

# Modélisation du comportement thermomécanique des films minces en AMF par une approche non-locale

K. M. ARMATTOE<sup>a</sup>, M. HABOUSSI<sup>b</sup>, T. BEN ZINEB<sup>a</sup>

a. Université de Lorraine, CNRS, LEMTA, 2 rue Jean Lamour, 54500, Vandœuvre-lès-Nancy, France

b. LSMP, CNRS, Université Paris 13, 99 avenue Jean-Baptiste Clément, 93430 Villetaneuse, France

## Résumé :

*Dans ce travail, un modèle phénoménologique non-local est proposé pour décrire le comportement thermomécanique instable de structures minces en alliages à mémoire de forme (AMF) lors de la transformation de phase. Ce modèle non-local est obtenu comme une extension au cadre non-local d'un modèle local macroscopique existant, développé à partir d'une expression de l'énergie libre de Gibbs. L'extension au cadre non-local est basée sur l'introduction d'une nouvelle variable, contrepartie non-locale de la fraction volumique de martensite présente dans le modèle local. Cette variable non-locale est alors définie par une équation aux dérivées partielles dont le terme source est la fraction volumique locale de martensite. Pour exploiter ce modèle non-local dans la simulation du comportement thermomécanique de films minces en AMF, un élément fini spécifique, ayant la fraction volumique non-locale comme degré de liberté supplémentaire, a été développé et implanté dans le logiciel de calcul Abaqus. L'outil numérique ainsi obtenu est utilisé pour décrire la localisation de la transformation de phase dans une plaque mince trouée en AMF soumise à un chargement thermique sous contrainte constante.*

## Abstract :

*A nonlocal phenomenological modelling of SMA thin structures presenting an unstable thermomechanical behavior during phase transformation is proposed in this work. This modelling is obtained as an extension to a nonlocal framework of an existing macroscopic local model, derived from an expression of a Gibbs free potential. The nonlocal extension is based on the introduction of a new variable, which is the nonlocal counterpart of the martensite volume fraction in the local model. This nonlocal variable is defined by a partial differential equation where the local martensite volume fraction stands as a source term. To simulate the localization of phase transformation in SMA thin plates, subjected to a thermal loading at a constant stress, a 2D plane stress finite element, with the nonlocal martensite volume fraction as an additional degree of freedom, is developed and implemented in the finite element code Abaqus.*

**Mots clefs :** Alliages à mémoire de forme, Structures minces, Approches non-locales, Éléments finis spécifiques.

## 1 Introduction

Les spécificités de comportement des AMF, telles que l'effet mémoire de forme, la superélasticité, et la densité élevée de travail mécanique fourni par ces AMF, les rendent particulièrement bien adaptés aux applications utilisant des dispositifs en miniature comme les microactionneurs, les microcomposants électroniques. Ces dispositifs sont souvent taillés dans des films minces en AMF qui montrent un comportement thermomécanique instable, caractérisé par une localisation suivie d'une propagation de la transformation de phase, [1-3].

La littérature propose de nombreux modèles phénoménologiques permettant de prédire le comportement thermomécanique des AMF massifs. Ces modèles développés dans un contexte local, ne décrivent pas correctement les phénomènes de localisation observés dans les structures minces en AMF. En effet, ces modèles, utilisés dans la simulation du comportement thermomécanique des structures minces en AMF donnent des réponses dépendantes du maillage. De plus, ils ne font aucune référence à un paramètre de

longueur interne, entraînant ainsi une localisation de la déformation de transformation sur une zone de volume nul (singularité) en présence d'adoucissement.

Dans le présent travail, nous proposons un modèle non-local de type-gradient, dédié à l'étude des phénomènes instables observés dans les structures minces en AMF. Ce modèle est obtenu à partir d'une extension au cadre non-local d'un modèle local existant, développé au sein des laboratoires LEM3 (Metz) et LEMTA (Nancy) [4-5]. Pour ce faire, nous introduisons une nouvelle variable non-locale de la transformation, représentant la contrepartie non-locale de la fraction volumique de martensite présente dans le modèle local. Cette nouvelle variable est régie par une équation aux dérivées partielles (EDP), écrite sur tout le domaine matériel considéré ; l'EDP fait apparaître un paramètre de longueur interne permettant de contrôler la taille de la zone d'interaction entre un point matériel du milieu considéré et son voisinage. Cette approche est inspirée des travaux réalisés par [6-7] sur les modèles non locaux de plasticité avec endommagement. Dans le but de simuler la réponse des structures minces en AMF, soumises à différents types de sollicitations thermomécaniques, un élément fini spécifique en contraintes planes est développé sur la base du présent modèle non-local. Cet élément fini possède, la fraction volumique non-locale de martensite comme degré de liberté supplémentaire (en plus des déplacements et de la température). Implémenté dans le logiciel de calcul par éléments finis Abaqus via la routine utilisateur UEL, l'élément fini est utilisé pour simuler la localisation de la transformation de phase et sa propagation dans une plaque mince trouée en AMF, soumise à un chargement thermique sous contrainte imposée.

## 2 Modélisation non-locale du comportement thermomécanique des AMF

Le modèle non-local de comportement proposé dans ce travail est une extension du modèle local détaillé dans [4-5] et [8]. Celui-ci est établi à partir de la définition d'un potentiel thermodynamique dont l'expression est :

$$\Delta G = -\frac{1}{2}\Sigma_{ij}S_{ijkl}\Sigma_{kl} - \Sigma_{ij}\alpha_{ij}\Delta T - \Delta TS^A + B(T - T_0)f - \Sigma_{ij}f\bar{\epsilon}_{ij}^T + \frac{1}{2}fH_{grain}\bar{\epsilon}_{ij}^T\bar{\epsilon}_{ij}^T + \frac{1}{2}H_{variant}f^2 \quad (1)$$

La fonctionnelle  $\Delta G$  représente la variation de l'énergie libre depuis l'état initial d'un VER d'AMF à l'état biphasé : austénite-martensite. Elle est fonction de la contrainte  $\Sigma_{ij}$ , de la température  $T$ , de deux variables internes  $f$  et  $\bar{\epsilon}_{ij}^T$ , qui représentent respectivement la fraction volumique de martensite et la déformation moyenne de transformation. La fonctionnelle  $\Delta G$  dépend également des paramètres matériaux  $H_{grain}$ ,  $H_{variant}$ ,  $B$  et  $T_0$ . Les paramètres  $H_{grain}$  et  $H_{variant}$  permettent de prendre en compte respectivement, les incompatibilités intergranulaires et intragranulaires (incompatibilités géométriques liées à la déformation lors de la transformation) et les incompatibilités entre les différentes variantes de martensite.  $T_0$  est la température d'équilibre de la transformation de phase et  $B$ , la variation linéaire de l'entropie autour de cette température. Les forces thermodynamiques associées aux variables internes  $f$  et  $\bar{\epsilon}_{ij}^T$  sont déduites de la fonctionnelle  $\Delta G$  :

$$F_f = -\frac{\partial \Delta G}{\partial f} = \Sigma_{ij}\bar{\epsilon}_{ij}^T - B(T - T_0) - \frac{1}{2}H_{grain}\bar{\epsilon}_{ij}^T\bar{\epsilon}_{ij}^T - H_{variant}f \quad (2)$$

$$F_{\bar{\epsilon}_{ij}^T} = -\frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}_{ij}^T} = f(\Sigma_{ij}^D - H_{grain}\bar{\epsilon}_{ij}^T) \quad (3)$$

$F_f$  représente la force de transformation et  $F_{\bar{\epsilon}_{ij}^T}$ , la force d'orientation des variantes de martensite. Dans l'équation (3), le tenseur des contraintes est remplacé par son déviateur à cause du caractère isovolumique de la transformation. Les processus de transformation de phase et d'orientation des variantes de martensite sont activés lorsque les forces thermodynamiques vérifient les relations :

$$F_f = F_f^{crit} \quad (4)$$

$$F_{\bar{\epsilon}_{ij}^T} = F_{\bar{\epsilon}_{ij}^T}^{crit} \quad (5)$$

$F_f^{crit}$  et  $F_{\bar{\epsilon}_{ij}^T}^{crit}$  correspondent aux forces critiques de transformation et de réorientation des variantes de martensite. La fraction volumique de martensite  $f$  et la déformation moyenne de transformation  $\bar{\epsilon}_{ij}^T$  doivent vérifier les limites physiques de saturation de la transformation ( $0 \leq f \leq 1$ ) et de la déformation de transformation ( $\bar{\epsilon}_{eq}^T = \sqrt{\frac{2}{3} \bar{\epsilon}_{ij}^T \bar{\epsilon}_{ij}^T} \leq \bar{\epsilon}^{sat}$  où  $\bar{\epsilon}^{sat}$  est un paramètre matériau caractérisant la déformation de transformation maximale). L'ensemble des équations précédentes constitue le modèle de comportement local. Pour rendre ce modèle valide en présence d'instabilités de comportement, observées dans les structures minces en AMF, il doit être reformulé en non-local. Pour ce faire, nous choisissons de suivre la démarche proposée par [7], [9] et [10] pour les modèles de plasticité avec endommagement. Celle-ci consiste à définir une nouvelle variable de la transformation, représentant la contrepartie non-locale de la variable fraction volumique de martensite locale  $f$  sous la forme :

$$\bar{f}(\bar{x}) = \frac{1}{\Psi(\bar{x})} \int_{\Omega} \psi(\bar{y}, \bar{x}) f(\bar{y}) d\Omega(\bar{y}) \quad (6)$$

Dans la relation (6),  $\bar{x}$  représente la position du point matériel ;  $\bar{y}$  est la position d'une partie infinitésimale du domaine  $\Omega$  ;  $\psi(\bar{y}, \bar{x})$  est une fonction poids ou noyau,  $\Psi(\bar{x})$  est une fonction de normation définie par :

$$\Psi(\bar{x}) = \int_{\Omega} \psi(\bar{y}, \bar{x}) d\Omega(\bar{y}) \quad (7)$$

La fonction noyau  $\psi(\bar{y}, \bar{x})$  (non explicitée ici) dépend d'un paramètre de longueur interne permettant de contrôler l'interaction du point matériel avec son voisinage. Des travaux réalisés par [6] et [11] ont montré que l'équation intégrale (6) peut-être remplacée par une équation aux dérivées partielles (EDP) sous la forme :

$$\bar{f}(\bar{x}) - l^2 \bar{\nabla}^2 \bar{f}(\bar{x}) = f(\bar{x}) \quad (8)$$

La relation (8) est obtenue en faisant des approximations basées sur les développements de Taylor autour du point  $\bar{x}$ , qui sont d'autant plus justifiées que la fonction de noyau est celle de Green. Nous pouvons remarquer que l'EDP (8) dépend de la fraction volumique locale de martensite  $f(\bar{x})$ , qui joue le rôle du terme source de l'EDP, de la fraction volumique non-locale de martensite  $\bar{f}(\bar{x})$ , champ inconnu, et d'un paramètre de longueur interne noté ici  $l$ .

Dans le but de décrire les phénomènes d'adoucissement dans le présent modèle non-local, la force critique de transformation est considérée décroissante en fonction de la variable non-locale  $\bar{f}$  sous la forme :

$$F_f^{crit} = F_0^{crit} \exp\left(-\frac{H_{\bar{f}}}{H_{\bar{f}} + 1} \bar{f}\right) \quad (9)$$

Cette expression de la force critique retenue dans le cas de la transformation de phase directe austénite-martensite est légèrement modifiée dans le cas de la transformation inverse sous la forme :

$$F_f^{crit} = F_0^{crit} \exp\left(-\frac{H_{\bar{f}}}{H_{\bar{f}} + 1} (1 - \bar{f})\right) \quad (10)$$

### 3 Formulation faible du problème non-local

Dans le but de simuler la réponse des structures minces en AMF sous divers types de sollicitations thermomécaniques, un élément fini 2D est développé sur la base du modèle de comportement précédemment décrit en prenant en compte les équations d'équilibre mécanique et thermique. On est donc amené à résoudre les équations de champ suivantes :

$$\begin{cases} \bar{f}(\bar{x}) - l^2 \nabla^2 \bar{f}(\bar{x}) = f(\bar{x}) \\ \text{div } \Sigma = 0 \\ -\text{div } \bar{q} + r = 0 \end{cases} \quad (11)$$

où  $\bar{q}$  représente le flux de chaleur dans le domaine  $\Omega$  et  $r$ , la puissance calorifique volumique des sources internes. Les équations de champs (11) sont complétées par les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} \Sigma_{ij} n_j = T_i \text{ sur } \Gamma^\Sigma; U_i = U_0 \text{ sur } \Gamma^u, \Gamma^\Sigma \cup \Gamma^u = \Gamma; \Gamma^\Sigma \cap \Gamma^u = \emptyset \\ \bar{\nabla} \bar{f} = \vec{0} \text{ sur } \Gamma \\ \bar{\nabla} \bar{q} = \bar{q}_d \text{ sur } \Gamma^q \end{cases} \quad (12)$$

Avec la deuxième condition aux limites dans (12), nous supposons que le flux de transformation est nul sur la frontière du domaine considéré. Conformément à la méthode des éléments finis, le système d'équations (11-12) est résolu sous sa forme faible :

$$\begin{cases} -\int_{\Omega} w_{\bar{f}} H^{\bar{f}u} : \delta E d\Omega + \int_{\Omega} [w_{\bar{f}} (1 - H^{\bar{f}\bar{f}}) \delta \bar{f} + l^2 \bar{\nabla} w_{\bar{f}} \cdot \bar{\nabla} \delta \bar{f}] d\Omega - \int_{\Omega} w_{\bar{f}} H^{\bar{f}T} \delta T d\Omega = -\int_{\Omega} [w_{\bar{f}} \bar{f}^{(i-1)} + l^2 \bar{\nabla} w_{\bar{f}} \cdot \bar{\nabla} \bar{f}^{(i-1)}] d\Omega + \int_{\Omega} w_{\bar{f}} f^{(i-1)} d\Omega \\ \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_u]^T : (H^{uu} : \delta E) d\Omega + \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_u]^T : H^{uf} \delta \bar{f} d\Omega + \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_u]^T : H^{uT} \delta T d\Omega = \int_{\Gamma^\Sigma} w_u \bar{T}^{(i)} d\Gamma^\Sigma - \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_u]^T : \Sigma^{(i-1)} d\Omega \\ \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_T]^T H^{TT} \delta T d\Omega + \int_{\Omega} w_T r d\Omega = \int_{\Gamma^q} w_T \bar{q}^{(i)} d\Gamma^q - \int_{\Omega} [\bar{\nabla} w_T]^T \bar{q}^{(i-1)} d\Omega \end{cases} \quad (13)$$

où  $w_u, w_{\bar{f}}, w_T$  sont des fonctions tests, prises ici de classe  $C^0$ . La loi de Fourier ( $\bar{q} = -k \bar{\nabla} T$  avec  $k$ , la conductivité thermique du matériau) assurant les échanges thermiques au sein du domaine  $\Omega$ , ainsi que les équations constitutives (2-3) du modèle sont utilisées sous leur formes incrémentales :

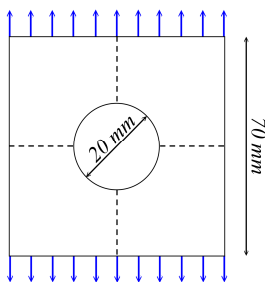
$$\begin{cases} \delta \Sigma = H^{uu} \delta E + H^{uf} \delta \bar{f} + H^{uT} \delta T \\ \delta f = H^{\bar{f}u} \delta E + H^{\bar{f}\bar{f}} \delta \bar{f} + H^{\bar{f}T} \delta T \\ \delta \bar{q} = H^{TT} \delta T \end{cases} \quad (14)$$

L'introduction des interpolations polynomiales des champs inconnus et leurs gradients nous permet de réécrire les équations d'équilibre à résoudre sous la forme suivante :

$$\begin{cases} [K^{uu}] \{\delta u^N\} + [K^{uf}] \{\delta \bar{f}^N\} + [K^{uT}] \{\delta T^N\} = -\{F_{\text{int}}^u\} + \{F_{\text{ext}}^u\} \\ [K^{\bar{f}u}] \{\delta u^N\} + [K^{\bar{f}\bar{f}}] \{\delta \bar{f}^N\} + [K^{\bar{f}T}] \{\delta T^N\} = -\{F_{\text{int}}^{\bar{f}}\} \\ [K^{TT}] \{\delta T^N\} = -\{F_{\text{int}}^T\} + \{F_{\text{ext}}^T\} \end{cases} \quad (15)$$

où  $[K^{uu}]$ ,  $[K^{uf}]$ ,  $[K^{uT}]$ ,  $[K^{\bar{f}u}]$ ,  $[K^{\bar{f}\bar{f}}]$ ,  $[K^{\bar{f}T}]$  et  $[K^{TT}]$  représentent des sous-matrices de rigidité non explicitées ici de l'élément fini 2D. L'implémentation de celui-ci dans le logiciel de calcul par éléments finis Abaqus a été réalisée via la routine utilisateur UEL.

L'outil numérique ainsi obtenu est utilisé pour décrire les phénomènes de localisation de la transformation de phase lors d'un chargement mettant en exergue le comportement effet mémoire de forme dans une plaque mince trouée en AMF (FIG. 1). La plaque est soumise à un chargement thermique sous une contrainte imposée de 300 MPa.



$E(\text{MPa})$	$\nu$	$\alpha(^{\circ}\text{C})^{-1}$	$\epsilon_{\text{trac}}^T$	$\epsilon_{\text{trac}}^{\text{TFA}}$
39500	0.3	0.3	0.056	0.053
$\epsilon_{\text{comp}}^T$	$b(\text{MPa}/^{\circ}\text{C})$	$M_s$	$A_f$	$r_f$
0.044	5	-80	-2	-2
$F_{\text{crit}}^{\text{er}}(\text{MPa})$	$H_f$	$H_{\bar{e}r}$	$H_s$	$H_{\bar{f}}$
100	2	1635	68.5	0.5

FIG. 1 – Plaque trouée en AMF avec les paramètres du modèle.

## 4 Résultats numériques et discussions

La figure 2 a) ci-dessous montre la distribution spatiale de la fraction volumique non-locale de martensite en fonction du chargement pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne. Nous pouvons remarquer que la transformation de phase débute d'abord au voisinage du trou, avant de se propager ensuite au reste de la plaque sous la forme d'une bande qui s'élargit au fur et à mesure que le chargement augmente. Notons que l'effet de la localisation de la transformation est atténué lorsque le paramètre de longueur interne prend des valeurs importantes : la figure 2 c) montre en effet que pour le même trajet AB indiqué sur la figure 2 b) et la même température ( $T = -15^{\circ}\text{C}$ ), la courbe d'évolution de la fraction volumique non-locale présente un pic de saturation pour les faibles valeurs de ce paramètre. La figure 2 d) montre l'évolution de la fraction volumique non-locale de martensite dans l'élément E de la figure 2 b) pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne; cette figure montre que ce paramètre influence légèrement la taille de l'hystérésis. Sur la figure 2 e), nous avons représenté la déformation totale en un point de la plaque (un nœud de l'élément E) en fonction de la température et pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne, les graphes ne montrent pas une influence importante de ce paramètre.

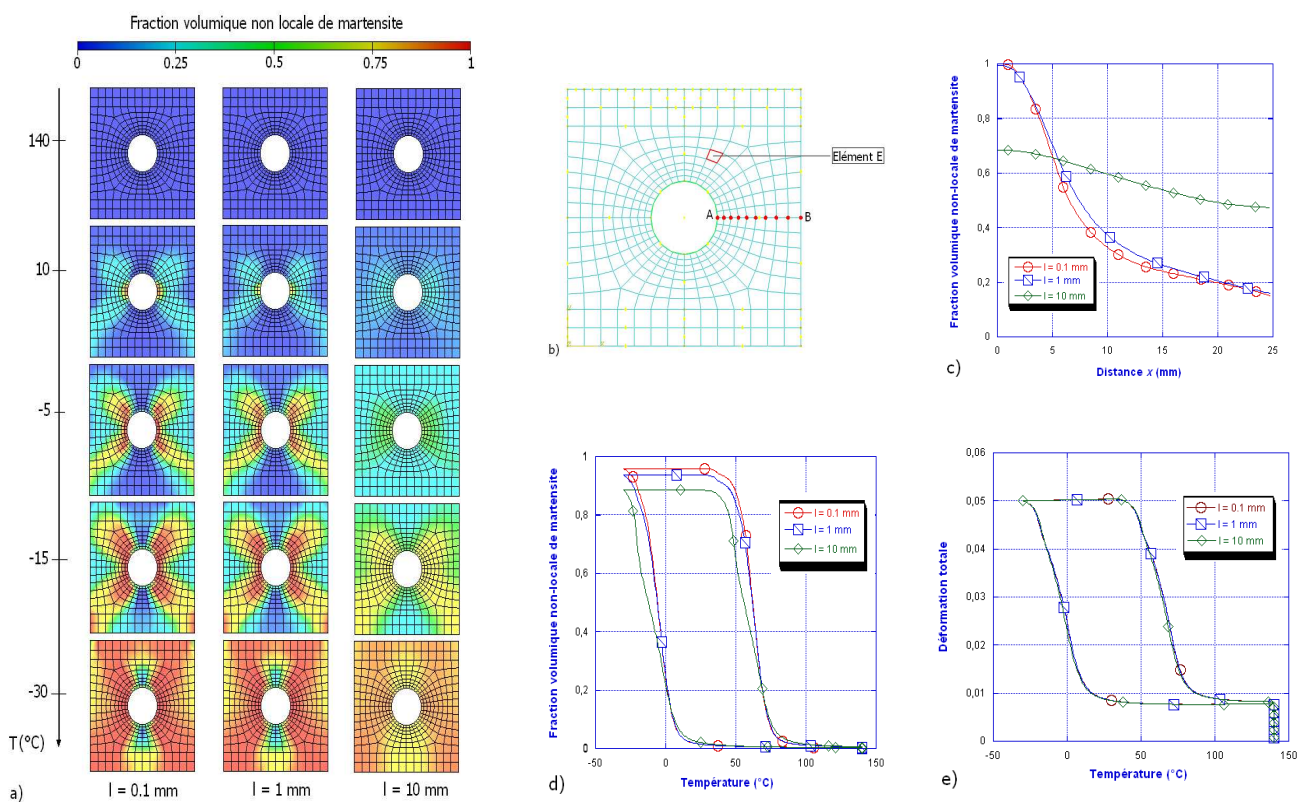


FIG. 2 – a) Distribution spatiale de la fraction volumique non-locale de martensite pour différentes valeurs du paramètre de longueur interne ; b) Chemin AB et élément E ; c) Evolution de la fraction volumique non-locale de martensite suivant le chemin AB; d) Evolution de la fraction volumique non-locale de martensite en fonction de la température dans l'élément E; e) Déformation totale en fonction de la température.

## 5 Conclusion

Un modèle de comportement non-local de type gradient est proposé en vue d'étudier les phénomènes de localisation et de propagation de la transformation de phase dans les structures minces en AMF. L'implémentation du modèle a nécessité le développement d'un élément fini 2D ayant un degré de liberté supplémentaire: la fraction volumique non-locale de martensite. Cet élément a servi dans l'étude de la localisation de la transformation de phase dans une plaque mince trouée en AMF. La suite de ce travail sera consacrée à la prise en compte des effets de la chaleur latente de transformation sur le comportement des structures minces en AMF.

## Références

- [1] Azadi B., Rajapakse R.K.N.D, Maijer D.M., Multi-dimensional constitutive modelling of SMA during unstable pseudoelastic behavior, *International Journal of Solids and Structures*, 44, 6473-6490, 2007.
- [2] Duval A., Haboussi M., Ben Zineb T., Modelling of localization and propagation of phase transformation in superelastic SMA by a gradient nonlocal approach, *International Journal of Solids and Structures*, 48, 1879-1893, 2011.
- [3] He Y. J., Sun Q. P., Macroscopic equilibrium domain structure and geometric compatibility in elastic phase transition of thin plates, *International Journal of Mechanical Sciences* 52, 198-211, 2010.
- [4] Duval A., Modélisation du comportement thermomécanique d'alliages à mémoire de forme, Application au dimensionnement de microsystèmes et extension en non local, Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré, Décembre 2009.
- [5] Chemisky Y., Modélisation du comportement macroscopique des alliages à mémoire de forme, Application aux matériaux composites, Thèse de doctorat, Université Paul Verlaine de Metz, Décembre 2009.
- [6] Engelen R. A. B., Geers M. G. D., Baaijens F.P.T., Nonlocal implicit gradient-enhanced elastoplasticity for the modelling of softening behavior, *International Journal of Plasticity*, 19, 403-433, 2003.
- [7] Pijaudier-Cabot G., Bazant Z.P., Nonlocal damage theory, *Journal of Engineering Mechanics-ASCE*, 113, 1512-1533, 1987.
- [8] Peultier B., Ben Zineb T., Patoor E., Macroscopic constitutive law of shape memory alloy thermomechanical behavior, Application to structure computation by FEM, *Material sciences and Engineering*, 38, 510-524, 2006.
- [9] Peerlings R.H.J., De Borst R., Brekelmans W.A.M., Wave propagation and localization in nonlocal gradient-enhanced damage models, *Journal de Physique*, 8, 293-300, 1998.
- [10] Bazant Z.P., Giovanni Di Luzio, Nonlocal microplane model with strain-softening yield limits, *International Journal of Solids and Structures*, 41, 7209-7240, 2004.
- [11] Peerlings R.H.J., Geers M.G.D., De Borst R., Brekelmans W.A.M., A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua, *International Journal of Solids and Structures*, 38, 7723-7756, 2001.