étudié, d'après [Tahiri* et al.*, 2004].*

Elastomère	**AMF**
Elastosil® M4370	CuAlBe polycristallin
$T_g = -60$°C	$M_f = -100$°C
$D_0 = 30mm$	$D = 12,5mm$
$H = 24,3mm$	$d = 2,5mm$

Ces deux constituants présentent des réponses mécaniques non linéaires avec hystéresis (figures 5.2 a et 5.2 b). Le composite qui en résulte possède ainsi une forte capacité d'amortissement et une déformation réversible pouvant atteindre 27% (fig. 5.2). La forme en ressort du composant AMF permet de limiter la déformation dans le fil. Ainsi, quand le plot est comprimé de 4 mm, la déformation maximale dans le fil n'excède pas 0,2%, alors que la déformation moyenne dans l'élastomère est égale 18%.

Dans cette étude exploratoire du comportement mécanique des composites AMF/élastomères, des lois de comportement simples ont été adoptées pour décrire la réponse mécanique des constituants. Ainsi le ressort en AMF est supposé présenter un comportement purement élastique, ce qui est vérifié tant que la flèche imposée ne dépasse pas 4 mm. La vitesse de déplacement imposée (4 mm/min) restant faible, un modèle de Kelvin est utilisé pour décrire le comportement viscoélastique du polymère. Seule la charge est modélisée. Avec ces restrictions, les deux modèles décrivent de façon satisfaisante le comportement des deux

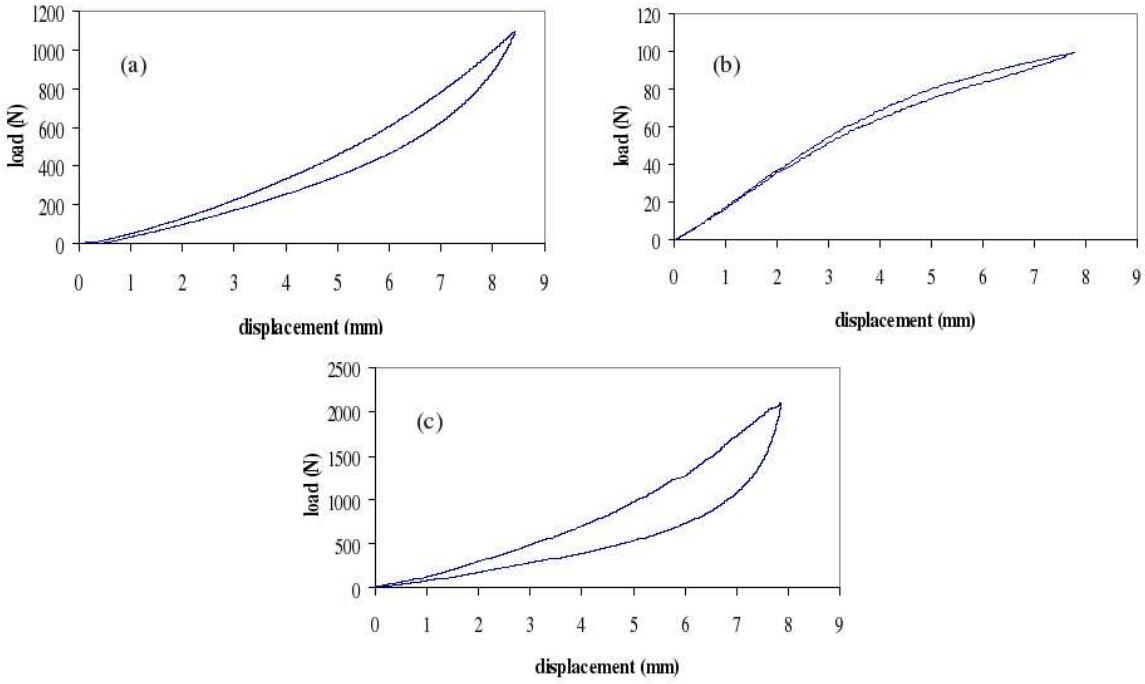

FIG. 5.2: *Comportement du plot composite en compression : courbes force-déplacement pour a) l'élastomère, b) le ressort en AMF, et c) le composite, d'après [Tahiri* et al.*, 2004]*

composants pris isolément. Pour modéliser le premier stade du comportement du composite (déplacement inférieur à 4 mm), les auteurs ont adopté une approche analytique simple en considérant un modèle parallèle (fig. 5.3). Dans ce cas, les effets d'interaction entre les deux constituants sont négligés.

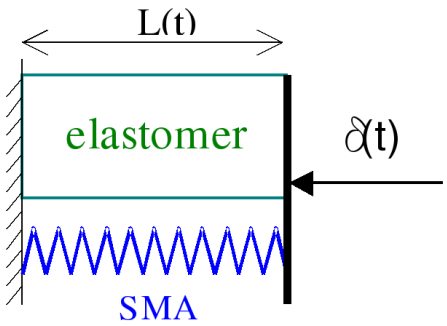

FIG. 5.3: *Modèle parallèle de comportement du composite, d'après [Tahiri* et al.*, 2004].*

La comparaison entre les résultats issus de cette approche simplifiée et la réponse expérimentale (fig. 5.4) montre que l'influence des interactions entre les deux composants ne peut être négligée que lors des touts premiers stades de la déformation (déplacement inférieur à 1 mm). Au-delà, une divergence significative apparaît entre la prévision donnée par le modèle parallèle et la réponse expérimentale du composite. Le recours à un modèle d'analyse de structure, de type éléments finis, est donc incontournable pour modéliser la réponse d'un tel

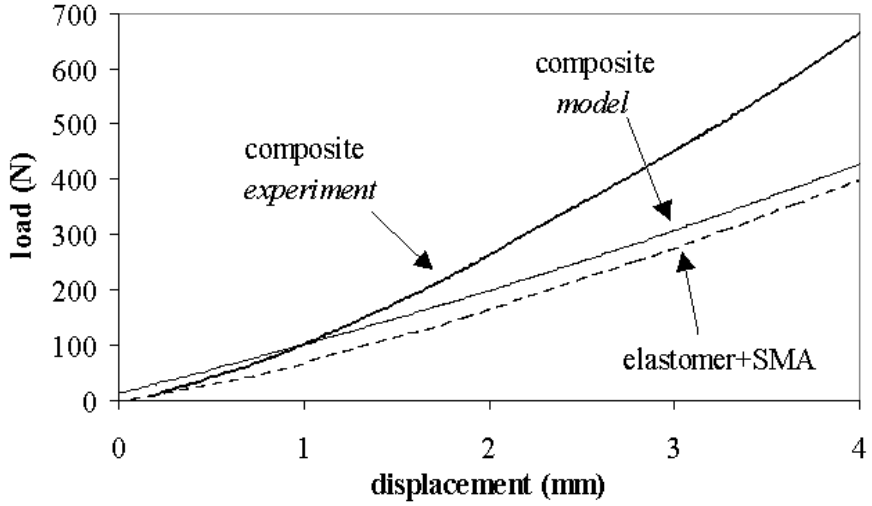

FIG. 5.4: *Comparaison entre le comportement du plot composite, et un modèle de comportement simplifié. Mise en évidence de la présence de fortes interactions de structure, induisant une augmentation de la rigidité du plot composite par rapport au comportement de ses constituants [Tahiri* et al.*, 2004].*

composite.

Plusieurs conclusions importantes peuvent être tirées de cette étude :

- Pour tirer bénéfice de la forte capacité de déformation des matrices élastomères, il est nécessaire de solliciter le composant AMF en torsion ou en flexion de façon à limiter les déformations maximales au sein de ce renfort.
- Il est nécessaire d'optimiser la géométrie du composant AMF pour éviter qu'un délaminage localisé ne se produise, du fait d'une trop grande différence de déformation entre le fil ou le ruban en AMF et la matrice élastomère.
- Il n'est pas possible de négliger les interactions entre les constituants du composite : ces effets de structure nécessitent d'utiliser une modélisation par élément finis.
- Il est nécessaire de mettre en œuvre des modèles de comportement mieux adaptés à la description de la réponse thermomécanique de l'AMF et à celle de l'élastomère, si l'on veut décrire le comportement non linéaire du composite au cours d'un cycle complet charge-décharge et à des températures différentes.

Ces conclusions sont à la base des choix réalisés dans l'étude du composite alliage à mémoire de forme/élastomère présentée dans ce chapitre. Ces choix concernent à la fois la conception et l'élaboration du composite étudié, le choix des modèles de comportement pour les constituants et la réalisation de la simulation numérique avec le code de calcul par élément finis `ABAQUS`.

5.1 Choix et caractérisation des composants et conception du composite

Les résultats issus de l'étude de Tahiri *et al.* [Tahiri *et al.*, 2004] ainsi que l'analyse de la littérature concernant les applications des composites AMF/élastomères [Escher *et al.*, 1992, Mertmann *et al.*, 1994, Neuking *et al.*, 2005] nous ont amené à étudier une structure en "ruban" constituée d'un fil en NiTi enrobé dans une matrice en élastomère (voir figure 5.5). Cette géométrie plate et flexible permet de s'adapter à une multitude d'applications, en particulier dans le domaine biomédical (dispositifs de contention par exemple). Un tel ruban composite présente l'intérêt de pouvoir épouser une forme complexe, tout en disposant de propriétés fonctionnelles. L'utilisation d'un fil ondulé permet d'obtenir des déplacements importants du ruban tout en limitant la déformation dans le fil.

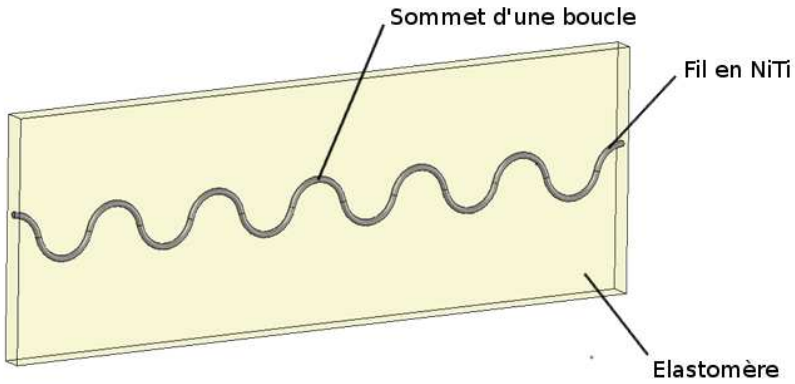

FIG. 5.5: *Schéma d'un ruban composite*

L'un des intérêts majeurs présenté par l'association d'un AMF et d'un élastomère est le fort couplage de leurs propriétés thermomécaniques. Le module apparent d'un élastomère est sensible à la température, sa rigidité diminuant lorsque la température augmente. Concernant les AMF, le comportement mécanique est très dépendant de la température mais, globalement, la rigidité augmente avec la température. L'objectif de cette étude consiste à coupler des matériaux présentant des comportements thermomécaniques variés sur une plage de températures de 20 à 80°C. Les intérêts sont multiples : l'évolution des comportements en fonction de la température de l'alliage et de l'élastomère sont antagonistes, ce qui permet de définir un matériau composite disposant d'une capacité de déformation importante avec un comportement thermomécanique bien spécifique. Une autre possibilité est de prédéformer le composant en AMF à l'état martensitique avant de fabriquer le composite. Par effet Joule, il sera alors possible de commander la géométrie du ruban, et d'obtenir un actionneur linéaire.

5.1.1 Choix des matériaux

Le choix des matériaux est une étape importante lors de la définition d'un composite permettant de répondre aux objectifs qui viennent d'être définis. Pour obtenir un AMF présentant une transformation de phase dans la plage de température définie, il faut que la température de fin de transformation martensite → austénite soit de l'ordre de 50°C. Il sera donc possible d'induire une transformation martensitique par l'application d'une contrainte, et d'observer un retour en phase austénitique par chauffage. Le fort couplage entre les conditions d'élaboration du Nickel-Titane et son comportement macroscopique permet d'obtenir avec précision un comportement thermomécanique spécifique. Le choix de ce matériau est aussi motivé par sa résistance à la fatigue plus importante que les AMF base cuivre (ce qui est primordial en vue du développement d'actionneurs), sa déformation de transformation importante, et la présence de la phase R dont nous verrons qu'il est possible de tirer profit. Afin de respecter ces spécifications, l'alliage sélectionné est un NiTi (48.9% at. Ni) de diamètre $0,75mm$ écroui à 44,7% puis porté à 450°C pendant 20 minutes. On peut vérifier sur un essai de calorimétrie différentielle (voir figure 5.6) que les températures de transformation correspondent à notre cahier des charges. Nous observons aussi l'apparition de phase R. Nous verrons plus tard qu'il est possible de tirer profit de cette phase lors de la définition d'un actionneur linéaire. L'élastomère doit conserver une bonne tenue mécanique dans la plage de température définie. Un polyurethane ALLRANE PX 14325 fourni par la société ALLRIM satisfait nos conditions d'usage.

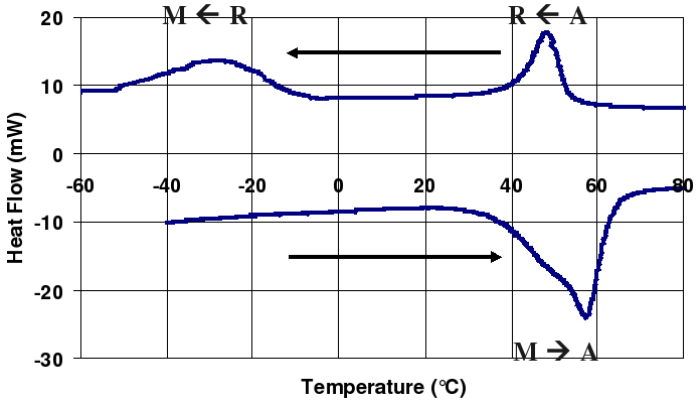

FIG. 5.6: *Essai de DSC sur le fil de NiTi utilisé - mise en évidence des températures de transformation*

5.1.2 Caractérisation des constituants

Plusieurs essais permettant de caractériser le comportement des matériaux choisis pour réaliser le composite ont été menés. Il est nécessaire de bien connaître le comportement des constituants afin de définir les dimensions du ruban composite. Il faut aussi que l'on puisse identifier les paramètres matériaux nécessaires à la simulation numérique. Le modèle utilisé pour simuler le comportement du fil en AMF est celui présenté au chapitre 3.

Le fil en NiTi est testé en traction à 23 et à 80°C afin de déterminer son comportement dans la plage de température d'utilisation du ruban composite. Un essai supplémentaire à l'état martensitique ($T = -60$°C) est réalisé pour déterminer les paramètres liés au mécanisme de réorientation. Les essais sont réalisés à une vitesse de déformation de $3.10^{-4}s^{-1}$. Afin de s'assurer de la pertinence de la modélisation du comportement du fil, un essai de refroidissement-chauffage à contrainte constante ($200MPa$) est réalisé. Ces essais sont reportés figure 5.7 et comparés à la modélisation. Deux essais de traction supplémentaires à 40 et 60°C (non représentés) ont permis de déterminer le pseudo-diagramme de phase de l'alliage. La méthode d'identification des paramètres matériaux (voir tableau 5.2) est similaire à celle présentée dans le chapitre 4.
Nous pouvons noter qu'à 23°C, à contrainte nulle le fil est en phase R. On observe un premier plateau correspondant à la réorientation de cette phase, puis un deuxième plateau correspondant à la transformation de la phase R en martensite orientée. Ces phénomènes n'étant pas pris en compte dans le modèle, une différence significative est observée entre la prédiction numérique et le comportement effectif en début de chargement. Néanmoins le bon accord entre le modèle et le comportement observé lors d'un cycle de refroidissement-chauffage sous contrainte constante, permet de valider les paramètres matériaux utilisés.

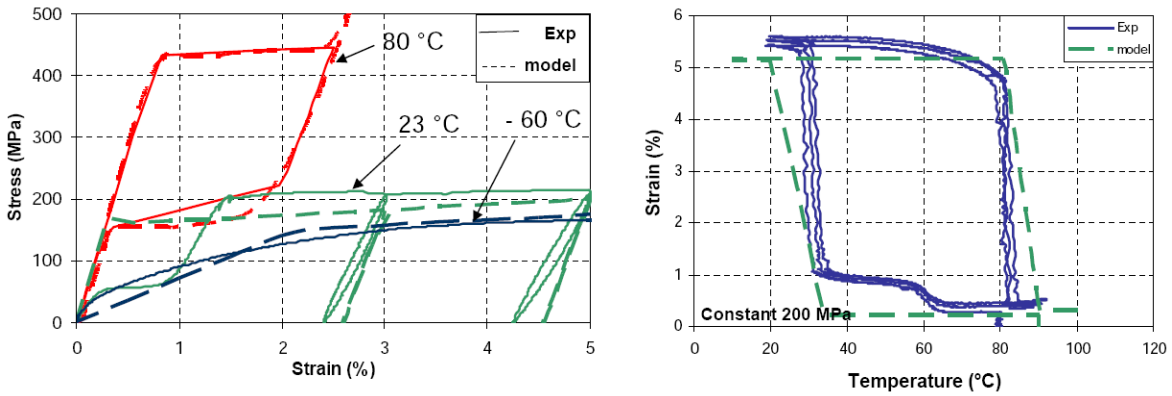

FIG. 5.7: *Comportements expérimental et simulé du fil en Niti, pour des essais isothermes à différentes températures (à gauche), et un essai de refroidissement-chauffage à contrainte constante (à droite)*

TAB. 5.2: *Paramètres matériaux utilisés pour la simulation du comportement du fil en NiTi*

$E(MPa)$	ν	$\alpha(°C)^{-1}$	$\varepsilon^T_{tracmax}$	$\varepsilon^{TFA}_{tractmax}$
55900	0,3	0	0,05	0,05
$\varepsilon^T_{compmax}$	$b(MPa/°C)$	M_S (°C)	A_f (°C)	r_f
0,04	5	-10	48	0,25
$F_\varepsilon(MPa)$	$H_f(MPa)$	$H_{\varepsilon^T}(MPa)$	$H_{twin}(MPa)$	$H_s(MPa)$
150	2,2	650	8000	48,7

Des essais à différentes températures ont été menés sur des échantillons en élastomère, afin de déterminer la dépendance à la température du module apparent. Tous les essais ont été réalisés à une vitesse de déformation constante de $5,6.10^{-3}s^{-1}$. La figure 5.8 montre les résultats expérimentaux et simulés pour une déformation nominale maximale de 0,2. En raison des faibles non-linéarités observées, on considère un comportement élastique linéaire. Ce comportement est toutefois dépendant de la température. La rigidité du matériau chute d'environ 30% entre un chargement à température ambiante et un chargement à 80°C.

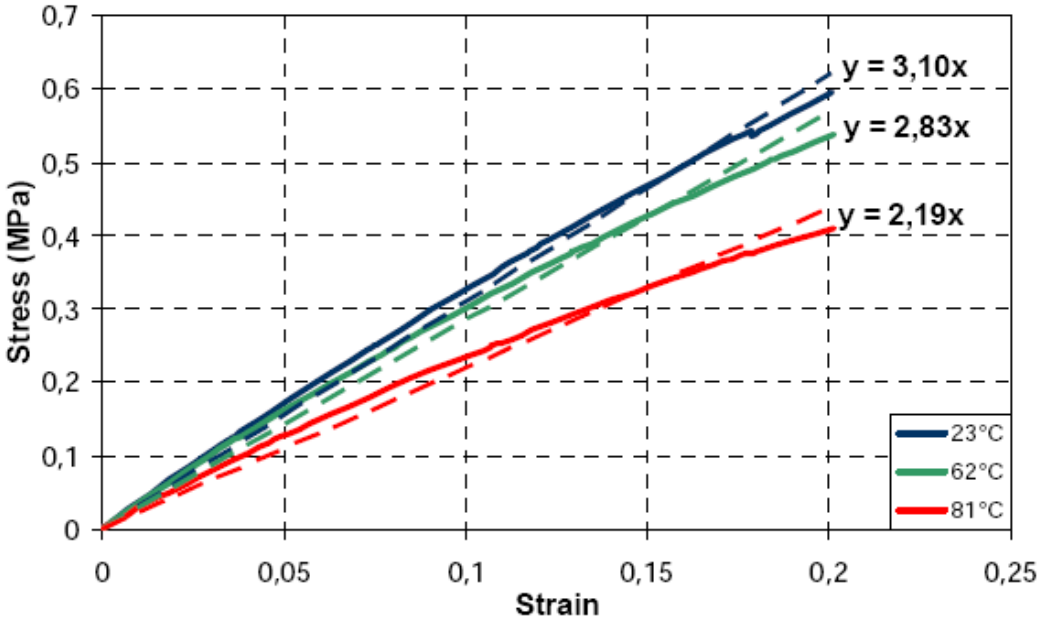

FIG. 5.8: *Comportement de l'élastomère à différentes températures*

5.2 Elaboration des rubans composites

La première étape de fabrication d'un composite de ce type est la mise en forme du fil ondulé. Selon le diamètre des ondulations (appelées aussi boucles) souhaité, un "peigne" en laiton est réalisé à l'aide de pions en acier emboutis sur un support comportant des trous alignés (voir figure 5.9). Le fil est partiellement enroulé sur les pions, qui serviront à le maintenir lors de la mise en forme. Afin d'obtenir une forme ondulée, il est nécessaire de porter à haute température le fil maintenu grâce au peigne. Ce traitement de mise en forme va aussi servir à régler les températures de transformation en fonction du cahier des charges ($A_f \approx 50$°C).
L'enrobage du fil est une opération plus délicate. Habituellement, pour obtenir des plaques en élastomère, un moule vertical est utilisé et une opération de coulage se fait à partir d'un mélange de composants du polymère (prépolymère + allongeur), porté à une température variant de 40°C à 80°C suivant sa viscosité. L'utilisation d'un agitateur mécanique permet d'homogénéiser le mélange. Ce procédé a l'inconvénient d'emprisonner beaucoup de bulles d'air dans le polymère, qui ne peuvent s'échapper si la viscosité est trop importante. Il est

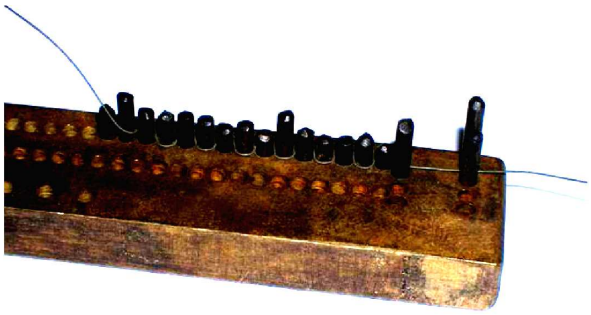

FIG. 5.9: *Mise en forme du fil ondulé*

alors indispensable de procéder à un dégazage sous vide. En raison du temps de solidification assez faible, une pompe à vide puissante doit être utilisée. Ce procédé est illustré figure 5.10a.

a) b)

FIG. 5.10: *a) procédé de dégazage du mélange. b) Opération de coulage*

Plusieurs additifs, qui ne modifient pas significativement les propriétés de l'élastomère à l'état final, peuvent être utilisés pour modifier la viscosité du mélange. Lors d'un procédé de coulage pour des plaques minces (environ $2mm$ d'épaisseur), il faut être attentif à cette viscosité ainsi qu'au temps de solidification, afin de pouvoir remplir tout le moule en évitant d'emprisonner des bulles d'air. Pour augmenter le temps de manipulation, les surfaces du moule sont préalablement chauffées.

Lors de la réalisation de composites AMF/élastomère, si le fil est à l'état martensitique et a subi une prédéformation, il est impératif de ne pas le chauffer pour éviter la transformation de phase austénitique. La température de retour austénitique de l'AMF utilisé est de 50°C environ. La polymérisation doit donc s'effectuer en-dessous de cette température. La

température de coulage définie est alors limitée à 40°C, ce qui implique un mélange avec une viscosité élevée, et un temps de polymérisation rapide. Il faut enchaîner les étapes de fabrication rapidement. Le coulage se fait dans un moule réalisé sur mesure ; deux plaques formant les bords du moule sont pliées à une extrémité afin de faciliter l'opération (voir figure 5.10 b). Un cadre intercalaire sert au positionnement et au maintien des fils ondulés ; il définit également l'épaisseur de la plaque coulée. Dans chaque plaque, six fils sont enrobés dans la matrice élastomère. Une opération de découpage est ensuite nécessaire pour obtenir les rubans. L'élaboration des échantillons a été effectuée en collaboration avec Mr Rosier de la société ALLRIM.

5.3 Définition du modèle numérique

L'étude du plot numérique menée par Tahiri *et al.* [Tahiri *et al.*, 2004] a montré qu'un modèle de type parallèle ne permettait pas de simuler avec précision le comportement d'un composite AMF/élastomère, en raison de la présence de fortes interactions de structures. L'utilisation d'un modèle de type éléments finis semble plus approprié, car il permet de tenir compte de la géométrie des constituants. Une étude des interactions de structures dans un ruban composite tel que celui qui a été défini s'avère une nécessité. Cette vérification a été réalisée sur un ruban composite de géométrie similaire, en utilisant un élastomère photoélastique (polyuréthane). Il est alors possible de visualiser le champ de contraintes résultant des effets d'interactions au voisinage de l'interface fil/matrice. La comparaison qualitative des champs de contraintes observés et simulés par éléments finis permet de valider la prise en compte de ces interactions. Il a été nécessaire de définir un autre ruban composite afin de mener cette étude portant sur les interactions de structure, car le matériau répondant au cahier des charges n'était pas photoélastique. De plus, pour faciliter sa mise en œuvre, il était nécessaire de disposer d'un AMF superélastique à température ambiante.

5.3.1 Etude des interactions structurales

Le fil utilisé est dans cette partie de l'étude est un NiTi (50,6% at.Ni) de diamètre 0,25mm, écroui à 22% et traité à 350°C pendant 15mn. Les comportements des constituants ont été déterminés par des essais de traction. Le rayon intérieur des boucles est de 2mm. Il faut noter que la technique de fabrication de ce premier composite est différente de celle présentée plus haut. En effet, nous souhaitions obtenir des rubans assez minces (moins d'1 mm) afin d'observer un champ de contraintes exploitable qualitativement. Une épaisseur aussi faible ne pouvait pas être obtenue par coulée. Des batonnets de polymère ont donc été chauffés sur une plaque recouverte de Teflon®, le fil étant ensuite inséré dans le matériau fondu, avant de presser le tout à l'aide d'une masse, dont la valeur permettait de contrôler l'épaisseur. Le fil est superélastique à température ambiante, il n'y avait pas de problème lié à une possible transformation de phase à éviter lors de l'élaboration du ruban.

Principe de la photoélasticimétrie

Lorsqu'un matériau photoélastique est soumis à des efforts, ses propriétés optiques varient en fonction des contraintes qui lui sont appliquées. Il s'agit d'une biréfringence accidentelle, qui sépare une lumière polarisée (un seul plan d'onde) en deux composantes, avec un décalage de phase entre les deux ondes. Ce retard est proportionnel à la différence des contraintes principales. En utilisant deux filtres polariseurs orientés à 90 ° l'un par rapport à l'autre, on peut observer le spectre lumineux résultant, sachant que lorsque le retard optique est un multiple de la longueur d'onde correspondant à une couleur, cette dernière est filtrée. La longueur d'onde correspondant à cette lumière absorbée est alors fonction de la différence des contraintes principales $(\sigma_I - \sigma_{II})$:

$$|\sigma_I - \sigma_{II}| = \frac{N \cdot \lambda}{C \cdot e} \tag{5.1}$$

λ représente la longueur d'onde de la couleur filtrée, N l'ordre de frange ; C est la constante photoélastique du matériau, et e l'épaisseur de l'échantillon. La couleur visualisée est alors la couleur complémentaire de celle absorbée. Pour comparer la visualisation obtenue en photoélasticimétrie avec un champ de contraintes issu d'un modèle, la contrainte équivalente de Tresca est utilisée pour une comparaison qualitative dans une pièce supposée plane. Les directions de contraintes principales maximales et minimales sont alors contenues dans le plan.

Caractérisation des constituants

L'objectif de cette partie concerne la quantification des interactions de structures dans le ruban composite. Il est alors nécessaire d'apporter une attention particulière à la caractérisation des matériaux utilisés. Une erreur de simulation sur le comportement des matériaux pourra en effet être à tort attribuée à un effet d'interaction. Ici c'est une loi spécifique pour le comportement superélastique et développée par Peultier [Peultier, 2005], basée sur la thermodynamique de la transformation de phase, qui sert à modéliser le comportement du fil en NiTi. Au moment de la réalisation de cette étude, le modèle de comportement présenté au chapitre 3 n'était pas encore implémenté dans un code de calcul, ce qui a empêché son utilisation. En ce qui concerne l'élastomère, une loi visco-hyperélastique avec prise en compte de l'hystérésis est utilisée. La caractérisation d'un élastomère demande en toute rigueur un grand nombre d'essais : un essai uniaxial, un essai multiaxial, un essai de compressibilité volumique et des essais à différentes vitesses de déformations. Un essai de compressibilité volumique n'est pas nécessaire si l'on suppose que l'élastomère est incompressible. C'est une hypothèse souvent admise pour ce type de matériau. La diversité des essais en chargement (uniaxial, multiaxial, etc.) permet d'optimiser la détermination des coefficients de la loi hyperélastique. Dans notre cas, ces coefficients ont été déterminés à partir d'une courbe de traction (méthode des moindres carrés). La modélisation du caractère viscoélastique de l'élastomère est surtout intéressante dans cette étude pour prendre en compte l'hystérésis qui apparaît

lors d'un cycle charge-décharge. Une loi focalisée sur cet aspect a été développée par Bergstrom et Boyce [Bergstrom et Boyce, 1998]. Le potentiel thermodynamique servant à définir la loi hyperélastique utilisée est celui de Mooney-Rivlin, en raison de son bon compromis entre précision et complexité tant que les déformations n'excèdent pas 50%, ce qui est notre cas [G'Sell et Coupard, 1997]. Les essais à différentes vitesses de déformation ne sont donc pas nécessaires dans cette étude. La caractérisation du comportement de l'élastomère se fait alors à partir d'un essai de traction, stabilisé par trois chargements répétés progressifs respectivement jusqu'à 5, 10 et 20 % de déformation, suivis de 10 cycles à 10% de déformation maximale.

Le comportement de l'alliage à mémoire de forme est identifié par un essai de traction sur un fil droit, préalablement stabilisé par 20 cycles de déformation à 3%. Les températures de transformation sont déterminées en extrapolant la valeur des contraintes de début de transformation et de fin de transformation inverse pour trois températures. Le paramètre caractéristique de la dissymétrie traction-compression est tiré de la littérature [Peultier, 2005], car il ne varie pas beaucoup pour différents NiTi. Les comportements des deux constituants du composite sont illustrés figures 5.11 et 5.12.

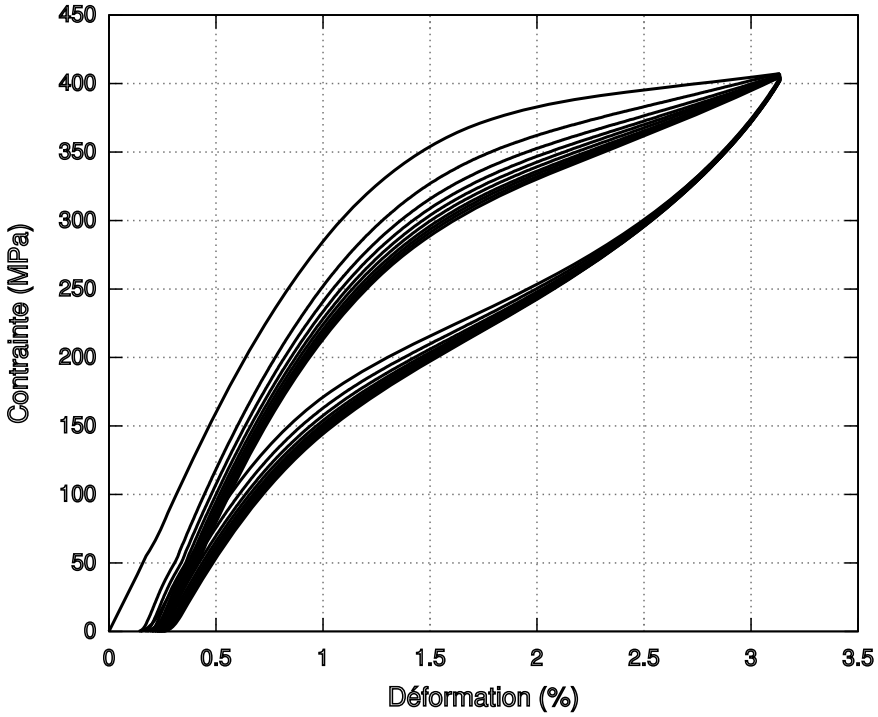

FIG. 5.11: *Stabilisation du fil en NiTi*

Les paramètres matériaux définis pour le fil en NiTi sont résumés dans le tableau 5.3. F_f^{crit}, A et H sont déterminés à partir du comportement en traction à température ambiante [Peultier, 2005]. Les paramètres a_i d'arrondis entre les différents comportements (élasticité, transformation...) sont ajustés pour représenter au mieux le comportement en traction. Les autres paramètres sont identiques à ceux du modèle présenté au chapitre 3.

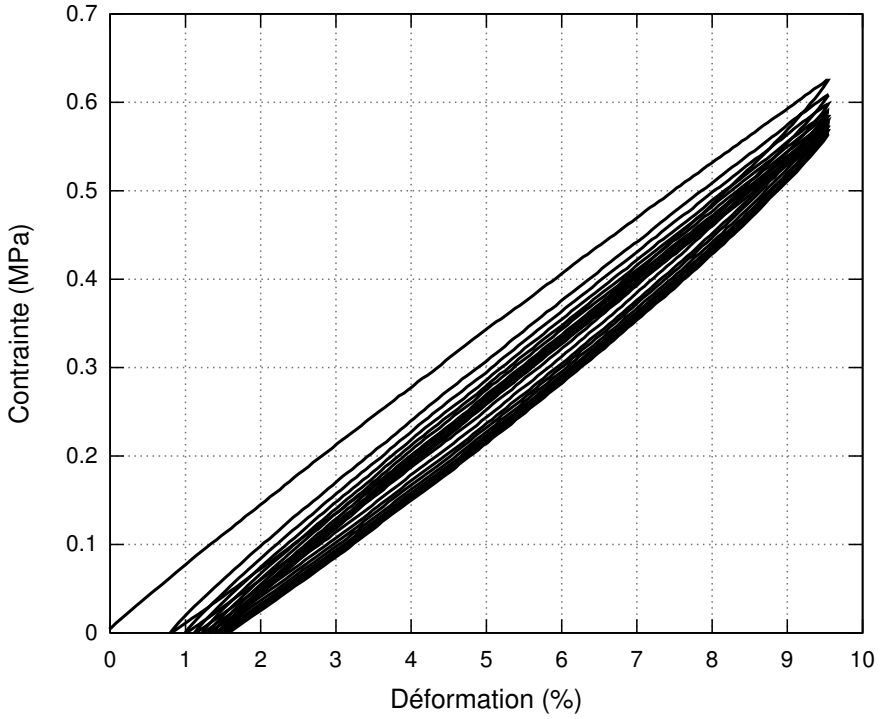

FIG. 5.12: *Stabilisation de l'élastomère*

En ce qui concerne l'élastomère, le calcul des coefficients hyperélastiques de Mooney-Rivlin se fait à partir d'une courbe de traction. Le logiciel `ABAQUS` les calcule directement en utilisant la méthode des moindres carrés. La loi de type Bergstrom Boyce permet de rendre compte de l'hystérésis, en utilisant les paramètres standard définis par les auteurs pour de s élastomères [Bergstrom et Boyce, 1998].

TAB. 5.3: *Paramètres matériaux du fil en NiTi*

$E(MPa)$	ν	T_0(°C)	F_f^{crit}	$A(MPa)$	$H(MPa)$
70000	0,3	-10	2,8	11	0,05
ε_{SAT}^T	$B(MPa/°C)$	α_1	α_2	α_3	α_4
0,05	5,6	0,3	0,3	0,3	0,3

En comparant le comportement des constituants (fil ondulé et ruban en élastomère) avec le comportement global du composite, on peut mettre en évidence les interactions de structure. S'il n'y en avait pas, en additionnant les rigidités des deux constituants, on devrait retrouver le comportement du composite. Or, on observe une différence significative (voir figure 5.13).

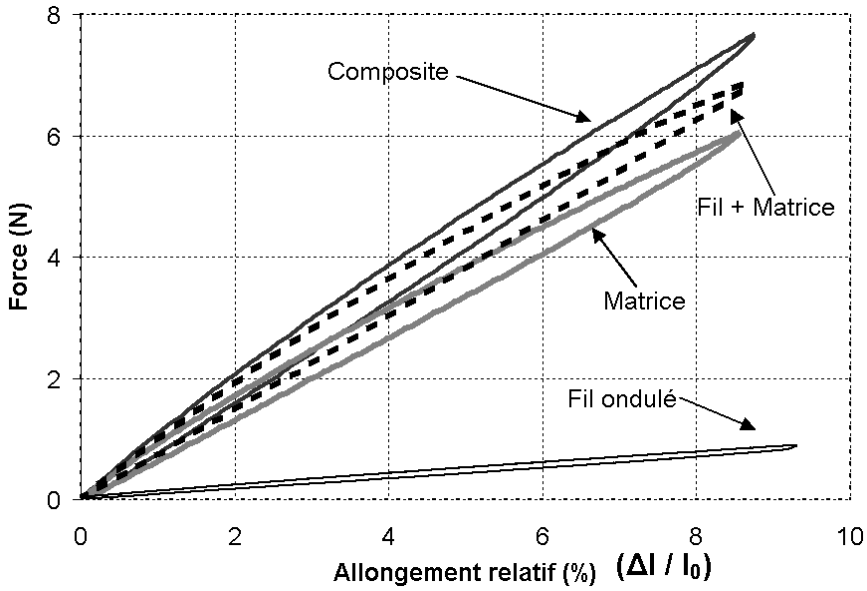

FIG. 5.13: *Comparaison entre le comportement des constituants et celui du ruban composite. La différence entre la somme des rigidités des constituants et le comportement du composite met en évidence les effets d'interactions.*

Validation du modèle

Le comportement du composite est simulé sur le logiciel `ABAQUS`. Afin de limiter les temps de calculs, plusieurs hypothèses permettront de simplifier la géométrie du composite, et donc d'optimiser le temps de calcul tout en conservant une précision permettant de dégager des informations sur les interactions de structure.

1. Le comportement du composite est supposé identique d'une boucle à l'autre. Le modèle ne prend pas en compte toute la longueur de l'échantillon composite (30 boucles), mais seulement 6 boucles. Cette valeur est un compromis entre la réduction du temps de calcul et la volonté de conserver une surface de visualistion suffisante pour une comparaison avec les clichés obtenus par photoélasticimétrie.
2. En modélisation par éléments finis, le maillage d'un fil courbé de section circulaire est difficilement réalisable. Le choix a été fait, pour limiter les temps de calcul, de modéliser la section du fil par une section rectangulaire équivalente, de même section et de même moment quadratique.

La modélisation du composite réalisée avec `ABAQUS` est comparée avec la réponse obtenue pour un essai de traction mené sur le ruban composite (voir figure 5.14). Lors de la charge, le comportement du modèle est très proche de l'expérience. Durant la première moitié de la décharge, le modèle surévalue la dissipation. D'autre part, la comparaison des répartitions de contraintes dans la matrice, simulée et expérimentale respectivement, permet de vérifier qualitativement si les effets d'interaction de structure sont bien décrits par le modèle complet. La figure 5.15 illustre la comparaison entre le champ des contraintes équivalentes de Tresca

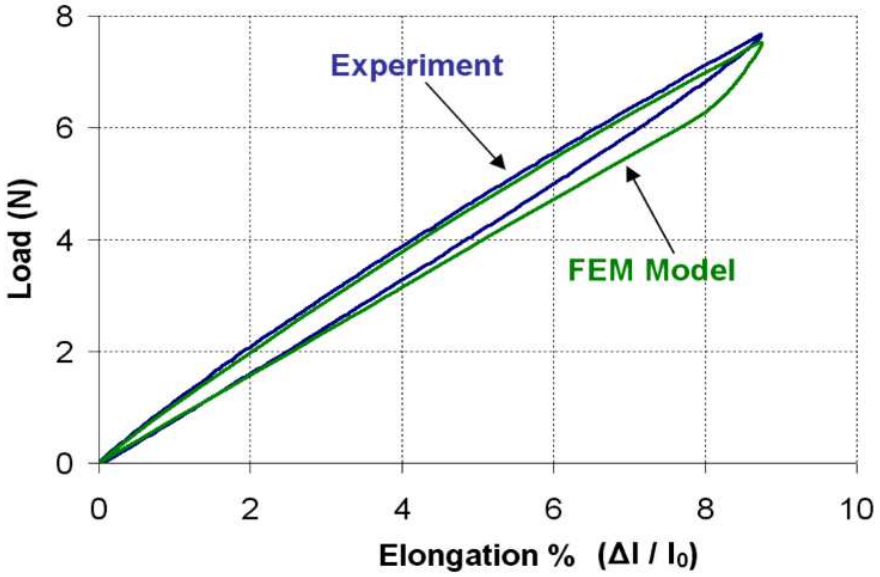

FIG. 5.14: *Comparaison entre la réponse simulée et le comportement du ruban composite*

calculé par le modèle éléments finis et le champ observé par photoélasticimétrie. Sur le cliché obtenu par photoélasticimétrie on observe la répartition des différences des contraintes principales planes. On note qu'au sommet de chaque boucle un point libre de contraintes apparaît. A l'intérieur des boucles la répartition des contraintes est fortement hétérogène. Aucune décohésion de l'interface fil/matrice n'est observée sur le cliché pour ce niveau de chargement, qui correspond à un allongement relatif ($\frac{\Delta l}{l_0}$) supérieur à 10 % . La répartition de la différence des contraintes principales calculée est très proche des observations expérimentales. Cette forme de champ de contrainte est due aux interactions des composants. Le bon accord observé permet de conclure favorablement sur la capacité d'un modèle de ce type à prendre en compte les interactions de structure.

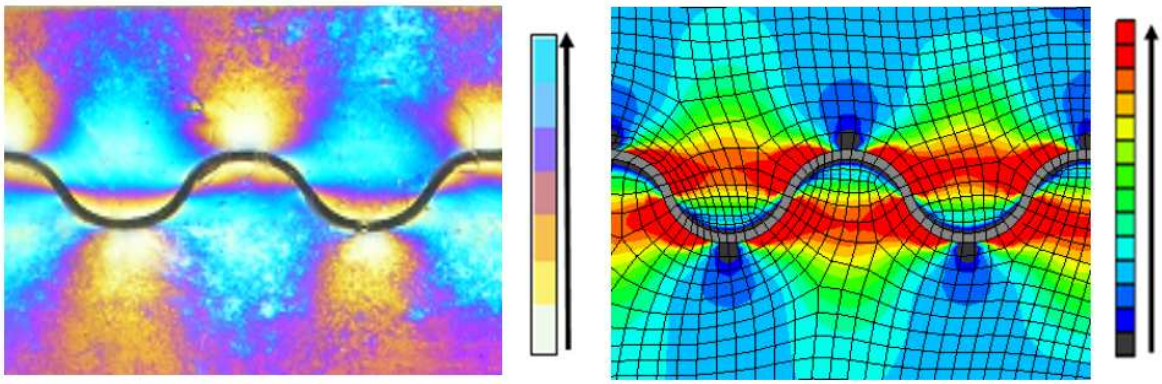

FIG. 5.15: *Comparaison entre un cliché obtenu par photoélasticimétrie (à gauche) et le champ de contrainte équivalente de Tresca (à droite). En noir :* 0 *MPa, en rouge :* 0,6 *MPa. La couleur noire au sommet des boucles indique des points libres de contraintes (dans l'élastomère)*

Cette étude permet de retenir plusieurs points importants :

1. Les interactions entre les composants induisent une rigidification non négligeable du ruban composite. La simulation du comportement de cette structure doit nécessairement prendre en compte ce phénomène. La modélisation par éléments s'avère alors une technique bien adaptée, pour peu que les comportements des constituants soient précisément décrits, à l'aide de lois de comportement *ad hoc*.
2. Le temps de calcul d'un modèle de ce type est assez conséquent (20h environ sur un PC de bureau), ce qui est principalement dû à l'utilisation de lois complexes. Tandis que le comportement du fil doit ici obligatoirement être simulé à l'aide d'une loi spécifique, le comportement de l'élastomère peut quant à lui être simulé à l'aide d'une loi plus simple que celle utilisée comme une loi élastique classique, en raison des faibles non-linéarités observées.

5.3.2 Simulation du comportement thermomécanique du composite

En utilisant les résultats obtenus lors de la validation de la prise en compte des interactions de structure, le modèle utilisé pour simuler le comportement thermomécanique du ruban composite comporte les caractéristiques suivantes :

1. Le modèle éléments finis est développé sur `ABAQUS`. Le modèle de comportement développé au chapitre 3 est utilisé pour simuler le comportement du fil en NiTi. Une routine prenant en compte tous les cas de chargements est nécessaire dans cette étude, car nous avons vu qu'à température ambiante le comportement du matériau n'est pas superélastique, ni complètement à l'état martensitique.
2. La géométrie du fil est là aussi simplifiée, remplacée par une section rectangulaire équivalente. Des éléments de hexaédraux peuvent alors être utilisés.
3. Le modèle est maillé de façon à ce que la zone proche du fil, à l'endroit ou l'hétérogénéité des contraintes est importante, soit maillée plus finement (voir figure 5.16).

Finalement, des essais pour deux températures ont été réalisés sur le composite, à 23°C et 80°C ; ils sont illustrés figure 5.17. On observe une bonne concordance entre les simulations et les essais de traction lors de l'essai à 80°C. A température ambiante, la simulation surestime le comportement du composite dans la plage de 3% à 7% d'allongement relatif. Il est probable que l'effet de la phase R explique cette différence, car comme cela a été vu figure 5.7, à 23°C le modèle surestime le comportement du fil pour des déformations inférieures à 1%, en raison de la présence du plateau de réorientation de la phase R.
La figure 5.18 montre une comparaison des champs de contraintes (a et b) et de fractions volumiques de martensite (c et d), pour des simulations à 23°C et 80°C respectivement, pour un allongement de 20%. La martensite est uniquement présente au niveau des sommets de boucles, dans les parties intérieures et extérieures du fil. La fraction volumique de martensite observée dans les zones en traction et en compression à cet endroit montre une forte dissymétrie de comportement : la partie en traction est beaucoup plus transformée. Un zoom sur un sommet de boucle est montré figure 5.19.

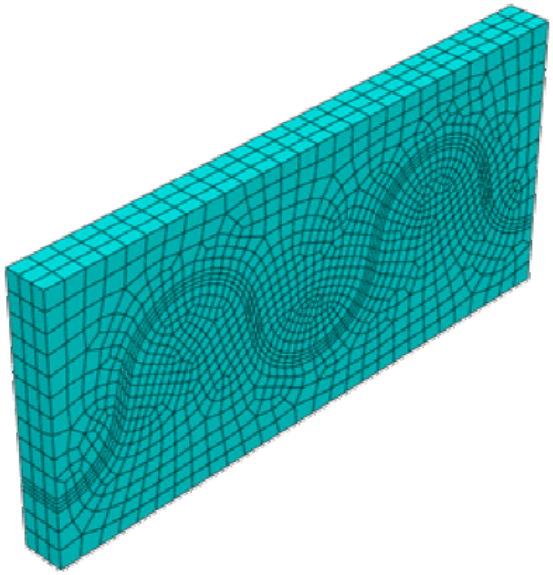

FIG. 5.16: *Modèle par éléments finis*

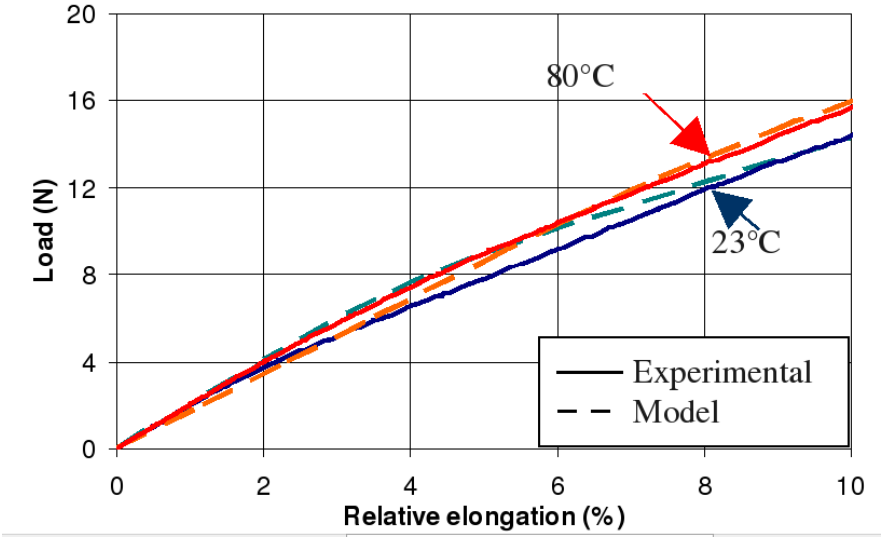

FIG. 5.17: *Comparaison modèle-expérience pour deux chargements en traction du ruban composite, à* 23 *et* 80°C

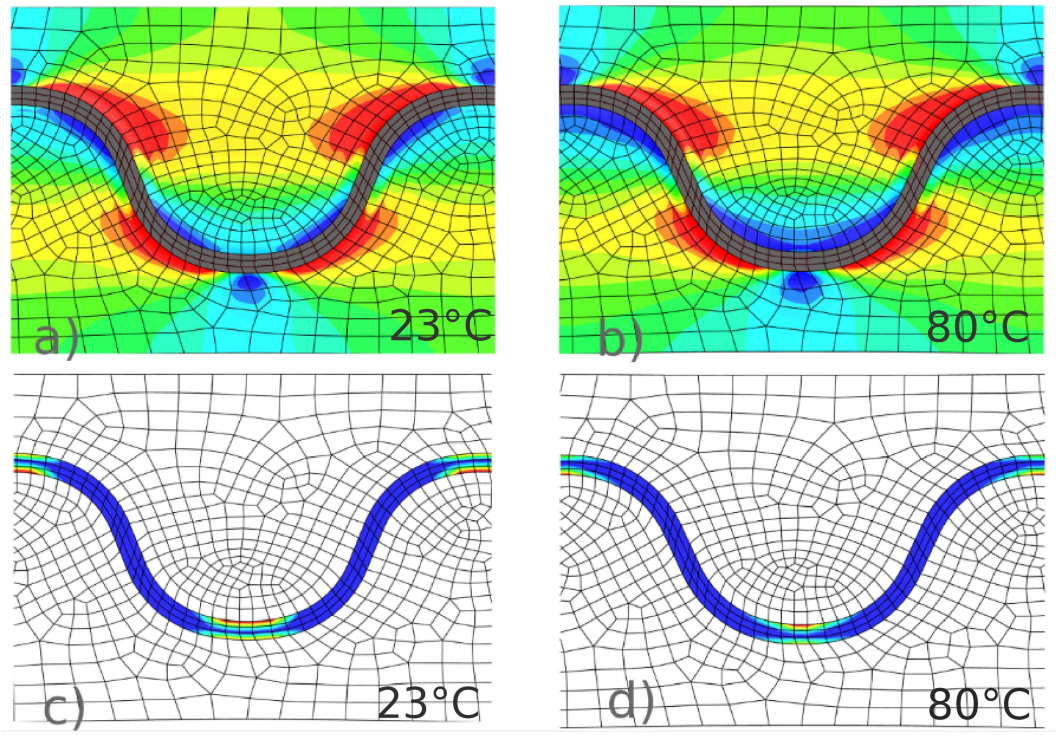

FIG. 5.18: *a) et b) Champs de contraintes dans l'élastomère. c) et d) Répartition de la fraction volumique dans le fil, suivant la température de la simulation.*

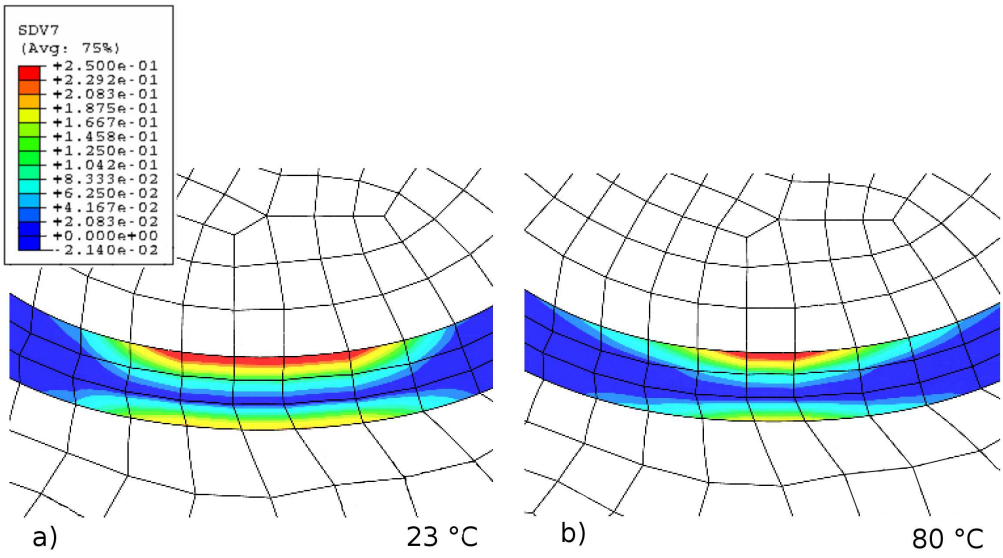

FIG. 5.19: *Zoom sur la répartition de la fraction volumique dans le fil au niveau du sommet d'une boucle.*

Plusieurs causes sont à l'origine de ce phénomène. La première est la dissymétrie traction-compression du matériau, qui induit une contrainte limite de transformation en compression plus importante qu'en traction. La courbure du fil et le type de chargement combiné de traction-torsion à cet endroit du fil induisent également des états de contrainte différents au sommet des boucles. Les zones transformées sont plus étendues à température ambiante, comparée à la simulation menée à 80°C. La rigidité de l'élastomère chute de façon significative (environ 30%, voir figure 5.8) entre 23°C et 80°C, tandis que celle du composite augmente d'environ 10%, pour une valeur d'allongement relatif de 0,1. On peut alors, en modifiant la géométrie du fil ondulé et la section du ruban, obtenir plusieurs profils d'évolutions de la rigidité en fonction de la température. En particulier, concevoir un ruban dont la rigidité est quasi-constante sur une large plage de températures peut être intéressant, dans les applications où un élastomère doit absolument être utilisé pour diverses raisons (déformations importantes, amortissement...), mais où l'on cherche à éviter une modification de la réponse de la structure. Le fil en AMF peut aussi servir à rigidifier la structure si la température augmente, et par exemple contrôler le déplacement d'un dispositif de régulation de la température.

5.4 Elaboration d'un ruban actionneur linéaire

Beaucoup de dispositifs intégrant des éléments en AMF utilisent le comportement d'effet mémoire double sens assisté. Plusieurs exemples de structures composites en AMF/élastomère tirent profit de la capacité de l'élastomère à agir comme ressort de rappel, ce qui permet de contrôler la forme de ce type de structures, comme par exemple pour des doigts de robots [Escher *et al.*, 1992, Mertmann *et al.*, 1994]. L'avantage de ce type de dispositifs est l'intégration de la fonction de rappel dans la forme même de la structure. Pour obtenir l'effet mémoire double sens assisté, il faut prédéformer le composant en AMF avant de l'enrober dans l'élastomère. Ainsi, lors du chauffage (reprise de forme de l'AMF) une énergie élastique est stockée dans l'enrobage, ce qui permettra le retour à la forme initiale à froid. L'inconvénient, lorsque l'on cherche à commander le dispositif par effet Joule, est la difficulté de refroidir l'ensemble, en raison de la faible conductivité thermique de la couche en élastomère. Pour améliorer la fréquence d'utilisation, une solution consiste à insérer un circuit de refroidissement par eau aux alentours de la partie en AMF. Cette solution n'est pas convenable dans le cas de structures embarquées, en raison de l'encombrement et du poids du système de refroidissement. Une alternative consiste à profiter de la transformation en phase R dans les NiTi, qui a l'avantage de se produire avec un faible hystérésis thermique. Ainsi, la puissance nécessaire au chauffage et le temps de refroidissement sont considérablement améliorés. L'inconvénient réside dans les petites déformations engendrées par cette transformation (environ 1%), comparée à la transformation martensitique. Par contre, dans le cas du ruban présenté ici, grâce à la géométrie du renfort une petite déformation dans les boucles du fil ondulé permet d'obtenir un allongement relatif global conséquent. La préparation d'un tel actionneur

est illustrée figure 5.20. Le fil est prédéformé d'une valeur de 15% avant l'enrobage dans le ruban en élastomère.

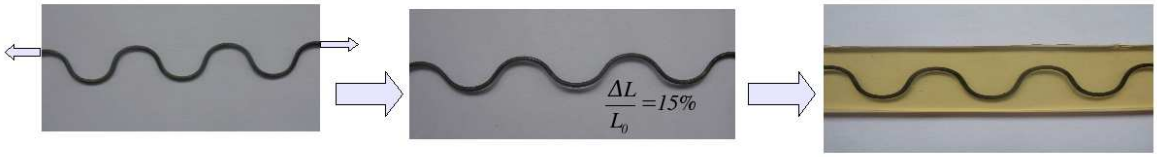

FIG. 5.20: *Etapes de fabrication du ruban composite, avec prédéformation du fil ondulé avant enrobage*

La figure 5.21 montre plusieurs cycles de chauffage-refroidissement. Le premier (figure de gauche) correspond à un cycle à contrainte nulle, sur une large plage de températures ($-40 \rightarrow 80$°C). Après un premier chauffage, les cycles suivants sont stables. Lors du refroidissement, on observe clairement la transformation austénite $\rightarrow$ phase R, aux alentours de 50°C, et la transformation martensitique qui est étalée sur une large plage de températures, de 40 à -40°C. Cet étalement s'explique par l'hétérogénéité des contraintes dans le fil lors du refroidissement. Les températures de transformation sont alors différentes en chaque point du fil. De plus, au fur et à mesure de la reprise de forme, les contraintes élastiques dans l'élastomère se relaxent, ce qui abaisse la contrainte effectivement appliquée au fil. Dans le cas de la phase R, la pente contrainte-température est beaucoup plus forte, il n'y a donc pas un grand décalage de transformation entre les zones fortement contraintes et les zones plus libres, ce qui explique le faible écart de température entre le début et la fin de la transformation. La figure 5.21 (droite) montre deux chauffage-refroidissement ne mettant en jeu que la phase R. On observe un allongement relatif du ruban conséquent (2%) lors d'un cyclage à contrainte nulle. L'application d'un faible effort (2N) permet de porter l'allongement réversible à 4%, pour une plage de températures de 40°C.

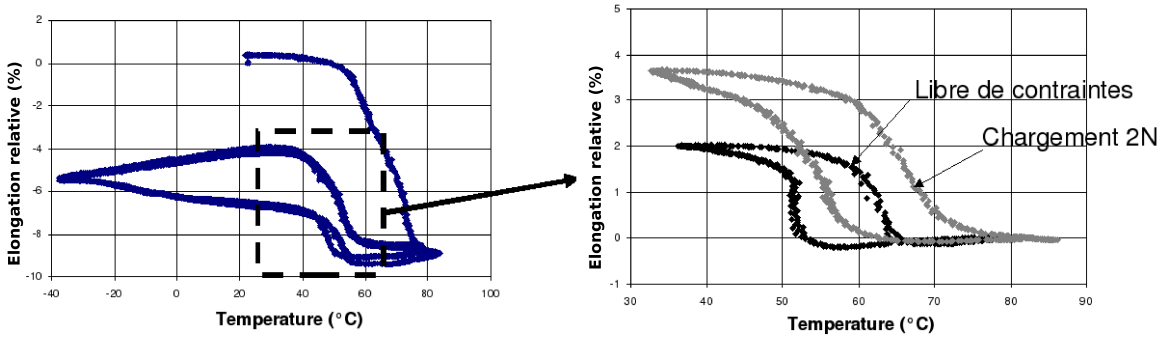

FIG. 5.21: *Allongement de l'actionneur linéaire en fonction de la température, lors de la transformation martensitique (à gauche) et uniquement par l'effet de la phase R (à droite). Dans ce dernier cas, une charge de 2N appliquée permet une augmentation significative de l'allongement réversible*

Conclusion

Le comportement d'un ruban composite AMF/élastomère a été étudié dans plusieurs configurations. Plusieurs points importants sont ressortis de cette étude. Afin de quantifier les effets d'interaction entre les deux composants, il est indispensable d'établir un modèle de type éléments finis. Une comparaison avec des clichés montrant le champ de contraintes par photoélasticimétrie et le bon accord entre le comportement effectif et celui simulé indiquent que ce type de modèle est précis pour peu que les comportements individuels de chaque matériau soient bien décrits. L'étude du comportement de ce type de composite sur une plage importante de température montre qu'il est possible de dimensionner des rubans de manière à ce qu'ils présentent une évolution de la rigidité répondant à un cahier des charges spécifique, parmi une large gamme de comportements possibles. En particulier, il est possible de neutraliser la chute de rigidité de l'élastomère aux hautes températures grâce à l'ajout d'un fil d'AMF. Une loi de comportement macroscopique des AMF prenant en compte les différents comportements de ces matériaux (réorientation, superélasticité), permet d'obtenir une bonne précision du comportement du composite à différentes températures. Enfin, il est possible de définir un ruban pouvant servir d'actionneur qui, tout en mettant en jeu la phase R pour réduire la plage d'hystérésis de température, permet malgré tout (du fait de la forme du fil) d'obtenir des déplacements importants.

6

Modélisation des effets de précipitation sur le comportement macroscopique des NiTi

Sommaire

6.1 Influence de la concentration en nickel sur les températures de transformation 167
6.1.1 Morphologie des précipités . . . 167
6.1.2 Baisse de la concentration en nickel . . . 168
6.1.3 Modélisation du phénomène . . . 172
6.2 Simulations numériques . . . 174
6.2.1 Comportement en traction . . . 175
6.2.2 Comportement en compression . . . 176
6.2.3 Influence du gradient de concentration . . . 179
Conclusion . . . 182

Les alliages à mémoire de forme de type Nickel-Titane sont les plus utilisés dans les applications industrielles. Leur comportement est très sensible aux traitements thermiques, comme cela a été vu dans le premier chapitre. Les températures de transformation peuvent en être affectées de quelques dizaines de degrés. Les dislocations induites lors de l'écrouissage à froid, et la formation de précipités Ni_4Ti_3 au cours des traitements de revenu, pour les NiTi riches en Ni, sont les principales causes de ces modifications de comportement. Il est ainsi possible, en combinant taux d'écrouissage et revenu, d'ajuster finement les températures de transformations, afin d'obtenir, pour une application donnée, des caractéristiques thermomécaniques *ad hoc*. Il est dans ce cas nécessaire de bien comprendre l'effet des traitements thermiques afin de pouvoir proposer un alliage capable de répondre à un cahier des charges donné. Plusieurs auteurs ont étudié ces effets et proposé des abaques permettant de sélectionner, pour une composition donnée, les traitements à appliquer afin d'obtenir le comportement voulu. Par contre, il n'existe actuellement pas de modèle permettant de simuler l'effet de ces traitements thermiques sur le comportement macroscopique des NiTi.
Ce type de modélisation est très délicate, car elle implique un grand nombre de phénomènes comme l'hétérogénéité de la répartition des précipités, la présence de contraintes internes induites par la croissance des précipités, la séquence privilégiée d'une transformation de type Austénite → phase R → martensite au voisinage d'un précipité. Il est donc nécessaire de limiter le cadre de l'étude. Cette limitation va permettre aussi, et c'est l'un des objectifs, d'isoler un phénomène et d'observer sa contribution propre à la modification globale des propriétés de l'alliage au cours d'un traitement thermomécanique. Nous nous intéressons dans ce chapitre aux phénomènes suivants :

1. La présence d'un précipité dans un élément de matière, de par son comportement propre, va influencer le comportement global.
2. Les interactions entre la matrice et le précipité, de par la morphologie de ce dernier, vont influencer le comportement global. Le modèle de type inclusion d'Eshelby permet de prendre en compte ce phénomène.
3. La croissance d'un précipité va influencer la composition de la matrice environnante, ce qui, dans le cas des NiTi en particulier, peut profondément modifier son comportement. Cette modification de la composition étant contrôlée par un mécanisme de diffusion, un gradient de composition va alors apparaître au voisinage du précipité. Il faut alors définir un modèle numérique permettant de prendre en compte ce phénomène.

Il est nécessaire de disposer de plusieurs outils afin d'établir ce modèle :
– une loi définissant le gradient de concentration de la matrice
– une loi permettant de relier ce gradient à une modification du comportement de la matrice
– une loi de comportement adaptée pour chaque constituant
– un modèle tenant compte de la morphologie des phases

6.1 Influence de la concentration en nickel sur les températures de transformation

Afin de comprendre l'influence de la baisse de la teneur en nickel due à l'apparition de précipités Ni_4Ti_3, il est nécessaire de caractériser la taille des précipités et la distance moyenne les séparant. La fraction volumique de cette nouvelle phase doit aussi être déterminée.

6.1.1 Morphologie des précipités

Différents auteurs ont observé la taille et la géométrie des précipités Ni_4Ti_3 [Otsuka et Wayman, 1998, Bataillard, 1996, Khalil-Allafi *et al.*, 2002a, Dlouhy *et al.*, 2008]. Il apparaît que la température de traitement influence de façon importante la croissance de ces derniers, ainsi que le temps de traitement. Les précipités se forment le long de plans (1 1 1) et sont de géométrie lenticulaire. La température de traitement thermique va influencer la taille mais aussi la forme du précipité, en modifiant le rapport e/d de l'épaisseur de la lentille sur son diamètre. Une micrographie (figure 6.1) montre la géométrie et la répartition de ces précipités, sur un alliage NiTi (50,7% Ni) traité à 500°C pendant 1h. Plus la température augmente, plus ce rapport décroît et plus le précipité prend une forme allongée [Bataillard, 1996]. Pour des traitements thermiques de durées comparables, la figure 6.2 montre l'évolution du diamètre moyen des précipités.

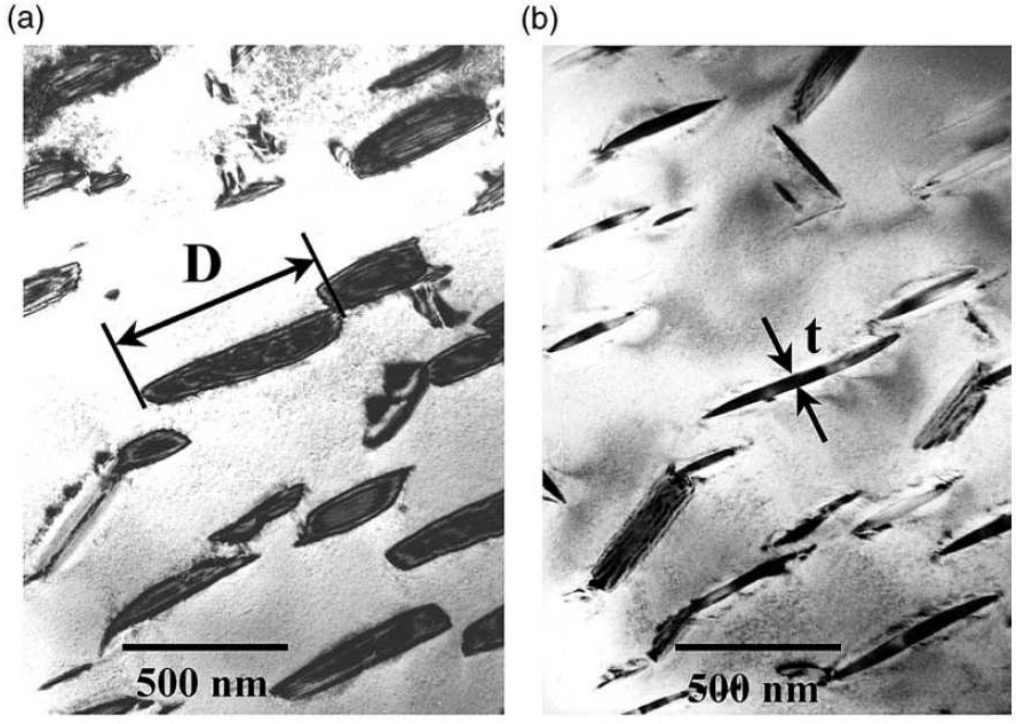

FIG. 6.1: *Cliché TEM d'un NiTi pour deux orientations, montrant la répartition, la géométrie lenticulaire et la taille de précipités* Ni_4Ti_3 *(NiTi* $50,7\%$ *at Ni, traité à* 500°C *pendant* $1h$*, d'après [Khalil-Allafi* et al.*, 2002a]*

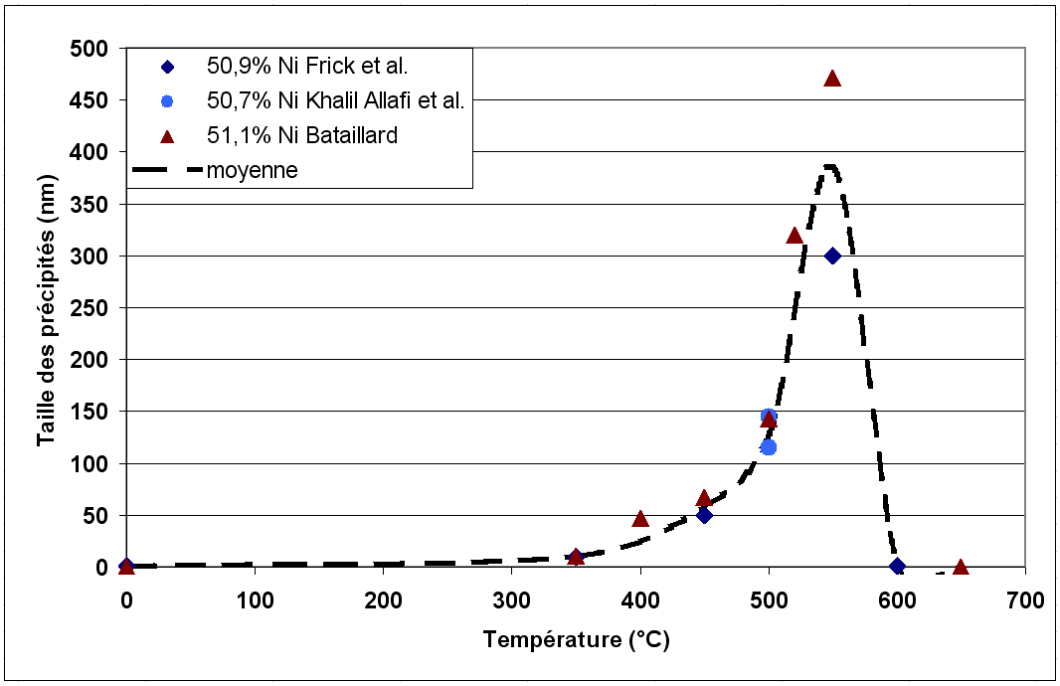

FIG. 6.2: *Evolution du diamètre des précipités en fonction de la température de traitement thermique (durée du traitement : Bataillard et Khallil Allafi : 1h, Frick 1h30) sources : [Frick* et al.*, 2005, Bataillard, 1996, Khalil-Allafi* et al.*, 2002a]*

6.1.2 Baisse de la concentration en nickel

Les précipités de type Ni_4Ti_3 sont composés de $57,1\%$ *at.* de nickel. Lors d'un traitement thermique l'apparition de ces précipités va, par un mécanisme de diffusion, appauvrir en nickel la zone proche du précipité. Le phénomène de précipitation s'arrête lorsque l'équilibre thermodynamique entre les deux phases est atteint, ce qui correspond, d'après Zhang [Zhang, 2000], à une concentration moyenne dans la matrice égale à $50,1\%$. Les précipités agissent alors comme des "puits de nickel", et la concentration dans la matrice est gouvernée par un mécanisme de diffusion. Une loi de concentration, fonction de la distance x par rapport à l'interface précipité/matrice et du temps de traitement t est proposée par Khallil-Allafi *et al.* [Khalil-Allafi *et al.*, 2002b] :

$$\frac{c[x,t]-c_E}{c_0-c_E}=\frac{4}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2n+1}sin\left[\frac{(2n+1)\pi x}{l}\right]exp\left[-\frac{(2n+1)^2\pi^2}{l^2}Dt\right] \tag{6.1}$$

Cette loi de diffusion est basée sur la deuxième loi de Fick, en considérant que la distance moyenne entre deux précipités l n'évolue pas. La signification des paramètres ci-dessus est résumée dans le tableau 6.1. Des mesures de concentration aux alentours de précipités menées par Schryvers *et al.* [Schryvers *et al.*, 2006] montrent un gradient de concentration aux alentours du précipité (voir figure 6.3). On observe une forte hétérogénéité des concentrations, mais globalement, la concentration au voisinage des précipités diminue, ce qui confirme le modèle proposé par Khallil-Allafi *et al.*

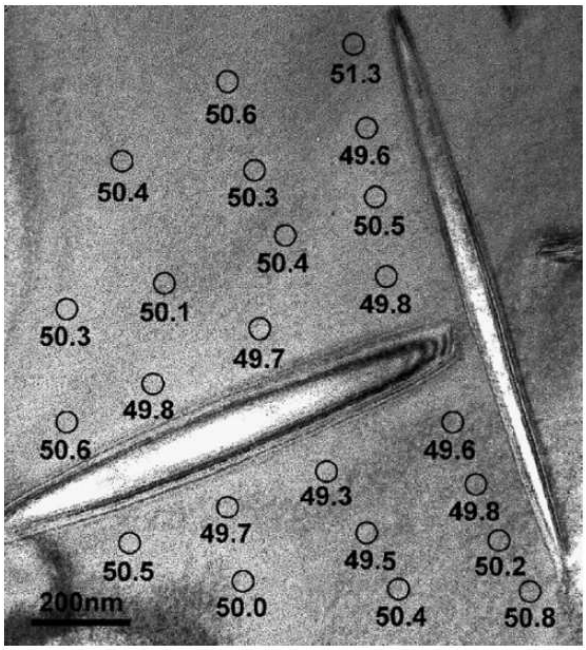

FIG. 6.3: *Mesure locale de la concentration de Nickel dans un NiTi (51% Ni at.) aux alentours de précipités Ni_4Ti_3, d'après [Schryvers* et al.*, 2006]*

TAB. 6.1: *Paramètres utilisés pour le calcul de la concentration en Ni entre deux précipités*

Paramètre	Signification	Unité
l	distance moyenne entre deux précipités	nm
c_0	Concentration initiale en nickel de l'alliage	$\%at.$
c_E	Concentration limite à l'interface	$\%at.$
D	Coefficient de diffusion du Ni dans la solution NiTi	m^2/s

Le coefficient de diffusion D est difficile à obtenir expérimentalement. Bastin et Rieck [Bastin et Rieck, 1974] ont estimé sa valeur, qui a été extrapolée par Khalli-Allafi *et al.* [Khalil-Allafi *et al.*, 2002b] afin d'obtenir la valeur de ce coefficient pour leur température de traitement (450°C). Dans une autre étude menée par ces mêmes auteurs [Khalil-Allafi *et al.*, 2002a], la fraction volumique des précipités a été mesurée expérimentalement au MET (Microscope Electronique à Transmission). On peut alors déterminer la concentration en nickel de la matrice, qui doit respecter la conservation de la masse :

$$\overline{C}_{Ni} = \frac{c_0 - f_P c_{Ni_4Ti_3}}{1 - f_P} \tag{6.2}$$

On considère ensuite que la loi de diffusion (6.1) donne une valeur d'isoconcentration tout autour du précipité lenticulaire. On obtient alors la concentration d'une couche de matière. En intégrant la concentration sur toute la matière environnant le précipité (jusqu'à la demi-

distance séparant deux précipités), on doit obtenir la valeur moyenne de la concentration en nickel, à comparer avec celle obtenue par la conservation de la concentration (6.2). Le coefficient de diffusion est alors déterminé par itérations successives, jusqu'à ce que la concentration moyenne obtenue à partir de la deuxième loi de Fick soit égale à la moyenne obtenue par conservation de la concentration de Nickel. Ce calcul approximatif suppose que la distance entre deux précipités est constante quelle que soit la direction, ce qui n'est évidemment pas le cas et dépend de l'organisation des précipités. Néanmoins, nous supposons que cette approximation induit des erreurs qui sont du même ordre de grandeur que la précision des mesures effectuées au MET. Cette méthode permet de s'affranchir de la connaissance du coefficient de diffusion, à condition de connaître la distance moyenne entre les précipités et leur fraction volumique.

Dans la suite de cette étude, nous allons utiliser les résultats obtenus par Khalil-Allafi *et al.* [Khalil-Allafi *et al.*, 2002a] sur un NiTi (50,7% at. Ni) revenu à 500 °C pendant une heure. Pour deux durées de traitement, 1h (traitement 1) et 10h (traitement 2) à la même température, qui induisent une répartition et une taille de précipités très différentes (voir tableau 6.2), nous pouvons alors déterminer la concentration de nickel au voisinage d'un précipité.

TAB. 6.2: *Caractéristiques de la population de précipités Ni_4Ti_3 [Khalil-Allafi* et al.*, 2002b]*

Durée de recuit à 500°C (h)	diamètre $D(nm)$	épaisseur $e(nm)$
1	115 ± 30	7.7 ± 3.0
10	335 ± 120	32 ± 7
Distance interparticules $l(nm)$	fraction volumique de précipités $f_P(\%)$	
145 ± 20	1.7 ± 1.0	
300 ± 20	6.7 ± 3.5	

Ces données nous permettent de connaître les paramètres l et t nécessaires pour le calcul de la concentration par (6.1). La fraction volumique des précipités est utilisée pour calibrer le coefficient de diffusion par la méthode décrite plus haut.

Afin de simuler le comportement d'une matrice AMF contenant des précipités et un gradient de concentration en nickel, il est nécessaire de relier ce gradient de concentration à des paramètres matériau, qui seront utilisés lors des simulations numériques. Il existe dans la littérature un nombre important de valeurs expérimentales qui relient la température de début de transformation M_s à la concentration en nickel pour les NiTi. Une synthèse de ces points expérimentaux a été présentée par Tang *et al.* [Tang *et al.*, 1999] (voir figure 6.4). En-dessous de 50% at., il n'y a pas d'effet de la concentration sur la température M_s, ce palier se situe environ à $350K$. Au-delà de 50%, la valeur de M_s chute brutalement pour atteindre une limite "théorique" de transformation à $0K$ pour une concentration de 51.5%. La variation de la température de fin de transformation inverse est présentée également, et montre que, globalement, l'écart entre ces deux températures M_s et A_f reste constant. Pour obtenir ces

points, il faut bien évidemment s'affranchir des effets de précipitation, ce qui est possible en réalisant une trempe à partir de la solution solide portée à 1000°C. Le plateau des températures observé pour les solutions riches en titane s'explique en observant le diagramme de phase. La limite verticale de la solution solide NiTi équiatomique montre que même à haute température, les solutions riches en titane vont être composées de précipités Ti_2Ni et d'une matrice équiatomique. Par contre, les solutions riches en Ni [1] sont solubles à haute température. Lors d'un refroidissement rapide il est possible de conserver la solution sans provoquer la précipitation. Une explication sur la dépendance des températures de transformation par rapport à la concentration de nickel est donnée par Ren et Otsuka [Otsuka et Ren, 2005].
Nous proposons, à partir de ces résultats, une loi d'évolution empirique des températures de transformation en fonction de la concentration en nickel. En considérant T_0 la température du palier et $c_T = 0$ la concentration critique en Ni (% at.), correspondant à un M_s à $0K$, la température M_s peut être déterminée par :

$$M_s = T_0 \left(1 - \left(\frac{c - c_T}{c_{T=0} - c_T}\right)^{\gamma}\right) \tag{6.3}$$

Le paramètre γ est calibré à partir des points expérimentaux, en utilisant la méthode des moindres carrés. On obtient une valeur $\gamma = 5$. La loi d'évolution est confrontée aux résultats expérimentaux sur la figure 6.4.

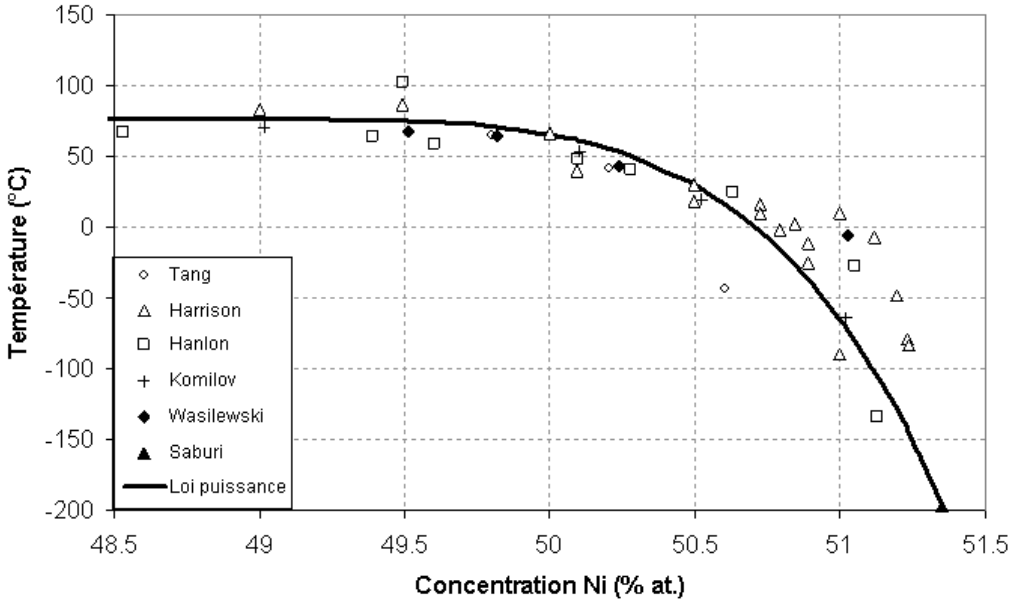

FIG. 6.4: *Variation de la température M_s en fonction de la concentration de nickel. Comparaison entre la loi puissance et les résultats expérimentaux (pour les références des points expérimentaux, voir [Tang* et al.*, 1999])*

Dans cette partie, nous avons montré qu'il est possible de définir l'évolution de la concentra-

[1] on appelle ici solution riche en nickel une solution contenant entre 50 et 51 % at. Ni

tion de Nickel autour d'un précipité de type Ni_4Ti_3, en effectuant quelques hypothèses sur la loi de diffusion du Ni dans la matrice de NiTi. Une façon cohérente de déterminer le coefficient de diffusion a été proposée, de même qu'une loi puissance permettant de déterminer la température de transformation M_s en fonction de la concentration en nickel.

6.1.3 Modélisation du phénomène

Dans l'optique de simuler l'influence de ces gradients de concentration sur le comportement mécanique des NiTi, on peut à partir de ces lois de diffusion et de détermination de M_s simuler une variation de cette température de transformation au voisinage d'un préicpité. Afin de déterminer l'impact de cette modification de la composition de l'alliage sur le comportement macroscopique, il est nécessaire de déterminer un modèle mécanique qui prenne en compte les lois de comportement, la forme du précipité ainsi que sa taille.
Dans le cas de matériaux composites contenant des inclusions réparties de façon périodique, le concept de cellule élémentaire a été développé [Sun et Vaidya, 1996, Chaboche *et al.*, 2005]. Ces cellules, contenant un précipité et simulées par éléments finis, ont été utilisées pour vérifier la pertinence de la prédiction des modules élastiques de matériaux composites par les modèles micromécaniques d'homogénéisation, et servent aussi de référence pour déterminer la capacité de prédiction de modèles d'homogénéisation pour une matrice élastoplastique, de comportement anisotrope [Chaboche *et al.*, 2005]. Nous allons utiliser ce type de modélisation pour notre problème, c'est-à-dire le cas où la matrice est un alliage à mémoire de forme et où le précipité est supposé élastique.
Pour la construction des cellules nous allons utiliser les données présentées tableau 6.2, qui correspondent aux traitements de 1h et 10h à 500°C d'un NiTi $50,7\%$ *at.* (voir [Khalil-Allafi *et al.*, 2002a]). Afin de représenter au mieux le comportement de l'alliage en simulant uniquement les interactions entre la matrice et un précipité, il est nécessaire de donner quelques critères pour la définition de la cellule élémentaire. Le premier critère est l'équivalence de la fraction volumique de Ni_4Ti_3 entre la cellule et un volume contenant suffisamment de précipités pour être représentatif du matériau. Il est de plus nécessaire de définir un compromis entre le respect de la répartition de ces précipités et la loi de concentration proposée. Une interdistance moyenne est définie par Khalil Allafi *et al.* [Khalil-Allafi *et al.*, 2002b] en supposant une répartition uniforme. Une cellule cubique dont l'arête correspond à cette interdistance est alors bien adaptée pour tenir compte à la fois de la répartition et de la fraction volumique des précipités. En comparant les valeurs de fraction volumiques déterminées par Khalil Allafi *et al.*, on obtient des valeurs sensiblement équivalentes pour les deux traitements thermiques (avec moins de 4% d'erreur).
Le mécanisme de diffusion suppose la présence de surfaces d'isoconcentration dans la matrice définies à partir de la distance à l'interface entre les deux phases. On obtient alors des surfaces ellipsoïdales. Un bon compromis, qui permet de remplir l'espace sans apparition de vides, de respecter la fraction volumique et la répartition uniforme tout en tenant compte de la forme des surfaces d'isoconcentration, consiste à définir une cellule de géométrie parallélépipédique.

Ses dimensions sont définies par les conditions suivantes :

1. Le mécanisme de diffusion étant supposé identique quelle que soit la direction considérée, on suppose une distance h identique entre la surface du précipité et la surface du parallélépipède suivant les directions normales aux faces du parallélépipède (voir figure 6.5).
2. La géométrie du précipité doit respecter la fraction volumique de précipités.

On définit alors la distance h en fonction de la fraction volumique de précipités f_p :

$$f_p = \frac{\frac{4}{3}\pi d^2 t}{(d+2h)^2(t+2h)} \tag{6.4}$$

Pour le traitement 1, on obtient $h = 38nm$; pour le traitement 2, $h = 53,25nm$.

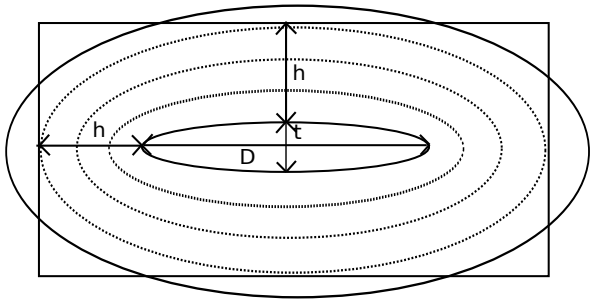

FIG. 6.5: *Taille du volume élémentaire considéré*

On peut, du fait des symétries géométriques, considérer uniquement 1/8 de cette cellule. Afin de tenir compte du gradient de températures de transformation (dû au gradient de concentration de Nickel), la matrice est divisée en plusieurs couches. Le nombre de couches doit être suffisamment important pour rendre compte de l'influence du gradient de concentration, mais un nombre de couches trop important va augmenter significativement le temps de calcul. Le compromis adopté ici est de définir quatre couches. L'évolution de la température de transformation M_s en fonction de la distance par rapport à l'interface précipité/matrice est présentée figure 6.6 pour le traitement d'une heure. Dans le cas du deuxième traitement, la concentration est quasi-uniforme et atteint l'équilibre thermodynamique presque partout. Il n'est donc pas nécessaire de discrétiser la matrice en plusieurs couches de concentrations différentes, nous utilisons la valeur de concentration moyenne partout dans la matrice.
Les températures de transformation utilisées pour chaque couche, les températures de transformation moyennes du traitement 1 et les températures correspondant au traitement 2 sont résumées dans le tableau 6.3.
Beaucoup de critiques peuvent être formulées quant à la pertinence de ce type de cellule et les extrapolations qui peuvent être faites pour déterminer le comportement macroscopique. Nous tenons à signaler ici que le choix de cette cellule, de même que celui d'utiliser une loi de comportement macroscopique pour simuler le comportement de la matrice NiTi, se justifie par le fait que nous cherchons à déterminer l'impact de deux phénomènes : la présence d'un précipité de forme lenticulaire et le gradient de propriétés mécaniques autour de ce

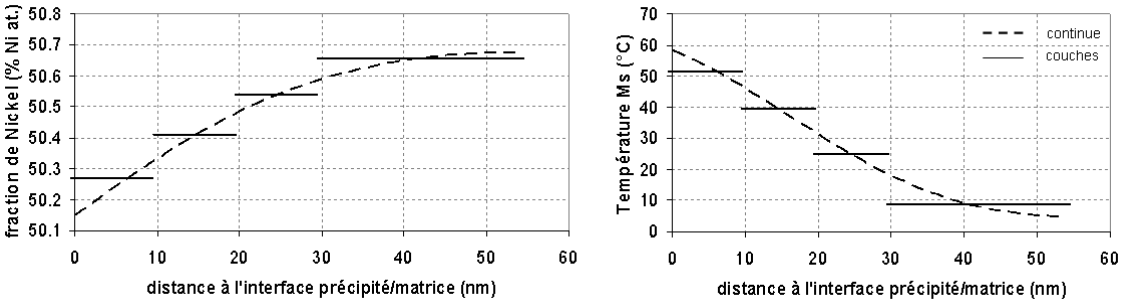

FIG. 6.6: *Variation de la concentration en nickel et de la température M_s en fonction de la distance à l'interface pour le traitement 1 - discrétisation en couches*

TAB. 6.3: *Températures de transformation*

	Traitement 1					Traitement 2
	Couche 1	Couche 2	Couche 3	Couche 4	Moyenne	Moyenne
M_s	51°C	39°C	25°C	9°C	19°C	55°C
A_f	81°C	69°C	55°C	39°C	49°C	85°C

précipité. Nous ne prétendons pas pouvoir obtenir directement le comportement réel d'un volume macroscopique à partir de cette cellule, mais uniquement des tendances relatives sur différentes configurations.

6.2 Simulations numériques

L'impact du phénomène de précipitation sur le comportement macroscopique des NiTi est simulé en établissant un modèle numérique de la cellule élémentaire à l'aide du logiciel `ABAQUS`. Les éléments sont des tétraèdres à 4 nœuds (C3D4). Les lois utilisées pour définir le comportement de la matrice et du précipité sont les suivantes :

1. Le comportement du précipité est supposé thermoélastique isotrope. Les précipités ne pouvant pas être isolés de la matrice NiTi, les méthodes expérimentales pour déterminer ces coefficients sont très délicates, les constantes élastiques ont été déterminées par une approche atomistique par Wagner et Windl [Wagner et Windl, 2009], qui ont obtenu comme coefficients élastiques : $E = 104GPa, \nu = 0.39$.
2. La matrice est modélisée à l'aide de la loi de comportement macroscopique développée au chapitre 3.

Les paramètres matériaux utilisés pour la matrice NiTi correspondent à des paramètres couramment utilisés pour des AMF NiTi (voir Tableau 6.4), mises à part les températures de transformation déterminées ici à partir de la concentration en nickel. Les pentes de transformation sont supposées identiques dans le sens direct et inverse, ainsi que les déformations de

la martensite formée autoaccommodée et celle formée orientée, afin de faciliter l'interprétation des résultats. L'effet de relaxation des contraintes internes induites lors de l'écrouissage à froid, qui peut lui aussi influencer les températures de transformation [Abujudom *et al.*, 1990], ne peut être pris en compte à moins de changer les paramètres matériaux d'un traitement à l'autre, ce qui n'est pas envisageable si l'on cherche à comparer qualitativement les résultats. On isole ici le phénomène dû à la modification locale de la composition.

TAB. 6.4: *Paramètres matériau de la matrice en NiTi*

$E(MPa)$	ν	$\alpha(℃)^{-1}$	$\varepsilon^T_{tracmax}$	$\varepsilon^{TFA}_{tractmax}$	$\varepsilon^T_{compmax}$
70000	0,3	0	0,05	0,05	0,04
$b_d(MPa/℃)$	$b_r(MPa/℃)$	M_S (℃)	A_f (℃)	r_f	
5	5	NC	NC	0,6	
$F_\varepsilon(MPa)$	$H_f(MPa)$	$H_{\varepsilon^T}(MPa)$	$H_{twin}(MPa)$	$H_s(MPa)$	
260	2	1500	30000	50	

Les résultats obtenus par les simulations sur une cellule élémentaire représentative sont comparés avec le comportement du NiTi n'ayant pas subi de traitement thermique en déterminant ses températures de transformation à partir de sa concentration initiale (50,7 % at Ni). Nous allons effectuer des simulations pour deux trajets de chargement isothermes, en traction et en compression afin de comparer de façon qualitative nos résultats à des essais expérimentaux en compression menés par Frick *et al.* [Frick *et al.*, 2005]. Les températures des simulations seront $20, 40, 60$ et 80℃, afin d'obtenir une variété importante de comportements. Les résultats de ces simulations sont présentés figures 6.7 et 6.9. La direction de chargement correspond à la direction du grand axe d'un précipité.

6.2.1 Comportement en traction

On peut remarquer que, globalement, plus le traitement thermique est long, plus les contraintes critiques de transformation diminuent. Ceci s'explique par la hausse des températures de transformation de la matrice, en raison de la baisse de la teneur en nickel. A 20℃, le matériau non traité est initialement austénitique, alors que le matériau recuit pendant $10h$ (traitement 2) est à l'état martensitique. L'effet structurel du précipité induit des pentes de pseudo-écrouissage de plus en plus fortes. Pour les températures de 40 et 60℃, le matériau non traité est superélastique, alors que la transformation inverse n'est pas observée à ces températures pour les traitements 1 et 2. On observe un pseudo-écrouissage faible au début de la transformation, suivi d'une augmentation significative en fin de transformation. Ces variations de pentes sont accentuées lorsque le matériau est testé à 80℃. La figure 6.8 montre l'évolution de la fraction volumique de martensite pour deux chargements, à 20 ℃ et 80℃, à une déformation moyenne de $2,5\%$. On observe une localisation de la transforma-

tion aux alentours du précipité. Lorsque la transformation est complètement saturée dans ces zones, la martensite a un comportement élastique, ce qui rigidifie le comportement de la cellule. Cet effet est aussi observé pour le traitement 2, bien qu'il n'y ait pas de gradient de concentration (donc de variation des températures de transformation) dans la matrice. Cette localisation est donc liée d'une part à la hausse des températures de transformation autour du précipité, d'autre part à l'effet structurel de ce dernier.

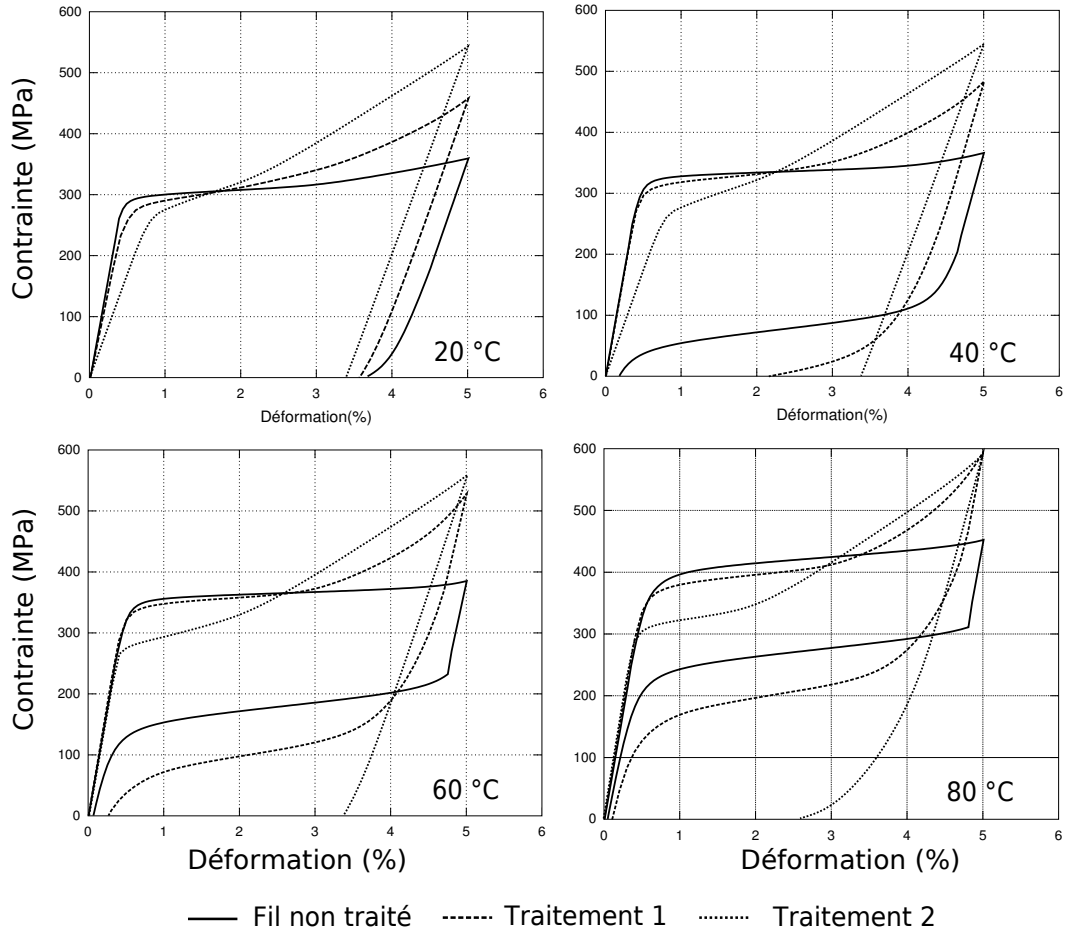

FIG. 6.7: *Comportement en traction des cellules élémentaires pour les deux traitements, à différentes températures - comparaison avec le fil non traité*

6.2.2 Comportement en compression

Les tendances générales dégagées lors de l'étude du comportement en traction sont globalement les mêmes pour le comportement en compression. Du fait de la dissymétrie traction-compression, pour une même déformation imposée (5%) la transformation de phase est complète pour toutes les situations. La contrainte observée à ce niveau de déformation est donc beaucoup plus importante que celle calculée lors d'un chargement en traction, la fin du chargement correspondant à l'élasticité de la martensite. On peut remarquer que dans le cas de la compression, les contraintes maximales obtenues correspondent au traitement 1. La fraction

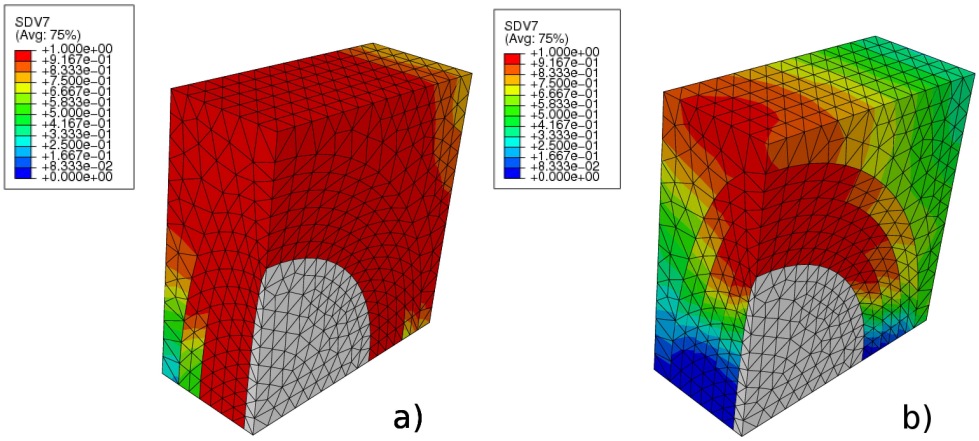

FIG. 6.8: *Cartographie de la fraction volumique de martensite pour le matériau traité pendant* $1h$ *à* 500°C *(traitement 1) - a) simulation à* 20°C *b) simulation à* 80°C - $\varepsilon = 2,5\%$

volumique de précipités étant plus importante dans le traitement 2, on aurait pu s'attendre à observer les contraintes maximales pour ce traitement. Deux phénomènes peuvent expliquer l'adoucissement du comportement :

1. La concentration en nickel étant moins importante dans la matrice du matériau ayant subi le traitement 2, les contraintes limites de transformation sont plus faibles, ce qui abaisse le niveau de contrainte global lors de la déformation maximale (5%).
2. La transformation a lieu pour le chargement à une contrainte inférieure à la contrainte d'orientation maximale. Dans ce cas, le comportement d'accomodation des macles présenté dans le chapitre 3 abaisse le module apparent de la martensite. Les contraintes maximales sont alors diminuées.

Frick *et al.* [Frick *et al.*, 2005] ont étudié l'influence de la température de traitement thermique sur le comportement d'un NiTi (50,9% Ni.) à température ambiante. Dans cette étude, des échantillons laminés à chaud ont été ensuite traités à différentes températures pendant 1h30. Des analyses au MET on permis de déterminer la taille des précipités en fonction de la température de traitement (voir figure 6.2). Par contre, aucune indication sur la fraction volumique de ces précipités n'est donnée. La répartition de précipités, en fonction de la température, est illustrée figure 6.10. Un fort contraste autour des précipités indique la présence de contraintes internes. On parle alors de précipités cohérents, leur croissance implique uniquement des déformations élastiques dans la matrice. Ce contraste est bien observé pour le revenu à 450°C ainsi que pour les températures plus basses, mais pas à 550°C. Les précipités observés à cette température sont dits incohérents, car une accommodation plastique de la matrice est nécessaire. Les contraintes internes liées à la croissance du précipité sont alors relaxées. A cette température, on observe peu de précipités mais ils sont de grosse taille, ce qui suppose une fraction volumique de précipités peu élevée.

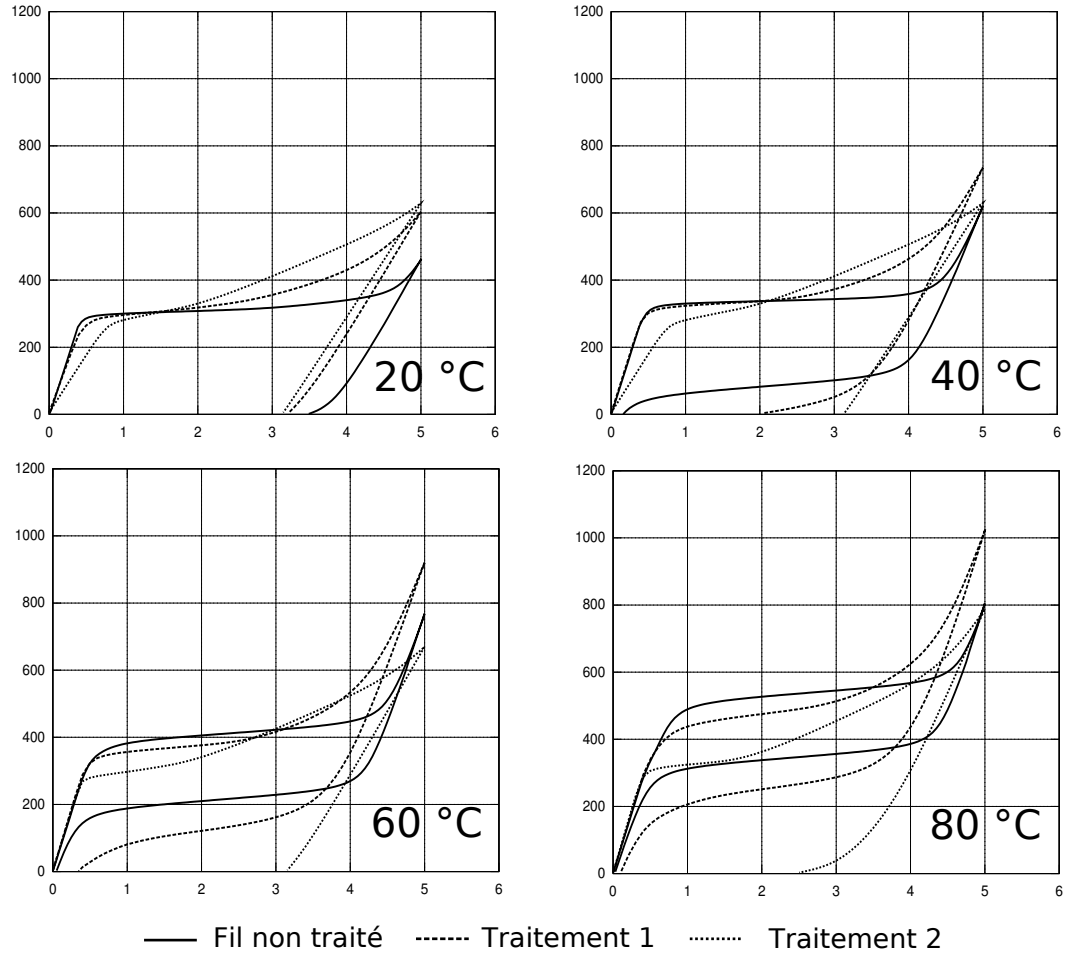

FIG. 6.9: *Comportement en compression des cellules élémentaires pour les deux traitements à différentes températures - comparaison avec le fil non traité*

Les essais de compression menés par ces mêmes auteurs montrent qu'à mesure que la température de traitement augmente, jusqu'à 450℃ la contrainte seuil de début de transformation diminue. Au-delà, les contraintes seuils remontent jusqu'à atteindre, pour la température de 600℃, celles de l'échantillon non traité. Dans le cas de la superélasticité, ces contraintes seuils sont directement liées à une variation de la température de transformation M_s. Cette température est influencée par la modification de la composition (précipitation), la présence de dislocations et les contraintes internes. Les échantillons n'ayant pas été écrouis à froid, la densité de dislocations est relativement faible, et peu de contraintes internes sont donc liées à cette apparition de défauts. Les traitements thermiques à haute température peuvent relaxer ces contraintes internes, cet effet a donc peu d'ampleur pour ces échantillons.
A partir de ces considérations, quelques conclusions sont données concernant les essais de Frick *et al.*, en comparaison avec les simulations effectuées en compression :

1. Lorsque la fraction volumique de précipités augmente, les contraintes seuils de transformation diminuent (dans le cas de la superélasticité), en raison d'une diminution de la concentration en Nickel de la matrice, responsable d'une augmentation des températures de transformation.
2. La présence de précipités de petite taille induit les contraintes les plus importantes pour des déformations élevées ; cet effet est certainement lié au champ de contraintes hétérogène proche du précipité, qui rend la progression de la transformation plus difficile.
3. La présence d'une population peu importante de précipités de grande taille a une faible influence sur le comportement global, en raison d'une faible diminution de la composition en nickel.

6.2.3 Influence du gradient de concentration

Afin d'évaluer l'effet du gradient de concentration sur le comportement de la cellule, une comparaison est effectuée pour le traitement 1 entre la simulation de traction isotherme par couches et une simulation considérant une concentration moyenne de la matrice, pour les températures de 20, 40, 60 et 80℃. La figure 6.12 montre les résultats de ces simulations. On peut remarquer les faibles différences entre les deux configurations, malgré la différence locale des températures de transformation. A 20℃, la différence de comportement est négligeable. A 40℃, on observe une différence faible sur le niveau de contrainte, mais importante au niveau de la déformation de transformation résiduelle. Cette température est proche des températures de transformation inverse. Cet effet souligne la difficulté de simuler le comportement d'un AMF lors de chargements proches des températures de transformation, car de petites différences de composition peuvent avoir des conséquences importantes sur la déformation résiduelle, liée à une transformation martensite → austénite incomplète. Pour des comportements superélastiques (à 60 et 80℃), une faible différence de contrainte est observée au niveau des plateaux de transformation directe et inverse, mais le comportement est globalement similaire.

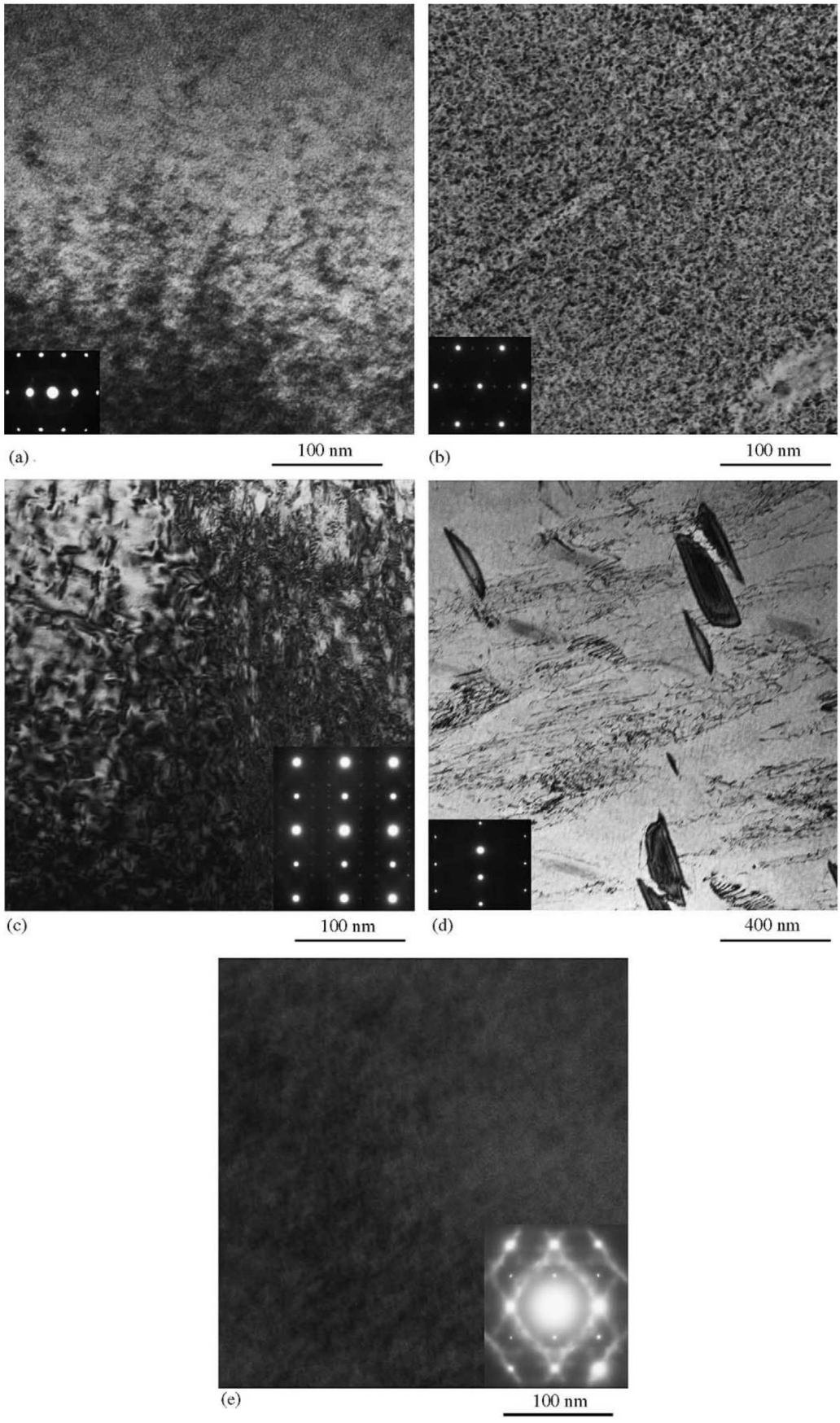

FIG. 6.10: *Micrographies d'un échantillon de NiTi a) non traité, ou revenu à différentes températures : b)* 350℃ *c)* 450℃ *d)* 550℃ *e)* 600℃*, durée du traitement* 1*h*30

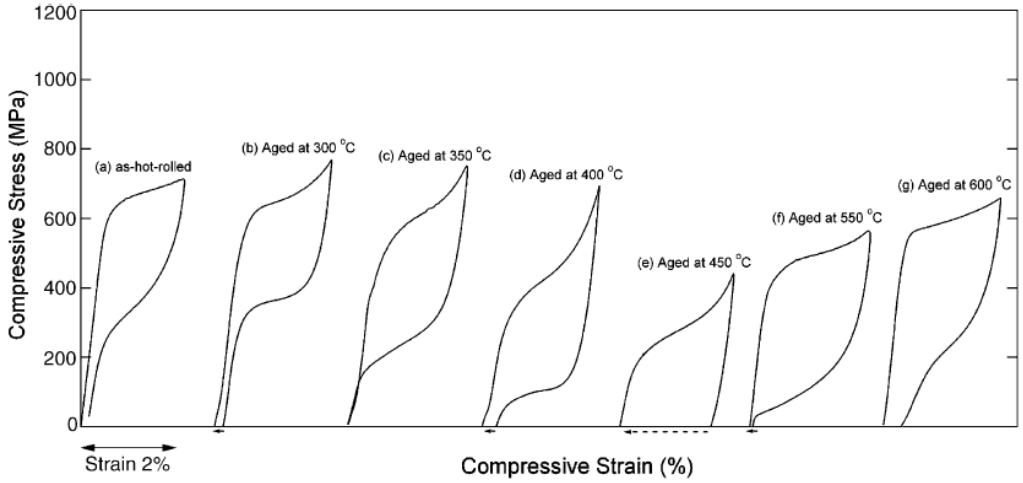

FIG. 6.11: *Essais de compression sur des échantillons de NiTi laminés à chaud et traités à différentes températures - temps de traitement :* 1*h*30

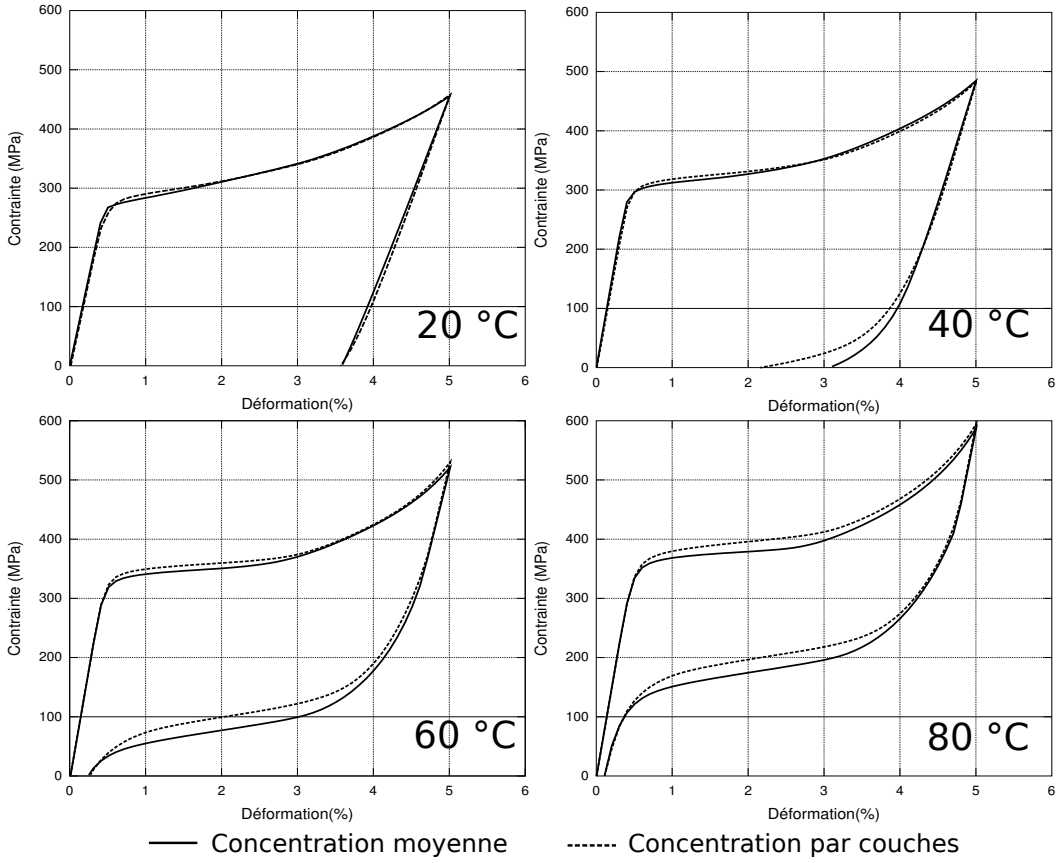

FIG. 6.12: *Comparaison la simulation de la cellule élémentaire avec prise en compte du gradient de concentration et de la concentration moyenne, pour le traitement 1*

Cette observation met en avant la possibilité d'utiliser des modèles de comportements basés sur des modèles à deux phases, en considérant un précipité et une matrice homogène, en utilisant uniquement la moyenne de la fraction volumique de Nickel dans la matrice. Par contre, la variété de comportements spécifiques présentés dans le premier chapitre lors de chargements proches de la température de transformation, et l'effet du gradient de concentration montré ici, prouvent que la simulation du comportement des NiTi au voisinage de ces températures reste une difficulté. En effet de multiples phénomènes, difficiles à quantifier, peuvent avoir une conséquence importante sur le comportement global, même s'ils sont de faible ampleur. De plus, en fonction de la concentration initiale en nickel et du type de traitement thermique (appliqué sans contrainte ou lorsque l'échantillon est soumis à une contrainte constante), on observe une forte hétérogénéité des sites de nucléation et de croissance des précipités. Lorsqu'aucune contrainte externe n'est appliquée, si la concentration en Ni est inférieure à 51% Ni at., les sites privilégiés sont situés au niveau des zones perturbées (joints de grains, gros précipités Ti_4Ni_2 formés lors de la mise en solution). Le cœur du grain ne contient presque pas de précipités. Si une contrainte externe est appliquée lors du traitement, alors la répartition des précipités Ni_4Ti_3 est plus homogène [Khalil-Allafi *et al.*, 2002b]. Lorsque la concentration en nickel est plus importante, même si l'échantillon est libre de contraintes lors du traitement, la répartition des précipités est homogène [Fan *et al.*, 2004]. La figure 6.13 illustre ces phénomènes, qui permettent d'expliquer les transformations martensitiques multiples fréquemment observés dans les NiTi. L'impact de cette hétérogénéité de répartition des précipités dans un grain sur le comportement macroscopique d'un NiTi n'a pas encore été clairement mis en évidence. Une approche possible est de considérer le VER comme un ensemble de grains, en utilisant le concept d'inclusion enrobée défini par Hervé et Zaoui, pour définir un comportement différencié entre le cœur du grain et le joint de grain. Le champ d'investigation de l'effet des hétérogénéités dans les NiTi est encore assez ouvert, et mérite l'attention des mécaniciens pour simuler et ainsi comprendre l'effet des différents mécanismes physiques opérant à l'échelle de la microstructure sur le comportement global de ce matériau.

Conclusion du chapitre

Ce chapitre avait pour objectif de montrer l'impact des phénomènes de précipitation sur le comportement d'une cellule élémentaire représentative, formée d'un précipité de Ni_4Ti_3 et d'une matrice en NiTi, définie en respectant les conditions de forme du précipité, de fraction volumique des deux phases et de la variation de concentration en nickel dans la matrice. Les résultats montrent une forte influence à la fois des interactions structurelles entre le précipité et la matrice, mais aussi de la baisse des températures de transformation associée à la teneur en nickel. En revanche, le gradient de concentration de nickel a une faible influence sur le comportement de cette cellule en comparaison avec une matrice homogène. Des tendances similaires sont observées dans la littérature et mettent en avant l'intérêt de ce type de modélisation, même si dans ce travail les résultats sont présentés d'une manière qualitative.

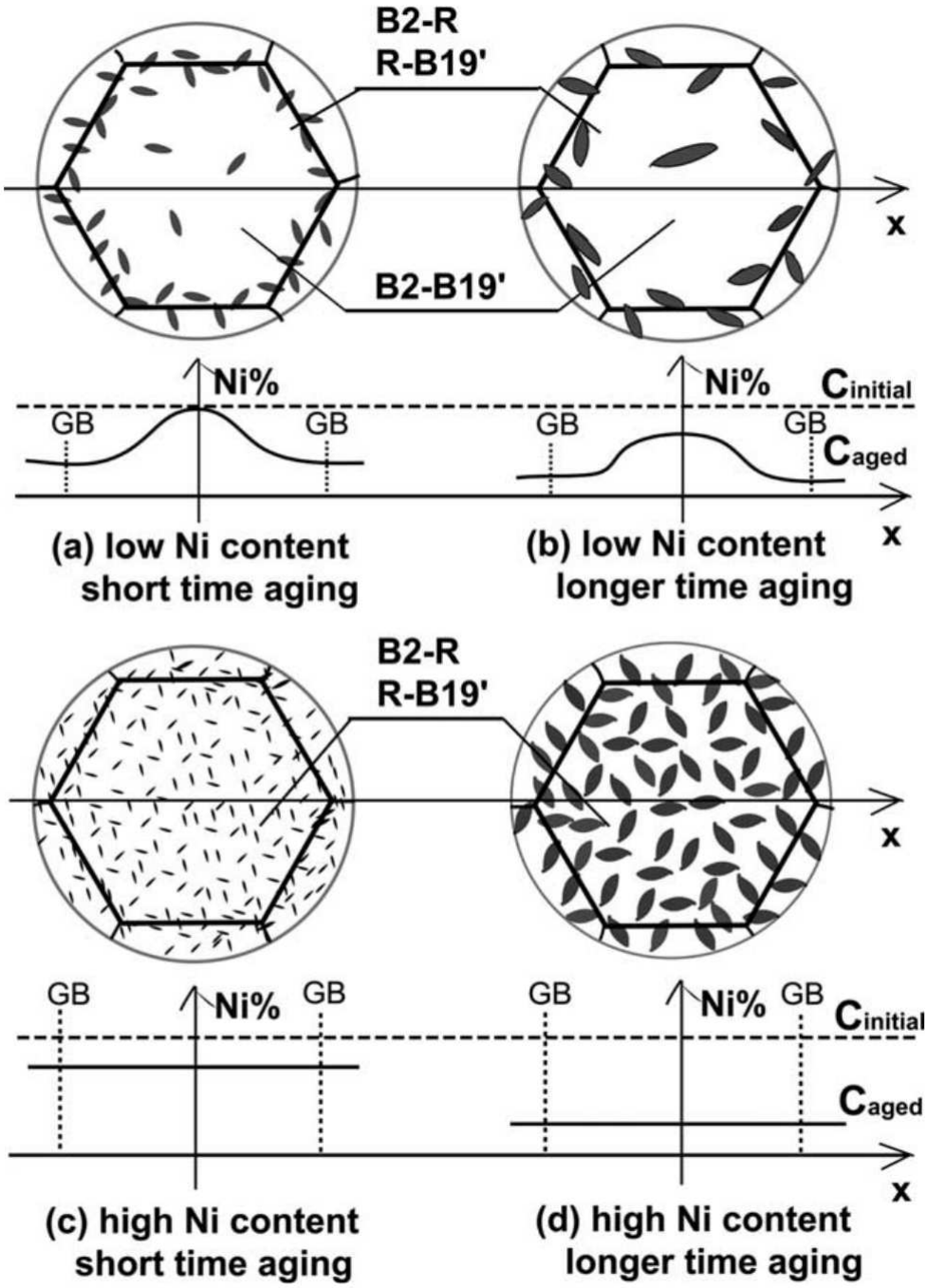

FIG. 6.13: *Schéma présentant les diverses configurations de la répartition de précipités lors d'un traitement thermique libre de contraintes externes, d'après [Fan* et al.*, 2004]*

Conclusion générale

Ce travail de recherche s'inscrit dans une démarche globale d'étude des matériaux à couplages multiphysiques. Il traite plus particulièrement de la modélisation de matériaux et structures à mémoire de forme, sujet motivé par le fort potentiel de développement de ces matériaux. Nous avons vu qu'un grand nombre de comportements sont liés à la transformation martensitique, comme la dissymétrie traction-compression ou l'effet des cycles partiels. Développer des modèles macroscopiques précis impose de tenir compte de ces aspects.
Une étude bibliographique des modèles de comportement des alliages à mémoire de forme a permis de déterminer sur quels aspects la modélisation de ces matériaux pouvait encore progresser. Le mécanisme d'accommodation des macles a été introduit dans le modèle initialement développé par Peultier [Peultier, 2005], et le couplage thermomécanique a été revu, afin de tenir compte de comportements supplémentaires observés comme la dépendance des températures de transformation par rapport à l'orientation des variantes de martensite. Le modèle est ainsi mieux adapté à la description du comportement des AMF.
Le modèle macroscopique présenté dans ce travail est original sur plusieurs aspects : nous avons montré l'utilité de la définition de variables internes tensorielles, notamment pour la tenir compte de l'orientation moyenne des variantes de martensite. Cette définition mène à un couplage thermomécanique dépendant du trajet de chargement. Nous avons également utilisé une expression d'une déformation maximale de transformation fonction des deuxième et du troisième invariants du tenseur des déformations moyennes de transformation. Combinée à l'expression des forces thermodynamiques de ce modèle, plusieurs caractéristiques de la dissymétrie traction-compression sont simulées. Il en résulte des différences de prédiction des contraintes critiques de transformation, mais aussi de la déformation maximale et des pentes de transformation. Enfin, la définition d'une fraction volumique de martensite formée autoaccommodée, associée au mécanisme d'accommodation des macles en plus du mécanisme de réorientation permet de représenter plus fidèlement le comportement de la martensite.
L'implémentation numérique du modèle a été revue, afin notamment de l'intégrer au module de calcul scientifique SIMULA+ supporté au laboratoire et au LAMAV de Valenciennes. La robustesse de la routine développée a de ce fait été améliorée, et l'interopérabilité de ce programme avec d'autres modèles compatibles `SIMULA+` [2], est devenu possible. Les simulations réalisés sur ABAQUS dans les cas de chargements non-proportionnels (traction-torsion) attestent de cette robustesse.

[2] SIMULA+, URL http ://www.univ-valenciennes.fr/lamav/Simula+/

La comparaison avec une base de données expérimentale réalisée par l'IP ASCR de Prague, qui comprend des essais uniaxiaux thermomécaniques et multiaxiaux non-proportionnels s'est montrée très concluante. Les trajets thermomécaniques propres à des applications de type actionneurs en AMF ont été très bien décrits. En revanche il est difficile de déterminer les paramètres matériaux lorque l'on observe une localisation de la transformation. Le modèle possède donc un bon aspect prédictif, la description thermodynamique de la transformation de phase n'est pas mise en défaut. Les différences observées lors de chargements multiaxiaux sont alors liées aux hypothèses formulées lors de la définition du modèle, qui ont restreint son cadre d'utilisation. Plusieurs pistes sont alors envisagées afin d'améliorer les capacités de prédiction du modèle :

– Les effets liés à la localisation ne peuvent être pris en compte qu'en analysant le gradient d'une variable de contrôle caractéristique au voisinage du point considéré. Le comportement de chaque point ne peut plus être considéré comme indépendant. Une solution consiste à utiliser des méthodes dites non-locales pour résoudre ce problème, en insérant par exemple une dépendance par rapport au gradient de la fraction volumique. Une extension du modèle présenté dans cette thèse, utilisant ce type de méthodes dans le cas unidimensionnel est en cours [3].

– La plupart des composants en AMF sont disponibles sous forme de fils fortement écrouis. La microstructure est alors généralement texturée. Afin de préciser la modélisation de ces structures, il pourrait être nécessaire d'introduire une formulation anisotrope de la déformation de transformation à saturation, d'une façon similaire à la définition d'un critère de Hill dans l'espace des contraintes principales. Des travaux récents réalisés dans ce domaine par Taillard *et al.* [Taillard *et al.*, 2008], montrent que l'utilisation de critères dérivés du critère de Hill permet de représenter le comportement anisotrope des AMF dans le cas superélastique. Ces résultats faciliteront l'extension au cas anisotrope de la définition proposée ici de la déformation à saturation.

– Une autre spécificité des alliages NiTi est l'apparition de la phase R. Les conditions d'apparition de cette phase sont complexes, particulièrement lors de l'application d'une contrainte. L'hétérogénéité de la répartition de cette phase, liée à la présence de sites d'apparition privilégiés (par exemple, autour des précipités de Ni_4Ti_3) rend difficile l'utilisation de modèles utilisant une approche à champ moyen. En collectant suffisamment de données expérimentales, et en utilisant judicieusement les outils de la thermodynamique des processus irréversibles et de la micromécanique, ces difficultés pourront être levées. La prise en compte de cette phase fait donc partie des perspectives à court terme de ce travail de thèse.

[3] Thèse en cours, Arnaud Duval - LEMTA, Nancy

Le modèle de comportement développé dans ce travail a été appliqué à l'étude de deux matériaux composites de façon à illustrer les aptitudes du modèle à traiter des problèmes de calculs de structures à différentes échelles.
L'étude d'une structure composite AMF/élastomère a mis en évidence les capacités de prédiction du modèle dans le cas où un AMF est couplé avec un matériau de structure. La méthode des éléments finis s'avère un moyen efficace pour prendre en compte les interactions de structures lorsque la forme des renforts est complexe, comme c'est la cas dans le composite étudié. Ce type de modélisation s'avère efficace pour simuler le comportement de matériaux composites présentant des comportements dépendants de la température. L'utilisation de l'évolution antagoniste des comportements thermomécaniques des deux constituants permet un réglage précis du comportement du composite en fonction de la température. Il est donc maintenant possible, en utilisant l'outil numérique développé dans ce travail de thèse d'optimiser ce type de matériaux composites en fonction des applications visées. La fabrication d'un actionneur linéaire composite a montré que l'utilisation de la phase R combinée à des géométries de type fil ondulé est intéressante car elle permet un déplacement relatif important (quelques %). Bien sûr, dans ce cas, la force développée par l'actionneur reste relativement faible, mais peut s'avérer suffisante dans le cas d'un positionneur, par exemple.

La simulation des effets liés à l'apparition de précipités Ni_4Ti_3, a été menée dans le but de montrer que le modèle, bien que macroscopique pouvait également permettre de mieux comprendre l'effet des traitements thermiques sur le comportement mécanique des Nickel-Titane. Les résultats de la simulation numérique montrent une forte influence de la concentration moyenne en nickel dans la matrice, et de l'effet structurel du précipité. Le gradient de concentration présent au voisinage du précipié a par contre une faible influence sur le comportement macroscopique global. Ce résultat est important du point de vue modélisation car l'utilisation de modèles biphasés, basés sur le problème de l'inclusion d'Eshelby, peut être envisagé afin de simuler correctement le comportement de ces alliages. Il est aussi possible de traiter le problème de la répartition hétérogène des précipités entre le cœur et les joints de grains par les outils de la micromécanique, en considérant le cœur du grain comme une inclusion enrobée avec des caractéristiques évolutives par couches. Couplé à un modèle de détermination de la concentration, basé sur une loi de diffusion comme celle présentée dans le dernier chapitre de ce travail, il sera alors possible de bâtir un premier modèle de comportement dépendant des conditions d'élaboration. Ce type de modèle devra bien sûr être enrichi, en particulier en prenant en compte l'effet de l'écrouissage et des contraintes internes liées à l'apparition d'un précipité cohérent. Une campagne expérimentale poussée devra être menée afin de déterminer tous les facteurs microstructuraux pouvant mener à la variété de comportements observés, et d'apporter à ce modèle toute la richesse physique dont il a besoin pour la prédiction correcte du comportement macroscopique en fonction de ces facteurs microstructuraux. Ce type d'investigation permettra également de mieux comprendre les conditions d'apparition de la phase R, et pourra servir à affiner la modélisation du comportement macroscopique

lorsque cette transformation de phase est observée.

Les perspectives d'évolution des modèles de comportement des AMF sont vastes, tant du point de vue de l'élargissement de leur cadre d'utilisation qu'au niveau de l'interaction avec d'autres modèles, ce qui permettra de considérer les conditions d'élaboration, la fatigue ou l'addition d'éléments. Par exemple l'utilisation du niobium pour stabiliser les températures de transformations est simulée en combinant ce modèle avec un schéma de transition d'échelle[4]. Comme nous l'avons vu dans ce travail de thèse, ce n'est qu'en faisant évoluer en parallèle les techniques expérimentales et les modèles physiques et micromécaniques, que les modèles phénoménologiques macroscopiques pourront s'enrichir.

[4]Thèse en cours, Boris Piotrowski - LEMTA, Nancy

A

Annexes

Sommaire

A.1 Dérivée des résidus, en fonction des mécanismes activés 190
A.2 Jacobien du système 198
A.3 Calcul de l'erreur ζ 199

A.1 Dérivée des résidus, en fonction des mécanismes activés

Pour chaque système d'équation, il faut déterminer la dérivée au premier ordre des résidus suivants :

$$\begin{cases} R_f\left(\Delta f, \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}, \Delta\dot{\lambda}_{\varepsilon^T}, \Delta\sigma_{ij}\right) \\ R_{\varepsilon^T}\left(\Delta f, \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}, \Delta\dot{\lambda}_{\varepsilon^T}, \Delta\sigma_{ij}\right) \\ R_{d\ ij}\left(\Delta f, \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}, \Delta\dot{\lambda}_{\varepsilon^T}, \Delta\sigma_{ij}\right) \\ R_{s\ ij}\left(\Delta f, \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}, \Delta\dot{\lambda}_{\varepsilon^T}, \Delta\sigma_{ij}\right) \end{cases} \tag{A.1}$$

Ainsi, pour chaque cas nous obtenons :

Si $Tr = 1$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f + (B_d - B)\dot{(}T - T_0) + H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d\ ij} = \Delta\varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T_{ij}}}{\left|F_{\varepsilon^T_{ij}}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.2}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial\Delta f} = \dfrac{\partial F_f}{\partial\Delta f} - \dfrac{\partial\kappa_f}{\partial\Delta f} - \dfrac{\partial\Gamma_f}{\partial\Delta f} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial\Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial\Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial\Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.3}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \sigma^D_{ij} - H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{ij} + H_s\dfrac{\partial|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \dfrac{3}{2}\left(-H_{\varepsilon^T}I_{ijkl} - \dfrac{\partial\lambda_{2ij}}{\bar{\varepsilon}^T_{kl}}\right)\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T\ kl}}{|F_{\varepsilon^T_{mn}}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{kl}} = I_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{kl}} = fI_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial\bar{\varepsilon}^T_{ij}}\bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.4}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{|F_{\varepsilon^T_{mn}}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.5}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = \dfrac{3}{2} \left(I_{ijkl} - \dfrac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ kl}}{|F_{\varepsilon^T_{mn}}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.6}$$

Si $Tr = -1$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = -F_{f_{M \to A}} + \kappa_f + (B_r - B)\dot{(}T - T_0) - \Gamma_f - H_s |\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d\ ij} = \Delta \varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T} \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{\left| F_{\varepsilon^T\ ij} \right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + f \bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.7}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta f} = -\dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta f} + \dfrac{\partial \kappa_f}{\partial \Delta f} + \dfrac{\partial \Gamma_f}{\partial \Delta f} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.8}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = -\sigma^D_{ij} + H_{\varepsilon^T} \bar{\varepsilon}^T_{ij} - H_s \dfrac{\partial |\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \dfrac{3}{2} \left(-H_{\varepsilon^T} I_{ijkl} - \dfrac{\partial \lambda 2 \ ij}{\bar{\varepsilon}^T_{kl}} \right) \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T \ kl}}{|F_{\varepsilon^T \ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d \ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = I_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s \ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = f I_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\varepsilon}^T_{ij}} \bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.9}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d \ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T \ ij}}{|F_{\varepsilon^T_{mn}}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s \ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.10}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = -\bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = \dfrac{3}{2} \left(I_{ijkl} - \dfrac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T \ kl}}{|F_{\varepsilon^T \ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d \ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s \ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.11}$$

Si $Tr = 0$ **et** $O = 1$:

$$\begin{cases} R_f = \Delta f \\ R_{\varepsilon^T} = |F_{\varepsilon^T_{ij}}| - F^{crit}_{\varepsilon^T} \\ R_{d \ ij} = \Delta \varepsilon^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T} \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T \ ij}}{|F_{\varepsilon^T \ ij}|} \\ R_{s \ ij} = S_{ijkl} \Sigma_{kl} + f \bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.12}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta f} = 1 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.13}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \dfrac{3}{2}\left(-H_{\varepsilon^T} I_{ijkl} - \dfrac{\partial \lambda 2_{ij}}{\bar{\varepsilon}^T_{kl}} \right) \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ kl}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = I_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = f I_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\varepsilon}^T_{ij}} \bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.14}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.15}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = \dfrac{3}{2}\left(I_{ijkl} - \dfrac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \right) \dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ kl}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.16}$$

Si $Tr = 1$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = F_f - \kappa_f - \Gamma_f + (B_d - B)\dot{(}T - T_0) + H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta|E^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta E^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{2}{3}\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.17}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta f} = \dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta f} - \dfrac{\partial \kappa_f}{\partial \Delta f} - \dfrac{\partial \Gamma_f}{\partial \Delta f} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} = |\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.18}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \sigma^D_{ij} - H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{ij} + H_s\dfrac{\partial|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = f\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = fI_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = fI_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\varepsilon}^T_{ij}}\bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.19}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2}\dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.20}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta\sigma_{ij}} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta\sigma_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta\sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta\sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.21}$$

Si $Tr = -1$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = R_f = -F_f + \kappa_f - \Gamma_f + (B_r - B)\dot{(}T - T_0) + H_s|\bar{\varepsilon}^T_{eq} \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta|\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T}\dfrac{2}{3}\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.22}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta f} = -\dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta f} + \dfrac{\partial \kappa_f}{\partial \Delta f} + \dfrac{\partial \Gamma_f}{\partial \Delta f} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} = |\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.23}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} = -\sigma^D_{ij} + H_{\varepsilon^T}\bar{\varepsilon}^T_{ij} - H_s\dfrac{\partial|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\partial\Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}^T_{ij}} = f\dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}^T_{kl}} = fI_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta\bar{\varepsilon}^T_{kl}} = fI_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial\bar{\varepsilon}^T_{ij}}\bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.24}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.25}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = -\bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.26}$$

Si $Tr = 0$ **et** $O = 0$:

$$\begin{cases} R_f = R_f = \Delta f \\ R_{\varepsilon^T} = \Delta |\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ R_{d\ ij} = \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij} - \lambda_{\varepsilon^T} \dfrac{2}{3} \dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{\left|\bar{\varepsilon}^T_{ij}\right|} \\ R_{s\ ij} = S_{ijkl}\Sigma_{kl} + f\bar{\varepsilon}^T_{ij} + f^{FA}\bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} - E_{ij} \end{cases} \tag{A.27}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta f} = 1 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} = |\bar{\varepsilon}^T_{ij}| \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial f} \bar{\varepsilon}^{twin}_{ij} \end{cases} \tag{A.28}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = f \dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|} \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = f I_{ijkl} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = f I_{ijkl} + \dfrac{\partial f^{FA}}{\partial \bar{\varepsilon}^T_{ij}} \bar{\varepsilon}^{twin}_{kl} \end{cases} \tag{A.29}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = -\dfrac{3}{2} \dfrac{F_{\varepsilon^T\ ij}}{|F_{\varepsilon^T\ mn}|_\sigma} \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \dot{\lambda}_{\varepsilon^T}} = 0 \end{cases} \tag{A.30}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = 0 \\ \dfrac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \sigma_{kl}} = S_{ijkl} + f^{FA} H^{twin}_{ijkl} \end{cases} \tag{A.31}$$

Les dérivées non nulles de F_f, κ_f, $\Gamma - f$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta f} = -H_f - \dfrac{\partial \lambda 0}{f} - \dfrac{\partial \lambda 1}{f} \\ \dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \sigma^D_{ij} \\ \dfrac{\partial F_f}{\partial \Delta \sigma_{ij}} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \\ \dfrac{\partial \kappa_f}{\partial \Delta f} = \dfrac{-F^{mem}_f}{f^{obj} - f^{mem}} \qquad \dfrac{\partial \Gamma_f}{\partial \Delta f} = \dfrac{1}{f^{obj} - f^{mem}} * \left(F^{max}_f - F^{min}_f \right) \end{cases} \tag{A.32}$$

Les dérivées non nulles des fonctions de saturation s'écrivent :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \lambda_0}{\partial \Delta f} = \dfrac{\alpha_0}{f^2} \\ \dfrac{\partial \lambda_1}{\partial \Delta f} = \dfrac{\alpha_1}{(f-1)^2} \\ \dfrac{\partial \lambda_{2\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = \alpha_2 \left(\dfrac{I_{ijkl}(\varepsilon^T_{SAT} - \varepsilon^T_{eq}) - \bar{\varepsilon}^T_{ij} \left(\frac{\partial \varepsilon^T_{SAT}}{\bar{\varepsilon}^T_{kl}} - \frac{\partial \varepsilon^T_{eq}}{\bar{\varepsilon}^T_{kl}} \right)}{\left(\varepsilon^T_{SAT} - \varepsilon^T_{eq} \right)^2} \right) \\ \dfrac{\partial \lambda'_{2\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} = \bar{\varepsilon}^T_{ij} \dfrac{p_2}{e-1} \cdot \left(\dfrac{1}{c_2} \right) \left(\dfrac{\frac{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\varepsilon^T_{MAX}} - 1}{c_2} + 2 \right) \left(exp \left(\dfrac{\frac{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|}{\varepsilon^T_{MAX}} - 1}{c_2} \right) - \dfrac{1}{c_2} \right) \end{cases} \tag{A.33}$$

Avec les expressions des dérivées de la déformation à saturation et des dérivées équivalentes :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \varepsilon^T_{SAT}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \dfrac{K \cdot \beta \left(\bar{\varepsilon}^T_{ij} \bar{\varepsilon}^T_{ij} \cdot J'_2 + \frac{3}{2} \bar{\varepsilon}^T_{ij} \cdot J'_3 \right)}{n \cdot {J'_2}^{\frac{5}{2}}} \cdot \left(1 + \beta \dfrac{J'_3}{{J'_2}^{\frac{3}{2}}} \right)^{\frac{1}{n-1}} \cdot \left(1 - \dfrac{f^{FA}}{f} \eta_\varepsilon \right) \\ \dfrac{\partial \varepsilon^T_{eq}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{ij}} = \dfrac{2}{3} \dfrac{\bar{\varepsilon}^T_{ij}}{|\bar{\varepsilon}^T_{ij}|} \end{cases} \tag{A.34}$$

A.2 Jacobien du système

Afin de déterminer les variables internes à l'incrément $n+1$, nous devons résoudre le système suivant :

$$\mathcal{R}(\Delta X) + \mathcal{J} \delta \Delta X \approx 0 \tag{A.35}$$

avec le jacobien :

$$\mathcal{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_f}{\partial \Delta f} & \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \varepsilon^T} & \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} & \frac{\partial R_f}{\partial \Delta \Sigma_{kl}} \\ \frac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta f} & \frac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \varepsilon^T} & \frac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} & \frac{\partial R_{\varepsilon^T}}{\partial \Delta \Sigma_{kl}} \\ \frac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta f} & \frac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \varepsilon^T} & \frac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} & \frac{\partial R_{d\ ij}}{\partial \Delta \Sigma_{kl}} \\ \frac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta f} & \frac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \varepsilon^T} & \frac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \bar{\varepsilon}^T_{kl}} & \frac{\partial R_{s\ ij}}{\partial \Delta \Sigma_{kl}} \end{bmatrix} \tag{A.36}$$

Il est nécessaire de présenter ce jacobien sous forme matricielle. Pour celà, nous utilisons une notation de type Voigt, en représentant les tenseurs symétriques d'ordre deux sous la forme d'un vecteur à 6 composantes, et les tenseurs d'ordre 4 sous la forme d'une matrice $6 * 6$. Lorsque l'on insère l'aspect déviatorique dans la résolution, on insère alors une dépendance entre les paramètres $\Delta \bar{\varepsilon}^T_{ii}$. Chacune de ces variables peut alors s'écrire comme une combinaison linéaire des deux autres variables, ce qui rend le jacobien singulier. On supprime alors une inconnue (ici $\Delta \bar{\varepsilon}^T_{33}$) et on écrit les dérivées partielles des résidus par rapport à cette variable en fonction de $\Delta \bar{\varepsilon}^T_{11}$ et $\Delta \bar{\varepsilon}^T_{22}$.

A.3 Calcul de l'erreur ζ

Afin de sortir de la boucle d'intégration, il est nécessaire de calculer l'erreur correspondant à la k-ième itération de l'algorithme de Newton-Raphson. Cette erreur est caractéristique du déséquilibre du système :

$$\mathcal{R}\left(X + \Delta X^k, Y + \Delta Y\right) \neq 0 \tag{A.37}$$

Afin de s'affranchir de la taille d'incrément choisi, on détermine une erreur relative, fonction des contributions de chaque résidu. Etant donné que l'expression des résidus diffère selon les cas d'activations, il faut déterminer ζ pour chaque cas.

Si $T = 1$ **et** $O = 1$ **ou** $T = -1$ **et** $O = 1$:

$$\zeta = \frac{|R_f|}{\Gamma_f} + \frac{|R_{\varepsilon^T}|}{F_{\varepsilon^T}^{max}} + \frac{|R_{d\ ij}|}{|\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_s|}{|\Delta E_{ij}| + |\alpha\Delta T|} \tag{A.38}$$

Si $T = 0$ **et** $O = 1$:

$$\zeta = \frac{|R_f|}{f} + \frac{|R_{\varepsilon^T}|}{F_{\varepsilon^T}^{max}} + \frac{|R_{d\ ij}|}{|\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_s|}{|\Delta E_{ij}| + |\alpha\Delta T|} \tag{A.39}$$

Si $T = 1$ **et** $O = 0$:

$$\zeta = \frac{|R_f|}{\Gamma_f} + \frac{|R_{\varepsilon^T}|}{|E_{ij}^T|} + \frac{|R_{d\ ij}|}{|\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_s|}{|\Delta E_{ij}| + |\alpha\Delta T|} \tag{A.40}$$

Si $T = -1$ **et** $O = 0$:

$$\zeta = \frac{|R_f|}{\Gamma_f} + \frac{|R_{\varepsilon^T}|}{|\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_{d\ ij}|}{|\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_s|}{|\Delta E_{ij}| + |\alpha\Delta T|} \tag{A.41}$$

Si $T = 0$ **et** $O = 0$:

$$\zeta = \frac{|R_f|}{f} + \frac{|R_{\varepsilon^T}|}{|\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_{d\ ij}|}{|\Delta\bar{\varepsilon}_{ij}^T|} + \frac{|R_s|}{|\Delta E_{ij}| + |\alpha\Delta T|} \tag{A.42}$$

Une fois cette erreur déterminée, on fixe une limite ι, et la boucle de Newton-Raphson s'arrête lorsque l'on obtient $\zeta < \iota$. Une limite fixée à 10^{-3} permet d'obtenir une estimation au millième de la solution, ce qui est tout a fait acceptable. Il faut préciser que cette erreur ne se cumule pas au fur et à mesure des incréments effectués.

Bibliographie

[Abujudom *et al.*, 1990] Abujudom, N., Thoma, P. et Fariabi, S. (1990). The effect of Cold Work and heat treatment on the phase transformations of near equiatomic NiTi Shape Memory Alloy. *Materials Science Forum*, 56–58:565–570.

[Andra *et al.*, 2001] Andra, H., Hesebeck, O. et Juhasz, L. (2001). Simulation of thermomechanical behavior of shape memory alloys under multiaxial non-proportional stress. *Math. Mech*, 81:329–330.

[Ashby, 1970] Ashby, M. (1970). The deformation of plastically non-homogenous materials. *Phil. Mag.*, 21:3999–424.

[Balta *et al.*, 2001] Balta, J., Simpson, J., Michaud, V., Manson, J.-A. et Schrooten, J. (2001). *Smart Materials Bulletin*, pages 8–12.

[Bastin et Rieck, 1974] Bastin, G. et Rieck, G. (1974). Diffusion in the Titanium–Nickel System : 1. Occurrence and Growth of the Various Intermetallic Compounds. *Metall Trans.*, 5:1817.

[Bataillard, 1996] Bataillard, L. (1996). *Transformation martensitique multiple dans un alliage à mémoire de forme Ni-Ti*. Thèse de doctorat, EPF Lausanne.

[Bergstrom et Boyce, 1998] Bergstrom, J. et Boyce, M. (1998). Constitutive modeling of the large strain time-dependent behavior of elastomers. *J. Mech. Phys. Solids*, 46:931–954.

[Bo et Lagoudas, 1999a] Bo, Z. et Lagoudas, D. (1999a). Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part I : theoretical derivations. *Int. J. of Eng. Science*, 37(9):1175–1203.

[Bo et Lagoudas, 1999b] Bo, Z. et Lagoudas, D. (1999b). Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part IV : modeling of minor hysteresis loops. *Int. J. of Eng. Science*, 37(9):1175–1203.

[Bouvet *et al.*, 2004] Bouvet, C., Calloch, S. et Lexcellent, C. (2004). A phenomenological model for pseudoelasticity of shape memory alloys under multiaxial proportional and nonproportional loadings. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 23:37–61.

[Bowles et Mackenzie, 1954] Bowles, J. et Mackenzie, J. (1954). The crystallography of martensite transformations. *Acta Metall.*, 2:129–137.

[Boyd et Lagoudas, 1994] Boyd, J. et Lagoudas, D. (1994). Thermomechanical response of shape memory composites. *J. of Intelligent Material Systems and Structures*, 5:333–346.

[Boyd et Lagoudas, 1995] Boyd, J. et Lagoudas, D. (1995). A thermodynamic constitutive model for the shape memory materials. Part I : The monolithic shape memory alloys. *Int. J. of Plasticity*, 12:805–841.

[Brinson, 1993] Brinson, L. C. (1993). One dimensional constitutive behaviour of shape memory alloys : thermomechanical derivation with non-constant material functions. *J. of Intelligent Material Systems and Structures*, 4:229–242.

[Brinson et Bekker, 1998] Brinson, L. C. et Bekker, A. (1998). Phase diagram based description of the hysteresis behavior of shape memory alloys. *Acta Materialia*, 46(10):3649–3665.

[Calkins et Butler, 2004] Calkins, F. et Butler, G. (2004). Subsonic jet noise reduction variable geometry chevron. *In Proceedings of 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 190.

[Calloch *et al.*, 2006] Calloch, S., Taillard, K., Arbab Chirani, S., Lexcellent, C. et Patoor, E. (2006). Relation between the martensite volume fraction and the equivalent transformation strain in shape memory alloys. *Mat. Science & Eng. A*, 438–440:441–444.

[Chaboche et Cailletaud, 1996] Chaboche, J. et Cailletaud, G. (1996). Integration methods for complex plastic constitutive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 133:125–155.

[Chaboche *et al.*, 2005] Chaboche, J., Kanouté, P. et Roos, A. (2005). On the capabilities of mean-field approaches for the description of plasticity in metal matrix composites. *Int. J. of Plasticity*, 21(7):1409–1434.

[Chang *et al.*, 2006] Chang, B.-C., Shaw, J. et Iadicola, M. (2006). Thermodynamics of shape memory alloy wire : modeling, experiments and application. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 18:83–118.

[Chang et Read, 1951] Chang, L. et Read, T. (1951). *Trans. AIME*, 189:47.

[Churchill *et al.*, 2009] Churchill, C., Shaw, J. et Iadicola, M. (2009). Tips and tricks for characterizing shape memory alloy wire : Part II — Fundamental isothermal procedures. *Experimental Techniques*, 33:51–62.

[Dlouhy *et al.*, 2008] Dlouhy, A., Bojda, O., Somsen, C. et Eggeler, G. (2008). Conventional and in-situ transmission electron microscopy investigations into multistage martensitic transformations in Ni-rich NiTi shape memory alloys. *Mat. Science & Eng. A*, 481–482:409–413.

[Dolce et Cardone, 2001] Dolce, M. et Cardone, D. (2001). Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications 2. Austenite NiTi wires subjected to tension. *Int. J. of Mechanical Sciences*, 43:2657–2677.

[Escher *et al.*, 1992] Escher, K., Hornbogen, E. et Mertmann, M. (1992). The two-way effect in homogeneous alloys and composites for robotic applications. *Proceedings of ICOMAT, Monterey, USA*, page 1289.

[Fan *et al.*, 2004] Fan, G., Chen, W., Yang, S., Zhu, J., Ren, X. et Otsuka, K. (2004). Origin of abnormal multi-stage martensitic transformation behavior in aged Ni-rich Ti–Ni shape memory alloys. *Acta Materalia*, 52:4351–4362.

[Favier *et al.*, 2007] Favier, D., Louche, H., Schlosser, P., Orgeas, L., Vacher, P. et Debove, L. (2007). Homogeneous and heterogeneous deformation mechanisms in an austenitic polycrystalline Ti–50.8 at.% Ni thin tube under tension. Investigation via temperature and strain fields measurements. *Acta Materalia*, 55:5310–5322.

[Frick *et al.*, 2005] Frick, P., Ortega, A., Tyber, J., Maksound, A., Maier, H., Liu, Y. et Gall, K. (2005). Thermal processing of polycristalline NiTi shape memory alloys. *Mat. Science & Eng. A*, pages 34–49.

[Funakubo, 1987] Funakubo, H. (1987). *Shape Memory Alloys*. Gordon & Breach publishers.

[Gao *et al.*, 2000] Gao, X., Huang, M. et Brinson, L. C. (2000). A multivariant model for SMAs Part 1. Crystallographic issues for single crystal model. *Int. J. of Plasticity*, 16:1345–1369.

[Gao *et al.*, 2005] Gao, X., Turner, T., Burton, D. et Brinson, L. (2005). Finite element analysis of adaptive-stiffening and shape-control SMA hybrid composites. *Smart Structures and Materials 2005, Proceedings of SPIE*, 5761:406–416.

[Garner *et al.*, 2000] Garner, L., Wilson, L., Lagoudas, D. et Rediniotis, O. (2000). Development of a shape memory alloy actuated biomimetic vehicle. *Smart Materials and Structures.*, 9:673–683.

[Gillet *et al.*, 1998] Gillet, Y., Patoor, E. et Berveiller, M. (1998). Calculation of pseudoelastic elements using a non-symmetrical thermomechanical transformation criterion and associated rules. *J. of Intelligent Material Systems and Structures*, 9(5):366–378.

[Grabe et Bruhns, 2009] Grabe, C. et Bruhns, O. (2009). Path dependance and multiaxial behavior of a polycrystalline NiTi alloy within the pseudoelastic and pseudoplastic temperature regimes. *Int. J. of Plasticity*, 25:513–545.

[G'Sell et Coupard, 1997] G'Sell, C. et Coupard, A. (1997). *Génie mécanique des caoutchoucs*. APOLLOR-INPL.

[Guenin, 1997] Guenin, G. (1997). Shape Memory and Pseudoelastic Properties of Fe-Mn-Si and Ti-Ni Based Alloys. *J. Phys IV*, 7 - C5:467–477.

[Haddag, 2007] Haddag, B. (2007). *Contribution à la modélisation de la mise en forme de tôles métalliques : application au retour élastique et à la localisation*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Centre de Metz.

[Hartl et Lagoudas, 2007] Hartl, D. et Lagoudas, D. (2007). Aerospace applications of shape memory alloys. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G : Journal of Aerospace Engineering*, 221.

[Hartl *et al.*, 2008] Hartl, D., Mooney, J. et Lagoudas, D. (2008). Numerically implemented constitutive model for SMA applications experiencing general loads resulting in plastic deformation and large rotations. *Proc. of ASME SMASIS, Ellicot City*.

[Hill, 1963] Hill, R. (1963). Elastic properties of reinforced solids : some theoritical principles. *J. of Mechanics and Physics of Solids*, 11:357–372.

[Huang et Brinson, 1998] Huang, M. et Brinson, L. C. (1998). A multivariant model for single crystal shape memory alloy behavior. *J. of Mechanics and Physics of Solids*, 46(8): 1379–1409.

[Huang *et al.*, 2000] Huang, M., Gao, X. et Brinson, L. C. (2000). A multivariant micromechanical model for SMAs, Part 2. Polycrystal model. *Int J. of Plasticity*, 16:1371–1390.

[Hughes et Winget, 1980] Hughes, T. et Winget, J. (1980). Finite Rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *Int. J. for Numerical Methods in Engineering*, 15:1862–1897.

[Khalil-Allafi *et al.*, 2002a] Khalil-Allafi, J., Dlouhy, A. et Eggeler, G. (2002a). Creep and aging of ni-rich niti shape memory alloys and the relation between microstructures and martensitic transformations. *Acta Materalia*, 50:4255–4274.

[Khalil-Allafi *et al.*, 2002b] Khalil-Allafi, J., Ren, X. et Eggeler, G. (2002b). The mechanism of multistage martensitic transformations in aged Ni-rich NiTi shape memory alloys. *Acta Materalia*, 50:793–803.

[Koistinen et Marburger, 1959] Koistinen, D. et Marburger, R. (1959). A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. *Acta Metall.*, 7:55–69.

[Lagoudas, 2008] Lagoudas, D. (2008). *Shape Memory Alloys - Modeling and Engineering Applications*. Sciences Sup. Springer US.

[Lagoudas et Bo, 1999] Lagoudas, D. et Bo, Z. (1999). Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part II : material characterization and experimental results for a stable transformation cycle. *Int. J. of Eng. Science*, 37(9):1175–1203.

[Lagoudas et Entchev, 2004] Lagoudas, D. et Entchev, P. (2004). 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.

[Lagoudas *et al.*, 2006] Lagoudas, D., Entchev, P., Popov, P., Patoor, E., Brinson, L. C. et Gao, X. (2006). Shape memory alloys, part II : Modelling of polycrystals. *Mechanics of Materials*, (38):430–462.

[Lemaitre et Chaboche, 2004] Lemaitre, J. et Chaboche, J.-L. (2004). *Mécanique des matériaux solides*. Sciences sup. Dunod, 2e édition édition.

[Lexcellent *et al.*, 2006] Lexcellent, C., Boubakar, M., Bouvet, C. et Calloch, S. (2006). About modelling the shape memory alloy behaviour based on the phase trans-

formation surface identification under proportional loading and anisothermal conditions. *Int. J. of Solids and Structures*, 43:613–626.

[Lexcellent et Leclercq, 1996] Lexcellent, C. et Leclercq, S. (1996). A general macroscopic description of the thermomechanical behavior of shape memory alloys. *J. Mech. and Phys. of Solids*, 44(6):953–980.

[Lexcellent et Schlomerkemper, 2006] Lexcellent, C. et Schlomerkemper, A. (2006). Comparison of several models for the determination of the phase transformation yield surface in shape memory alloys with experimental data. *Acta Materalia*, 55:2995–3006.

[Lexcellent *et al.*, 2002] Lexcellent, C., Vivet, A., Bouvet, C., Calloch, S. et Blanc, P. (2002). Experimental and numerical determinations of the initial surface of phase transformation under biaxial loading in some polycrystalline shape-memory alloys. *J. Mech. and Phys. of Solids*, 50:2717–2735.

[Liang et Rogers, 1990] Liang, C. et Rogers, C. (1990). One dimensional thermomechanical constitutive relations for shape memory materials. *J. of Intelligent Material Systems and Structures*, 1:207–234.

[Liang et Rogers, 1992] Liang, C. et Rogers, C. (1992). A multi dimensional constitutive model for shape memory alloys. *J. of Engineering Mathematics*, 26:429–443.

[Liu et Favier, 2000] Liu, Y. et Favier, D. (2000). Stabilisation of martensite due to shear deformation via variant reorientation in polycrystalline NiTi. *Acta Materalia*, 48(13):3489–3499.

[Liu *et al.*, 1998] Liu, Y., Xie, Z., Van Humbeeck, J. et Delaey, L. (1998). Asymmetry of stress-strain curves under tension and compression for NiTi Shape Memory Alloys. *Acta Materialia*, 48:4325–4338.

[Liu *et al.*, 1999] Liu, Y., Xie, Z., Van Humbeeck, J. et Delaey, L. (1999). Some results on the detwinning process in NiTi shape memory alloys. *Scripta Materialia*, 41:1273–1281.

[Lu et Weng, 1998] Lu, Z. et Weng, G. (1998). A self-consistent model for the stress–strain behavior of shape-memory alloy polycrystals. *Acta Materialia*, 46:5423–5433.

[Mertmann *et al.*, 1994] Mertmann, M., Hornbogen, E. et Escher, K. (1994). Development of a robotic gripper based on a NiTi-silicone composite material with integrated sensing functions. *Proceedings of SMM-94, International Academic Publishers*, page 556.

[Miyazaki *et al.*, 1986] Miyazaki, S., Igo, Y. et Otsuka, K. (1986). Effect of thermal cycling on the transformation temperatures of Ti-Ni alloys. *Acta Metall.*, 34:2045.

[Miyazaki *et al.*, 1982] Miyazaki, S., Ohmi, Y., Otsuka, K. et Suzuki, Y. (1982). Characteristics of deformation and transformation pseudoelasticity in Ti-Ni alloys. *J. de Phys.*, 43:C4–255.

[Neuking *et al.*, 2005] Neuking, K., Abu-Zarifa, A., Youcheu-Kemtchou, S. et G.Eggeler (2005). Polymer/NiTi composites, Fundamental aspects, Processing and Properties. *Advanced Engineering materials*, 7:1014.

[Nishida *et al.*, 1986] Nishida, M., Wayman, C. et Honma, T. (1986). Precipitation processes in near-equiatomic TiNi Shape Memory Alloys. *Metall. Trans.*, 17A:1505.

[Orgéas et Favier, 1998] Orgéas, F. et Favier, D. (1998). Stress-induced martensitic transformation of a NiTi alloy in isothermal shear, tension and compression. *Acta Materialia*, 46(15):5579–5591.

[Ortin, 1992] Ortin, J. (1992). Preisach modeling of hysteresis of a pseudoelastic Cu-Zn-Al single crystal. *J. Appl. Physics*, 71(3):1454–1461.

[Otsuka et Ren, 2005] Otsuka, K. et Ren, X. (2005). Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Progress in Materials Science*, 50:511–678.

[Otsuka et Wayman, 1998] Otsuka, K. et Wayman, C. (1998). *Shape Memory Materials*. Sciences sup. Cambridge University Press.

[Panico et Brinson, 2007] Panico, M. et Brinson, L. (2007). A three-dimensional phenomenological model for martensite reorientation in shape memory alloys. *J. of Mechanics and Physics of Solids*, 55:2491–2511.

[Panico et Brinson, 2008] Panico, M. et Brinson, L. (2008). Computational modeling of porous shape memory alloys. *Int. J. of Solids and Structures*, 45(21):5613–5626.

[Patel et Cohen, 1953] Patel, J. et Cohen, M. (1953). Criterion for the action of applied stress in the martensitic transformation. *Acta Metall*, 1:531.

[Patoor *et al.*, 1996] Patoor, E., A.Eberhardt et Berveiller, M. (1996). Micromechanical modelling of superelasticity in shape memory alloys. *J. Phys IV*, C1-6:277–292.

[Patoor et Berveiller, 1994] Patoor, E. et Berveiller, M. (1994). *Technologie des alliages à mémoire de forme*. Traité de Nouvelles Technologies. Hermes.

[Patoor *et al.*, 1995] Patoor, E., El Amrani, M., Eberhardt, A. et Berveiller, M. (1995). Determination of the Origin for the Dissymmetry Observed between Tensile and Compression Tests on Shape Memory Alloys. *J. Phys. IV*, 5:495–500.

[Patoor *et al.*, 2006] Patoor, E., Lagoudas, D. C., Entchev, P. B., Brinson, L. C. et Gao, X. (2006). Shape memory alloys, part I : general properties and modeling of single crystals. *Mechanics of Materials*, 38:391–429.

[Payandeh *et al.*, 2009] Payandeh, Y., Meraghni, F., Patoor, E. et Eberhardt, A. (2009). Effect of martensitic transformation on the debonding propagation in Ni–Ti shape memory wire composite. *Mat. Science & Eng. A*, In Press, Corrected Proof.

[Peultier, 2005] Peultier, B. (2005). *Alliages à mémoire de forme : modélisation et calcul de structures*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Centre de Metz.

[Peultier *et al.*, 2006] Peultier, B., Ben Zineb, T. et Patoor, E. (2006). Macroscopic constitutive law of shape memory alloy thermomechanical behaviour. Application to structure computation by FEM. *Mechanics of Materials*, (38):510–524.

[Peultier *et al.*, 2008] Peultier, B., Ben Zineb, T. et Patoor, E. (2008). A simplified micromechanical constitutive law adapted to the design of shape memory applications by finite element methods. *Mat. Science & Eng. A*, (481-482):384–388.

[Piao *et al.*, 1993] Piao, M., Otsuka, K., Miyazaki, S. et Horikawa, H. (1993). Mechanism of the A_s temperature increase by pre-deformation in thermoelastics alloys. *Mater. Trans. JIM*, 34:919.

[Plietsch et Ehrlich, 1997] Plietsch, R. et Ehrlich, K. (1997). Strength differential effect in pseudoelastic NiTi shape memory alloys. *Acta Materalia*, 45(6):2417–2424.

[Poon *et al.*, 2005] Poon, C., Lau, K. et Zhou, L. (2005). Design of pull-out stresses for prestrained SMA wire/polymer hybrid composites. *Composites : Part B*, 36:25–31.

[Popov et Lagoudas, 2007] Popov, P. et Lagoudas, D. C. (2007). A 3-D constitutive model for shape memory alloys incorporating pseudoelasticity and detwinning of self-accommodated martensite. *Int. J. of Plasticity*, (23):1679–1720.

[Qidwai et Lagoudas, 2000] Qidwai, M. et Lagoudas, D. (2000). On thermomechanics and transformation surfaces of polycrystalline NiTi shape memory alloy material. *Int. J. of Plasticity*, 16:1309–1343.

[Raniecki et Lexcellent, 1994] Raniecki, B. et Lexcellent, C. (1994). R-L models of pseudoelasticity and their specification for some shape memory alloy. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 12(1):21–50.

[Raniecki et Lexcellent, 1998] Raniecki, B. et Lexcellent, C. (1998). Thermodynamics of isotropic pseudoelasticity in shape memory alloys. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 17(2):185–205.

[Roh et Kim, 2003] Roh, J. et Kim, J. (2003). Adaptability of hybrid smart composite plate under low velocity impact. *Composites : Part B*, 34:117–125.

[Saint Sulpice *et al.*, 2009] Saint Sulpice, L., Arbab Chirani, S. et Calloch, S. (2009). A 3D super-elastic model for shape memory alloys taking into account progressive strain under cyclic loadings. *Mechanics of Materials*, 41:12–26.

[Schryvers *et al.*, 2006] Schryvers, D., Tirry, W. et Yang, Z. (2006). Measuring strain fields and concentration gradients around Ni_4Ti_3 precipitates. *Mat. Science & Eng. A*, 438-440:485–488.

[Simo et Hughes, 2000] Simo, J. et Hughes, T. (2000). *Computational Inelasticity*. Mechanics and Materials. Springer.

[Simo et Taylor, 1985] Simo, J. et Taylor, R. (1985). Consistent tangent operators for rate-independent elasto-plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 48:101–108.

[Simulia, 2008] Simulia (2008). *Abaqus Theory Manual V. 6.7 - section 5.2.*

[Siredey *et al.*, 1999] Siredey, N., Patoor, E., Berveiller, M. et Eberhardt, A. (1999). Constitutive equations for polycrystalline thermoelastic shape memory alloys : Part I.

Intragranular interactions and behavior of the grain. *Int. J. of Solids and Structures*, 36:4289–4315.

[Sittner, 2008] Sittner, P. (2008). RoundRobin SMA Modelling. *S3T EUROCORES Workshop, Praha, Czech Republic*.

[Sittner *et al.*, 2006] Sittner, P., Landa, M., Lukas, P. et Novak, V. (2006). R-phase transformation phenomena in thermomechanically loaded NiTi polycrystals. *Mechanics of Materials*, 38:475–492.

[Sun et Vaidya, 1996] Sun, C. et Vaidya, R. (1996). Prediction of composite properties from a representative volume element. *Composites Science and Technology*, 56(12):171–179.

[Tadaki *et al.*, 1986] Tadaki, T., Nakata, Y., Schimizu, K. et Otsuka, K. (1986). *Trans. JIM*, 27:731.

[Tahiri *et al.*, 2004] Tahiri, V., Patoor, E. et Eberhardt, A. (2004). An analysis of the thermomechanical behavior of a shape memory alloy/elastomer composite. *J. Phys IV*, 115:195.

[Taillard, 2006] Taillard, K. (2006). *Etude du comportment thermomécanique des alliages à mémoire de forme sous sollicitations multiaxiales*. Thèse de doctorat, ENS Cachan.

[Taillard *et al.*, 2008] Taillard, K., Arbab Chirani, S., Calloch, S. et Lexcellent, C. (2008). Equivalent transformation strain and its relation with martensite volume fraction for isotropic and anisotropic shape memory alloys. *Mechanics of Materials*, 40:151–170.

[Tanaka, 1986] Tanaka, K. (1986). A thermomechanical Sketch of Shape Memory Effect : One dimensional Tensile Behavior. *Res. Mech.*, 18:251–263.

[Tanaka *et al.*, 1995] Tanaka, K., Nishimura, F., Hayashi, T., Tobushi, H. et Lexcellent, C. (1995). Phenomenological analysis on subloops and cyclic behavior in shape memory alloys under mechanical and/or thermal loads. *Mechanics of Materials*, 19:281–292.

[Tang *et al.*, 1999] Tang, W., Sundman, B., Sandström, R. et Qiu, C. (1999). New modelling of the B2 phase and its associated martensitic transformation in the Ti-Ni system. *Acta Materalia*, 47:3457–3468.

[Thiebaud *et al.*, 2007] Thiebaud, F., Lexcellent, C., Collet, M. et Foltete, E. (2007). 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*, 41:208–221.

[Thumann *et al.*, 1986] Thumann, M., Velten, B. et E.Hornbogen (1986). *Proceedings of the International Symposium on Shape Memory Alloys, Chioan Academic Publishers*.

[Tirry et Schryvers, 2008] Tirry, W. et Schryvers, D. (2008). In situ transmission electron microscopy of stress-induced martensite with focus on martensite twinning. *Mat. Science & Eng. A*, 481-482:420–425.

[Wagner et Windl, 2009] Wagner, M. et Windl, W. (2009). Elastic anisotropy of Ni_4Ti_3 from first principles. *Scripta Materialia*, 60(4):207–210.

[Wei *et al.*, 1997] Wei, Z., Tang, C. et Lee, W. (1997). Design and fabrication of intelligent composites based on shape memory alloys. *J. of Materials Processing Technology*, 69:68–74.

[Weschler *et al.*, 1953] Weschler, M., Lieberman, D. et Read, T. (1953). On the theory of the formation of martensite. *Trans. AIME*, 197:1503.

[Wu *et al.*, 2003] Wu, X., Sun, G. et Wu, J. (2003). The nonlinear relationship between transformation strain and applied stress for nitinol. *Materials Letters*, 57:1334–1338.

[Wurzel, 1999] Wurzel, D. (1999). Marforming and tempering of binary ni-ti alloys including precipitation effects. *Mat. Science & Eng. A*, 273–275:634–638.

[Xie *et al.*, 1989] Xie, C., Zhao, L. et Lei, T. (1989). Effect of precipitates on the electrical resistivity-temperature curves in an aged Ti-51.8 at % Ni shape memory alloy. *Scripta Metallurgica*, 23:2131–2136.

[Xie *et al.*, 1998] Xie, Z., Liu, Y. et Van Humbeeck, J. (1998). Microstructure of NiTi shape memory alloy due to tension-compression cyclic deformation. *Acta Materialia*, 46:1989–2000.

[Zaki et Moumni, 2007] Zaki, W. et Moumni, Z. (2007). A three-dimensional model of the thermomechanical behavior of shape memory alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55:2455–2490.

[Zhang, 2000] Zhang, J. (2000). Thèse de doctorat, University of Tsubaka.

[Zhang *et al.*, 2006] Zhang, R., Ni, Q., Matsuda, A., Yamamura, T. et Iwamoto, M. (2006). Vibration characteristics of laminated composite plates with embedded shape memory alloys. *Composite Structures*, 74:389–398.