



**HAL**  
open science

# Modélisation du comportement thermomécanique de structures minces en alliage à mémoire de forme

Arnaud Duval, Mohamed Haboussi, Tarak Ben Zineb

► **To cite this version:**

Arnaud Duval, Mohamed Haboussi, Tarak Ben Zineb. Modélisation du comportement thermomécanique de structures minces en alliage à mémoire de forme. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. hal-03391372

**HAL Id: hal-03391372**

**<https://hal.science/hal-03391372>**

Submitted on 21 Oct 2021

**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.

# Modélisation du comportement thermomécanique de structures minces en alliage à mémoire de forme

A. DUVAL, M. HABOUSSI, T. BEN ZINEB

LEMTA, Nancy-Université, CNRS, 2 rue Jean Lamour, 54500 Vandoeuvre-lès-Nancy

## Résumé :

*Un modèle phénoménologique est proposé afin de décrire le comportement thermomécanique 3D des alliages à mémoire de forme (AMF). Il permet de décrire les phénomènes caractéristiques de ce type de matériau. Le modèle est reformulé en une version bidimensionnelle adaptée au dimensionnement de structures minces. La loi de comportement est implantée dans le code de calcul par éléments finis Abaqus®. Cet outil numérique est utilisé afin de concevoir des applications microfluidiques utilisant des films minces en AMF.*

## Abstract :

*A 3D constitutive model for the description of the thermomechanical behavior of shape memory alloys (SMA) is presented. In order to design SMA thin structures, a 2D version is derived from this model. It is implemented into the finite element code Abaqus®. The obtained numerical tool is adopted to design microfluidic devices made of SMA films.*

**Mots clefs :** alliage à mémoire de forme, éléments finis, calcul de structures

## 1 Introduction

Les matériaux dits « intelligents » ont conduit au développement d'applications innovantes basées sur leurs propriétés inédites. Si les structures simples telles que les barres ou les ressorts peuvent facilement être dimensionnées en adoptant une approche empirique, des modèles capables de prédire le comportement de structures plus complexes en trois dimensions sont nécessaires. Dans cette perspective, le modèle présenté ici décrit le comportement des alliages NiTi qui représentent la majeure partie des applications.

Les modèles existants peuvent être classés en deux catégories : les modèles phénoménologiques et les modèles micromécaniques. Les modèles du premier type [1, 2, 3, 4] utilisent des variables définies de façon macroscopique pour décrire l'effet de la transformation réversible de l'austénite en martensite et la réorientation des variantes de martensite lors d'un chargement thermomécanique. Les variables choisies sont par exemple les fractions de martensite thermique(auto-accommodée) et orientée [1, 2, 4] ou la fraction de martensite et son orientation propre [3]. Ces modèles sont bien adaptés à une implémentation en éléments finis. Les modèles du second type [5, 6] sont basés sur une approche micromécanique de la transformation martensitique. Les comportements caractéristiques des alliages à mémoire de forme (superélasticité, effet mémoire) sont décrits en 3 dimensions de façon intrinsèque. Ces modèles sont cependant très coûteux en terme de temps de calcul ce qui les rend inadaptés au calcul de structures par éléments finis.

Le modèle présenté ici est bâti sur une approche micromécanique simplifiée afin de réduire le nombre de variables internes [7]. Un potentiel thermodynamique est proposé, faisant intervenir trois variables internes définies de façon macroscopique : la fraction volumique de martensite, la déformation de transformation moyenne de la martensite et la déformation moyenne d'accommodation des mâcles au sein de la martensite. Les forces motrices associées à ces variables dérivent de ce potentiel. L'introduction d'un potentiel de dissipation permet de gérer l'activation des mécanismes associés aux trois variables internes. Le modèle obtenu est implémenté dans un code de calcul par élément finis et a permis, de par l'utilisation d'éléments coques, de dimensionner des structures minces en AMF.

## 2 Loi de comportement thermomécanique

On considère un volume élémentaire représentatif (VER) d'un alliage à mémoire de forme. Le tenseur des déformations totales au sein du milieu peut se décomposer de la façon suivante :

$$E_{ij} = E_{ij}^e + E_{ij}^\alpha + E_{ij}^T + E_{ij}^{\text{twi}} \quad (1)$$

où  $E_{ij}^e$  est la déformation élastique,  $E_{ij}^\alpha$ , la déformation induite par dilatation thermique,  $E_{ij}^T = f \bar{\varepsilon}_{ij}^T$ , la déformation de transformation avec  $f$ , la fraction volumique de martensite et  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$ , la déformation de trans-

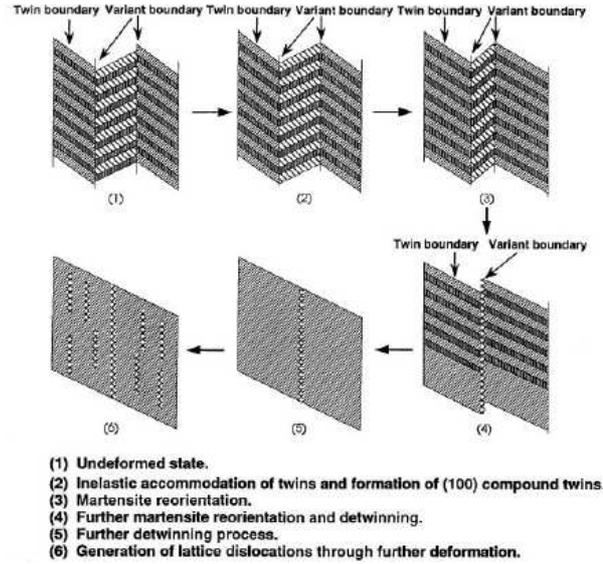


FIG. 1 – Différentes étapes de déformation de la martensite auto-accommodée [8].

formation moyenne de la martensite. Enfin,  $E_{ij}^{\text{twin}} = \gamma_m \bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}$  est la déformation par accommodation inélastique des mâcles avec  $\gamma_m$ , la fraction volumique de martensite présentant des mâcles et  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}$ , la déformation moyenne par mâclage de cette partie de la martensite. Ainsi, le comportement macroscopique de la martensite auto-accommodée peut être décomposé en quatre phases lors de l'application d'une contrainte (voir fig. 1) : l'accommodation inélastique des mâcles, le déplacement des interfaces entre les variantes ou réorientation, l'accommodation des mâcles une fois la martensite totalement orientée et enfin la génération de dislocations. L'observation de ce type de comportement dans de la martensite auto-accommodée et dans de la martensite formée sous contrainte montre que dans ce dernier cas, les mâcles ne sont pas présentes. On peut donc en déduire que la fraction de martensite présentant des mâcles évolue avec la fraction de martensite auto-accommodée :

$$\dot{\gamma}_m = f \frac{\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T - \bar{\varepsilon}_{\text{eq}}^T}{\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T} \quad (2)$$

La variable  $\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T$  représente la valeur macroscopique maximale de la déformation moyenne de transformation équivalente  $\bar{\varepsilon}_{\text{eq}}^T$  lorsque les variantes de martensite sont orientées à saturation. Les observations expérimentales montrent que cette quantité dépend de la direction de la déformation de transformation et présente une dissymétrie traction-compression. L'expression de  $\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T$  est basée sur une formulation de Prager modifiée :

$$\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T = K \left( 1 + \beta \frac{J_3 \left( \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right)}{\left( J_2 \left( \bar{\varepsilon}_{ij}^T \right) \right)^{\frac{3}{2}}} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (3)$$

où  $K$ ,  $\beta$  et  $n$  sont des paramètres matériaux pouvant être identifiés à partir d'essais en traction-compression. Les trois variables internes  $f$ ,  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  et  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}$  sont utilisées afin de construire le potentiel thermodynamique. Ce dernier correspond à la différence d'énergie libre de Gibbs entre l'état initial austénitique et un état biphasé. Il est écrit en tenant compte des incompatibilités de déformation au sein du VER par le biais d'une approche micromécanique simplifiée [7] :

$$\begin{aligned} \Delta G^{\text{biphasé}} = & -\Delta T S^A + B(T - T_0) f - \frac{1}{2} \Sigma_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} - \Sigma_{ij} f \bar{\varepsilon}_{ij}^T - \Sigma_{ij} \alpha \delta_{ij} (T - T_{\text{réf}}) \\ & - \Sigma_{ij} \gamma_m \bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}} + \frac{1}{2} f H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T + \frac{1}{2} H_f f^2 + \frac{1}{2} \gamma_m H_{ijkl}^{\text{twin-twin-twin}} \bar{\varepsilon}_{kl}^{\text{tw}} \bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}} \end{aligned} \quad (4)$$

où apparaissent les paramètres matériaux suivants :

- $B$ , la pente contrainte/température des limites de transformation ;
- $T_0$ , la température d'équilibre de la transformation martensitique ;

- $S_{ijkl}$ , le tenseur de souplesse ;
- $\alpha$ , le coefficient de dilatation thermique ;
- $T_{\text{réf}}$ , la température de référence pour la dilatation thermique ;
- $H_\varepsilon$ ,  $H_f$  et  $H_{ijkl}$ , les coefficients d'interaction respectivement en orientation, transformation de phase et accommodation inélastique des mâcles.

Considérant ce potentiel, l'inégalité de Clausius-Duhem s'écrit :

$$-\frac{\partial \Delta G^{\text{biphasé}}}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} - \frac{\partial \Delta G^{\text{biphasé}}}{\partial T} \cdot \dot{T} - A_k \cdot \dot{V}_k - \dot{\Sigma} : E - \vec{q} \cdot \frac{\text{grad } T}{T} \geq 0 \quad (5)$$

Les forces thermodynamiques  $A_k$  associées aux variables internes  $V_k$  sont extraites de (4) et (5). Des termes non linéaires leur sont ajoutés afin de créer des pénalités permettant de respecter les limitations physiques suivantes :

$$\begin{aligned} 0 < f < 1 \\ \bar{\varepsilon}_{kk}^T &= 0 \\ \bar{\varepsilon}_{\text{eq}}^T < \bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T \end{aligned} \quad (6)$$

Les forces thermodynamiques motrices associées aux variables internes  $f$ ,  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  et  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}$  sont respectivement :

$$\begin{aligned} F_f &= \Sigma_{ij} \bar{\varepsilon}_{ij}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2} H_\varepsilon \bar{\varepsilon}_{ij}^T \bar{\varepsilon}_{ij}^T - H_f f - \alpha_0 \frac{f-1}{f} - \alpha_1 \frac{f}{1-f} \\ F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} &= \Sigma_{ij} - \frac{\Sigma_{kk}}{3} \delta_{ij} - H_\varepsilon - \alpha_\varepsilon \frac{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}{\bar{\varepsilon}_{\text{sat}}^T - \bar{\varepsilon}_{\text{eq}}^T} \\ F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}} &= \Sigma_{ij} - \frac{\Sigma_{kk}}{3} \delta_{ij} - H_{ijkl}^{\text{tw}} \bar{\varepsilon}_{kl}^{\text{tw}} \end{aligned} \quad (7)$$

L'activation des mécanismes précités au niveau du VER est gérée en définissant des surfaces de charge pour les forces motrices correspondantes. Ainsi, pour l'orientation et le mâclage, une force critique scalaire est introduite de façon à modéliser une dissipation de type « frottement sec » :

$$\left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T} \right|_\sigma \leq F_{\bar{\varepsilon}^T}^{\text{crit}} \quad \text{et} \quad \left| F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}} \right|_\sigma \leq F_{\bar{\varepsilon}^{\text{tw}}}^{\text{crit}} \quad (8)$$

avec la norme  $|X_{ij}|_\sigma = \sqrt{\frac{3}{2} X_{ij} X_{ij}}$ .

Notons que la force critique d'accommodation inélastique des mâcles  $F_{\bar{\varepsilon}^{\text{tw}}}^{\text{crit}}$  prend une valeur nulle afin de faire démarrer ce processus de déformation dès l'apparition d'une contrainte.

Le processus de transformation doit être décrit en tenant compte du phénomène de boucles internes observé expérimentalement lorsque le chargement n'a pas lieu jusqu'à saturation de la transformation martensitique (fig. 2). Ainsi, le critère d'activation de la transformation s'écrit :

$$|F_f - \kappa_f| \leq \Gamma_f \quad (9)$$

où  $\kappa_f$  et  $\Gamma_f$  décrivent respectivement la position du centre de la surface de charge et son rayon lors de l'évolution du chargement. Une variable d'évolution  $\gamma_f$  est introduite afin de rendre compte de l'état de la transformation de phase. Cette dernière prend la valeur 0 lorsqu'une nouvelle transformation de phase débute et vaut 1 lorsque cette transformation sature.  $\kappa_f$  et  $\Gamma_f$  s'écrivent alors :

$$\kappa_f = (1 - \gamma_f) F_f^{\text{mém}} \quad \text{et} \quad \Gamma_f = (1 - \gamma_f) F_f^{\text{min}} + \gamma_f F_f^{\text{max}} \quad (10)$$

$F_f^{\text{min}}$  et  $F_f^{\text{max}}$  sont des paramètres matériaux qui représentent les rayons minimum et maximum pouvant être pris par la surface de charge.  $F_f^{\text{mém}}$  correspond au centre de la surface de charge lorsque le début de la transformation de phase en cours a été constaté.

Il est également nécessaire de préciser une loi de normalité pour les variables tensorielles  $\bar{\varepsilon}_{ij}^T$  et  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}$  :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^T = \dot{\lambda}_{\bar{\varepsilon}^T} \frac{3}{2} \frac{F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}}{|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^T}|_\sigma} \quad \text{et} \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{ij}^{\text{tw}} = \dot{\lambda}_{\bar{\varepsilon}^{\text{tw}}} \frac{3}{2} \frac{F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}}}{|F_{\bar{\varepsilon}_{ij}^{\text{tw}}}|_\sigma} \quad (11)$$

L'ensemble de ces équations constitue la loi de comportement.

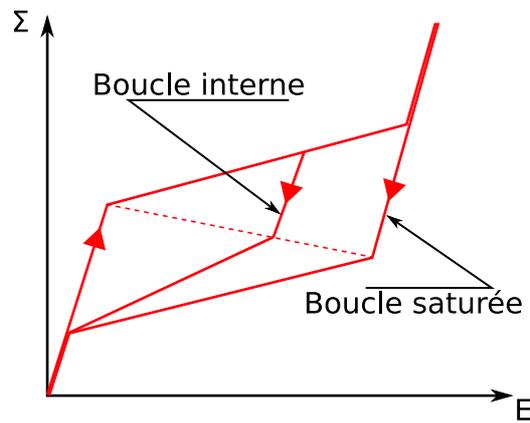


FIG. 2 – Décharge en boucle interne ou après saturation de la transformation martensitique.

### 3 Mise en place d'un outil numérique de dimensionnement

Le présent travail porte sur le dimensionnement d'applications utilisant des films minces en alliage à mémoire de forme. Les conditions d'équilibre du VER sont ainsi reformulées en adoptant l'hypothèse d'un état plan de contraintes. Celle-ci est justifiée par les fines épaisseurs des structures étudiées. La reformulation du modèle de comportement en 2D est plus avantageuse sur le plan numérique que l'ajout d'une condition supplémentaire  $\Sigma_{i3} = 0$ .

Le système d'équations régissant l'équilibre du VER est discrétisé afin d'être résolu numériquement. Les différentes variables du problème sont séparées en deux catégories :

- les variables de pilotage,  $\Delta E_{ij}$  et  $\Delta T$ , sont représentées par un vecteur  $\Delta Y$ . Ce choix est lié à la formulation des éléments finis utilisés par la suite (couplage température-déplacement) ;
- les variables inconnues,  $\Delta \Sigma_{ij}$ ,  $\Delta f$ ,  $\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^T$ ,  $\Delta \bar{\varepsilon}_{ij}^{tw}$ ,  $\Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^T}$  et  $\Delta \lambda_{\bar{\varepsilon}^{tw}}$ , sont représentées par un vecteur  $\Delta X$ .

La résolution des équations du modèle à la fin d'un incrément de chargement se résume ainsi à résoudre  $\mathcal{F}(X + \Delta X, Y + \Delta Y) = 0$  partant d'un système équilibré initialement  $\mathcal{F}(X, Y) = 0$ . Un algorithme de Newton-Raphson est utilisé pour calculer l'incrément des variables  $\Delta X$  correspondant à un incrément des variables de contrôle  $\Delta Y$ . Une prédiction élastique permet de déterminer les éventuelles surfaces de charges à équilibrer *via* un algorithme de type prédiction-correction [9].

La loi de comportement est implémentée dans le code de calcul par éléments finis Abaqus<sup>®</sup> *via* la *subroutine* Umat (User MATerial). Cette routine fournit l'incrément de contrainte  $\Delta \Sigma_{ij}$  correspondant à un incrément de déformation totale  $\Delta E_{ij}$  et de température  $\Delta T$  en chaque point d'intégration de la structure discrétisée en éléments finis. Les opérateurs tangents thermomécaniques  $\frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta E_{kl}}$  et  $\frac{\partial \Delta \Sigma_{ij}}{\partial \Delta T}$ , permettant d'équilibrer la structure, sont issus du jacobien  $\frac{\partial \Delta X}{\partial \Delta Y}$  utilisé lors du schéma d'intégration de Newton-Raphson. Ils sont utilisés pour la construction de la matrice de rigidité de chaque élément fini.

### 4 Résultats et discussion

L'utilisation de films minces en AMF au sein d'applications microfluidiques de type micropompe ou microvalve permet de s'affranchir de tout mécanisme classique. Le débit de la pompe est assuré par la déformation d'une membrane en AMF pilotée en température. Du fait du faible volume, une quantité d'énergie électrique très faible est nécessaire pour actionner la pompe en chauffant le matériau par effet Joule. La propriété exploitée ici est donc l'effet mémoire double sens assisté des alliages à mémoire de forme. On a ainsi une structure qui possède une forme froide et une forme chaude, le retour vers la forme froide étant assuré par un élément de rappel élastique ou en AMF (fig. 3).

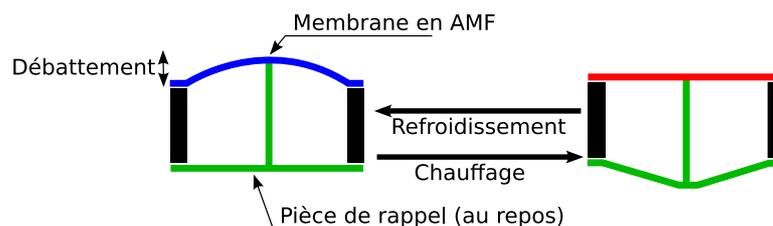


FIG. 3 – Principe de fonctionnement d'une micropompe à membrane AMF.

$E$ (MPa)	70000	$A_f$ (°C)	16
$\nu$	0,3	$r_f$	0,3
$\varepsilon_{\max}^{T^{\text{trac}}}$	0,07	$F_{\varepsilon T}^{\text{crit}}$ (MPa)	160
$\varepsilon_{\max}^{T^{\text{comp}}}$	0,07	$H_f$ (MPa)	4
$b^{\text{trac}}$ (MPa/°C)	11,9	$H_\varepsilon$	1000
$M_s$ (°C)	-20	$H^{\text{tw}}$ (MPa)	45000

TAB. 1 – Paramètres matériau

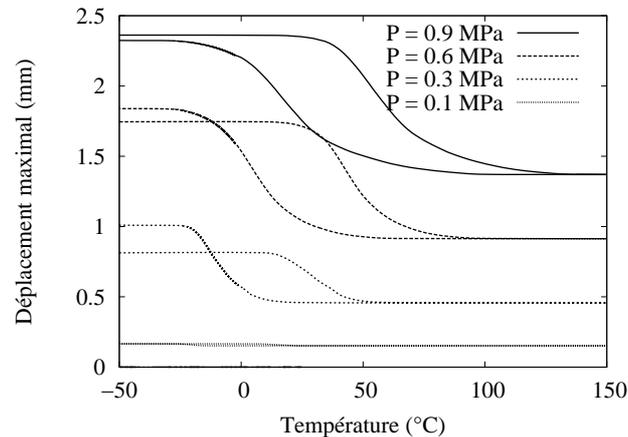


FIG. 4 – Simulations de gonflement à différentes pressions.

Une approche simplifiée du problème consiste à ne considérer que la membrane en AMF, de forme circulaire, encastrée sur sa périphérie et soumise à une pression constante. Un changement de température permet de passer d'une forme à l'autre. La membrane modélisée ici a un diamètre de 1 mm et une épaisseur de 0,01 mm. Le chargement se décompose de la façon suivante :

- état initial austénitique ;
- refroidissement pour atteindre un état totalement martensitique ;
- mise sous pression ;
- chauffage jusqu'à un état totalement austénitique ;
- refroidissement vers un état totalement martensitique ;

Les paramètres matériaux sont présentés dans le tableau 1. Les résultats présentés en fig. 4 montrent le débattement de la membrane en fonction de la température reporté pour différentes pressions de gonflement. Pour des pressions faibles, une différence de débattement apparaît entre le premier passage par la forme froide (mise sous pression de la martensite auto-accomodée) et le second passage qui présente un débattement plus important. Ceci est dû au fait que la seconde transformation austénite vers martensite se fait sous contrainte, ce qui influe fortement sur l'apparition ou non de mâcles au sein de la martensite. La détection de ce type d'effet de structure est garantie par la modélisation du comportement *via* une approche multidimensionnelle. La figure 5 montre la répartition de l'orientation équivalente de la martensite (la grandeur  $\bar{\varepsilon}_{eq}^T$ ) en fin de chargement pour une pression de 0,9 MPa.

## 5 Conclusion

Le présent modèle de comportement est basé sur une description macroscopique des différents mécanismes physiques impliqués dans les propriétés inédites des AMF. Il a été implanté au sein d'un code de calcul par éléments finis et permet de prédire la réponse de structures minces ou volumiques en AMF à un chargement thermomécanique.

Cependant, dans le cadre de la conception de microcomposants en films minces d'AMF, la prise en compte des effets de taille (évolution des propriétés macroscopique en fonction de la taille de la microstructure) et de localisation de la transformation martensitique doivent être considérés. Les développements futurs du modèle porteront sur l'intégration d'une formulation non locale du mécanisme de transformation martensitique afin de prendre en compte l'influence de la zone voisine sur le comportement du matériau en un point donné.

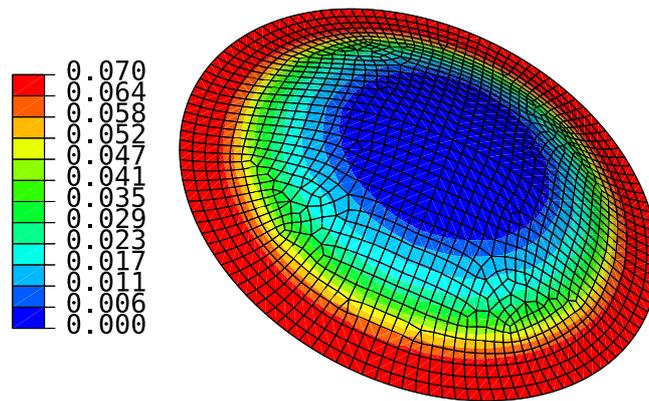


FIG. 5 – Répartition de la quantité  $\bar{\epsilon}_{eq}^T$  au sein de la structure.

## Références

- [1] Panico M. and Brinson L. A three-dimensional phenomenological model for martensite reorientation in shape memory alloys. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55, 2491–2511, 2007.
- [2] Lagoudas D. C. and Popov P. A 3-D constitutive model for shape memory alloys incorporating pseudoelasticity and detwinning of self-accommodated martensite. *International Journal of Plasticity*, (23), 1679–1720, 2007.
- [3] Peultier B. Alliages à mémoire de forme : modélisation et calcul de structures. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Centre de Metz, July 2005.
- [4] Lexcelent C. and Thiebaud F. Determination of the phase transformation zone at a crack tip in a shape memory alloy exhibiting asymmetry between tension and compression. *Scripta Materialia*, (59), 321–323, 2008.
- [5] Patoor E., Lagoudas D. C., Entchev P. B., Brinson L. C., and Gao X. Shape memory alloys, Part II : general properties and modeling of single crystals. *Mechanics of Materials*, 38, 391–429, 2006.
- [6] Huang M., Gao X., and Brinson L. C. A multivariant micromechanical model for SMAs Part 2. polycrystal model. *International Journal of Plasticity*, 16, 1371–1390, 2000.
- [7] Peultier B., Ben Zineb T., and Patoor E. A simplified micromechanical constitutive law adapted to the design of shape memory applications by finite element methods. *Materials Science and Engineering*, A(481-482), 384–388, 2008.
- [8] Liu Y., Xie Z., Van Humbeeck J., and Delaey L. Some results on the detwinning process in NiTi shape memory alloys. *Scripta Materialia*, 41, 1273–1281, 1999.
- [9] Simo J. and Hughes T. *Computational Inelasticity*. Springer, 2000.