

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE
DES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME

OLEG VOLKOV
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
MAI 1999

© Oleg Volkov, 1999.



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions et
services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-53607-6

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE
DES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME

présenté par : VOLKOV Oleg

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. OSTIGUY Germain, Ph. D., président

M. TROCHU François, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. BRAILOVSKI Vladimir, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. REMACLE Jean-François, D. Sc. A., membre

À ma mère et ma famille

REMERCIEMENTS

Cette étude a été réalisée dans le Groupe d'étude et de modélisation sur les matériaux et les méthodes de fabrication (GEM3F) du Centre de recherche appliquée sur les polymères de l'École Polytechnique de Montréal. L'auteur tient à remercier toutes les personnes qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Je tiens également à remercier François Trochu, Vladimir Brailovski, Patrick Terriault, Armelle Figini, Aurore Landry, Nicolas Sacépé, Sylvain Turenne, Martin Vezina avec lesquels j'ai eu l'opportunité de travailler dans le GEM3F.

Mes remerciements vont également au ministère de l'Éducation du Gouvernement du Québec et au Conseil de recherche en sciences naturelles et en génie du Canada pour leurs aides financières.

Je tiens à remercier Messieurs Germain Ostiguy, François Trochu, Vladimir Brailovski et Jean-François Remacle pour avoir accepté d'être membres du jury et de lire ce document dans des délais très brefs.

Finalement, je voudrais remercier ma mère et ma famille pour leur patience et leur amour.

RÉSUMÉ

L'objectif de ce travail est d'étudier le comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme pour ensuite simuler numériquement leur réponse à des sollicitations thermomécaniques données. Il est bien connu que les comportements mécanique et thermique d'AMF sont liés directement l'un à l'autre. En effet, l'échantillon chargé mécaniquement ne possède pas les mêmes températures de transformation de phase que l'échantillon libre de charge. De la même façon, l'énergie mécanique accumulée durant la charge mécanique varie considérablement avec la température. Il est donc nécessaire de savoir comment l'énergie mécanique se transforme en chaleur et vice versa. Il est important ainsi de construire le modèle de transfert thermique à partir des équations du bilan énergétique qui tienne en même temps compte des hypothèses sur le comportement mécanique des AMF, ce qui permet d'inclure l'influence des sollicitations mécaniques sur l'état thermique du matériau. L'avantage de ce modèle consiste à relier le calcul numérique par éléments finis avec les lois de comportement expérimentales approximées par la méthode du krigeage dual. Cette dernière méthode permet d'obtenir à partir de quelques échantillons de données une seule formule analytique décrivant le comportement du matériau à l'intérieur même du principal cycle d'hystérésis, c'est-à-dire dans les cycles de charge partiel.

ABSTRACT

The objective of this work is to study the thermomechanical behaviour of memory-shape alloys and to provide a numerical method, which simulates the material response to a given thermomechanical loading. It is well-known that the thermal and mechanical behavior of SMA depend directly from each other. Indeed, the mechanically loaded sample does not have the same temperatures of phase transformation as a free load sample. In the same way, energy accumulated during the mechanical load varies considerably with the temperature. Thus, it is necessary to know how mechanical energy depends on heat energy and vice versa. It is significant to build the thermal model of heat transfer starting from the constitutive energetic equation that takes at the same time account of the mechanical behavior of SMA. Another advantage of this model consists in the fact that it enables to connect numerical calculation with the experimental laws of behavior approximated by the method of the dual kriging. This last method makes possible to obtain starting from samples of data a single analytical formula describing the behavior of material even inside the principal hysteresis cycle, i.e. in the cycles of partial loading.

TABLE DE MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	vii
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES ANNEXES	xiii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : REVUE BIBLIOGRAPHIQUE	3
1.1 Introduction	3
1.1.1 Description générale du comportement mécanique des AMF .	3
1.1.2 Superélasticité	5
1.1.3 Effet mémoire de forme	6
1.1.4 Analogies avec le comportement plastique	7
1.2 Transfert de chaleur	8
1.2.1 Choix des variables d'état et leurs associées	8
1.2.2 Variables microscopiques	9
1.2.3 Variables macroscopiques	11
1.2.4 Modélisation des cycles partiels	12
1.2.5 Mouvement de dislocations et effet de fatigue	14
1.2.6 Variations du volume	14
1.3 Construction d'un potentiel thermodynamique	15
1.4 Lois d'évolution des variables d'état et de l'énergie de dissipation ...	18
1.5 Conclusion	20

CHAPITRE 2	22
Introduction à l'article "Coupled Thermomechanical Model for Shape Memory Alloys"	22
MODÈLE THERMOMÉCANIQUE COUPLÉ EN APPLICATION POUR DES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME	23
2.1 Introduction	24
2.2 Thermal phenomena in SMA behavior	26
2.3 Numerical simulation	35
2.3 Validation	36
2.4 Conclusions	38
CHAPITRE 3	40
Introduction à l'article "Material Law for NITI Shape Memory Alloys Based on Dual Kriging Interpolation"	40
LOIS D'ÉTAT POUR LES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME APPROXIMÉES PAR LE KRIGEAGE DUAL.	41
3.1 Introduction	41
3.2 Experimental analysis	44
3.2.1 Presentation of the testing bench	44
3.2.2 Experimental procedure	45
3.3 Parametric modeling using three-dimensional kriging	47
3.4 Kriging results	50
3.4.1 Verification	50
3.4.2 Experimental validation of the main cycle interpolation	52
3.5 Conclusion	53
CONCLUSIONS	55
BIBLIOGRAPHIE	57

ANNEXES. 60

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 : Les courbes contraintes-déformations et contraintes-température pour différentes valeurs de la température	6
Figure 1.2 : Détermination de ϵ_α $\epsilon_{\alpha\beta}$ à partir de la trajectoire de décharge du premier ordre	13
Figure 1.3 : L'énergie libre en fonction d'une variable d'état	16
Figure 2.1 : Variation of mechanical energy during transition from ϵ_1 to ϵ_2	28
Figure 2.2 : Mechanical energy distribution	32
Figure 2.3 : Dissipation in a partial cycle	34
Figure 2.4 : Two types of functions describing the evolution of the physical properties in the material with respect to temperature	35
Figure 2.5 : Comparison between results obtained by finite elements and experimental data	37
Figure 3.1 : Assisted two-way SME test bench	45
Figure 3.2 : Cooling and heating partial cycles	46
Figure 3.3 : Main and partial thermal cycles obtained experimentally for three cases of loading: 53, 107 and 160 MPa	47
Figure 3.4 : A plane in the parameter space (ϵ_H , ϵ_C , σ) associated with a single surface in the space (ϵ , T , σ)	49
Figure 3.5 : Heating thermal cycles corresponding to an initial content of 40, 70 and 100% of martensite	51
Figure 3.6 : Experimental and calculated trajectories of partial thermal cycle obtained for a load of 53 Mpa	51
Figure 3.7 : Experimental isostress curves	52
Figure 3.8 : Comparison between calculated and experimental isothermal curves	52
Figure V.1 : Drift and covariance functions most frequently used in kriging	

approximation 77

Figure V.2 : Curvilinear surface described by a set of parametric coordinates (x, y) 79

LISTE DES ANNEXES

Annexe I :	Guide d'utilisateur du logiciel de simulation thermique	60
Annexe II :	Guide de programmeur du logiciel de simulation thermique .	69
Annexe III :	Données expérimentales utilisées dans les calculs numériques	73
Annexe IV:	Un exemple de programme de simulation utilisé par le logiciel de simulation thermique	74
Annexe V:	Parametrical kriging	76

INTRODUCTION

La conception et la réalisation d'une application industrielle utilisant les alliages à mémoire de forme demandent au préalable de simuler numériquement leur réponse pour bien optimiser les coûts de développement. La diversité des comportements de ce matériau ne permet pas d'utiliser directement les schémas de calcul thermodynamique existant déjà pour les métaux élasto-plastiques. La complexité des lois thermodynamiques se manifeste par plusieurs facteurs dont on doit tenir compte dans l'étude du transfert de chaleur dans les AMF. Il est important ainsi de construire un modèle de transfert thermique qui tienne compte de l'état mécanique du matériau.

Ce mémoire comporte deux articles sur la modélisation du comportement thermomécanique des AMF. L'étude bibliographique présentée dans le chapitre 1 a pour objectif de répertorier les phénomènes physiques importants ayant lieu pendant le transfert thermique dans les alliages à mémoire de forme. Ici, les différents modèles sont comparés dans le but de trouver celui qui est le mieux adapté à la simulation numérique. Cette expérience est finalisée dans le chapitre 2 sous la forme d'un article intitulé "Coupled Thermo-Mechanical Model for Shape Memory Alloys". Deux cas particuliers du comportement correspondant à deux sources de dissipation d'énergie possibles (énergie de transformation de phase et énergie mécanique interne) sont décrits.

Pour ce qui concerne la dissipation mécanique dans l'équation de transfert de chaleur, il est nécessaire de fournir les lois permettant d'obtenir l'état thermomécanique du matériau à chaque point du volume et à chaque instant donné. Les études présentées dans le chapitre 3 permettent de créer une loi analytique fondée seulement sur une série de simples mesures expérimentales. Cette étude est décrite dans le deuxième article intitulé "Material Law for NiTi Shape Memory Alloys Based on Dual Kriging Interpolation". A partir d'une série de courbes déformation-température à charge constante, deux surfaces sont construites dans l'espace contrainte-déformation-

température. Elles permettent de décrire le comportement du matériau dans les cycles principaux ainsi que dans les cycles partiels d'hystérésis.

Enfin, le dernier chapitre résume les contributions scientifiques de ce mémoire dans le domaine de la modélisation des AMF. Les hypothèses choisies dans les différents modèles développés dans ce mémoire sont discutées, ainsi que les perspectives qui orientent vers de nouvelles directions de recherche pour l'avenir. Les guides d'utilisateur et de programmeur du logiciel de calcul thermique fondé sur les études menées au chapitre 2 sont présentés respectivement dans les annexes I et V.

CHAPITRE 1

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE

1.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de donner les définitions de base du comportement thermodynamique des alliages à mémoire de forme (*AMF*), de résumer les études faites dans le domaine du couplage thermomécanique ainsi que d'élaborer les hypothèses générales qui nous permettent ensuite de construire un schéma numérique adapté à ce comportement.

1.1.1 Description générale du comportement mécanique des AMF

Avant de débiter la formulation du problème, il est nécessaire d'introduire quelques définitions, d'après TROCHU, BRAILOVSKI, VACHON, TERRIAULT (1997) concernant les AMF en particulier. Comme tous les autres milieux continus, les AMF sont généralement décrits par les déformations qu'ils subissent. Ainsi, nous allons distinguer deux sortes de comportements physiques de ces alliages :

1. Les petites déformations élastiques linéaires dont la nature physique est bien connue dans la mécanique des corps déformables.
2. Les grandes déformations nonlinéaires qui sont induites soit par une *transformation de phase* soit par un réarrangement de la structure granulaire de la phase en présence. Dans le premier cas il a une transition entre deux états thermodynamiques de base: la phase à haute température dite *austénite*, et la phase à basse température dite *martensite* ; le deuxième cas est caractérisé par un changement de la structure de la martensite présente dans le matériau.

a) Transformation de phase

Donnons les caractéristiques cristallographiques de chaque phase. Ainsi, dans chaque cristal il y a une transformation de phase entre l'état de structure cubique à faces centrées et l'état de structure cubique centrée ou tétragonale centrée, selon le type d'alliages. Au niveau macroscopique (ici, c'est le niveau dont l'échelle est supérieure à 10^{-6} mm) la première phase, austénite, reste homogène et isotrope, tandis que dans la phase martensitique, on distingue explicitement les arrangements cristallographiques spéciaux regroupés en forme de *plaquettes* allongées. Une série de plaquettes ayant la même orientation constitue une *variante* de martensite.

Par la suite, les déplacements qui ont lieu pendant la transformation entre ces deux phases sont tels qu'ils engendrent une déformation homogène de cisaillement sur une distance d'une variante de martensite, c'est-à-dire plus grande que la taille caractéristique de la maille cristalline. Ce qui signifie que cette transformation se passe en absence de modification de la composition chimique, puisque la phase mère et la phase issue de la transformation possèdent la même composition.

Notons que, comme chaque phase représente un état thermodynamique stable du matériau, la stabilité ne peut être rompue qu'en introduisant des énergies supplémentaires qui peuvent quand même être de différentes natures. Ainsi, la transformation de phase sera initiée aussi bien par des sollicitations mécaniques que par des sollicitations thermiques.

b) Réarrangement de la structure martensitique

Dans ce cas, les déformations nonlinéaires sont dues au réarrangement des plaquettes dans chaque variante de martensite. En effet, initialement les variantes sont dans la position auto-accommodante, c'est-à-dire que les plaquettes sont orientées de façon à ce

que l'énergie potentielle totale atteigne son minimum et que la contrainte totale macroscopique soit nulle. Ensuite, soumises à une sollicitation mécanique, les variantes s'orientent dans la direction de l'axe de la force appliquée. La déformation qui accompagne l'allongement des variantes est généralement de l'ordre de 5-6%.

Le comportement d'un AMF décrit par le diagramme contrainte-déformation-température est généralement classifié sous trois volets principaux : la superélasticité, l'effet mémoire de forme et l'effet mémoire double-sens.

A titre d'illustration schématique de ces trois phénomènes, les courbes typiques contraintes-déformations en fonction de la température sont présentées dans la Figure 1.1. On voit que le caractère de ces relations se modifie considérablement quand la température d'essai surpasse les températures caractéristiques du matériau :

M_S : début de la transformation martensitique (martensite – austénite)

M_F : fin de la transformation martensitique

A_S : début de la transformation inverse pendant le chauffage

A_F : fin de la transformation inverse.

1.1.2 Superélasticité

Pour les températures au-dessus de A_F , le comportement du matériau est toujours relatif à la transformation de phase. En effet, pour cette gamme de températures, quand le corps est libre de charge, le matériau ne contient que de l'austenite. Le fait d'appliquer une charge suffisamment élevée crée des instabilités de l'état thermodynamique existant et provoque l'apparition de zones de martensite. Dans les Figure 1.1 (c,d) cette transformation est décrite par les paliers de transition qui s'allongent jusqu'à 5-6% de déformation. A la fin de cette transformation, le matériau ne contient que de la

martensite induite par la charge. Néanmoins, cet état thermodynamique de martensite est instable en l'absence d'énergie mécanique et lorsqu'on effectue la décharge totale, la déformation inélastique se récupère à travers une hystérésis par la transformation inverse (martensite – austénite). Ce phénomène peut être expliqué par le fait que pour une température supérieure à A_F , la phase de martensite en absence d'effort est instable.

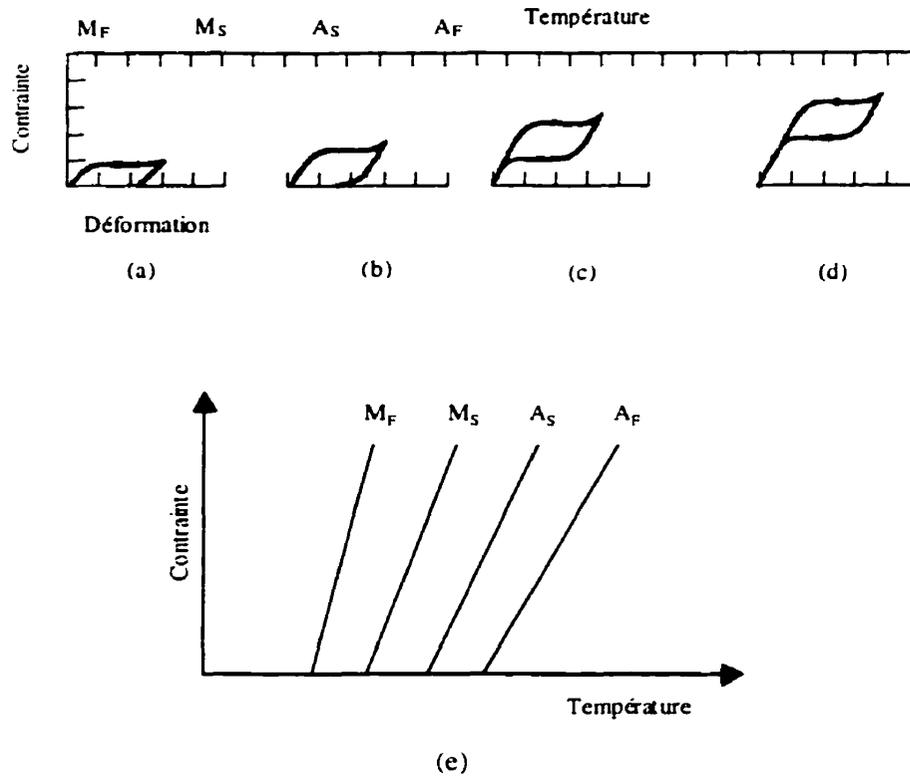


Figure 1.1: Les courbes contrainte-déformation et contrainte-température pour différentes valeurs de la température.

1.1.3 Effet mémoire de forme

Si la température initiale de l'échantillon est inférieure à M_S , le matériau n'est composé que de martensite auto-accommodante. Etant chargées, les variantes de martensite se réorientent dans la direction du chargement et les déformations ainsi produites peuvent

atteindre 5-6%. La différence entre ce comportement et la superélasticité est dans le fait que, pour cette gamme de températures, la phase martensitique est toujours stable ; il y aura donc des grandes déformations résiduelles. C'est seulement le chauffage jusqu'à A_F qui permet de récupérer les grandes déformations. Cette dernière proposition est illustrée sur Figure 1.1 (a,b).

La brève revue donnée ci-dessus permet de voir la variété des comportements macroscopiques des AMF en fonction des trajectoires de chargement thermomécanique (dans l'espace déformation - contrainte - température).

1.1.4 Analogies avec le comportement plastique

Bien que les mécanismes physiques de plastification et de transformation martensitique soient complètement différents - le premier se base sur le mouvement des dislocations tandis que le deuxième est régi par la croissance ou la réorientation de variantes de martensite - il existe néanmoins une ressemblance dans les comportements mécaniques associés. En effet, dans les deux cas il existe :

- une déformation nonlinéaire inélastique (la loi d'écrouissage isotrope décrite dans la plasticité peut également décrire la branche ascendante de la transformation martensitique (SUN, HWANG, 1993)).
- une déformation résiduelle (la loi d'écrouissage cinématique décrite dans la plasticité peut décrire l'effet de mémoire de forme (SUN, HWANG, 1993)).

En outre, dans les deux cas, les déformations inélastiques évoluent sans changement significatif du volume du matériau.

1.2 Transfert de chaleur

Cette section présente une étude bibliographique relative aux aspects de modélisation du comportement thermomécanique des AMF. L'accent général sera mis sur le problème de transfert de chaleur dans les AMF, ce qui permettra de donner les principales orientations de la recherche sur ce sujet.

Présentons brièvement l'algorithme développé d'une manière plus détaillée par LEMAÎTRE, CHABOCHE en 1988 qui sert à obtenir une formulation complète du problème thermomécanique couplé:

1. choisir des variables d'état et leurs associées;
2. construire un potentiel thermodynamique;
3. établir les lois d'évolution des variables d'état et de l'énergie de dissipation;
4. déduire l'équation de transfert de chaleur.

Cette méthode porte le nom de méthode *d'état local* et exprime l'état thermodynamique d'un milieu matériel complètement défini en un point et à un instant donné. La solution ainsi obtenue peut être considérée comme une succession d'états d'équilibre. Ce concept apparaît bien justifié pour les problèmes quasi-statiques, c'est-à-dire ceux où le temps intervient uniquement par la présence des incréments de variables d'état.

1.2.1 Choix des variables d'état et de leurs associées

Par définition, les variables d'état sont des paramètres indépendants entre eux qui permettent de reconstruire l'état thermomécanique du matériau à chaque moment et en chaque point du milieu. Comme pour les autres matériaux, la simplicité de la modélisation des alliages à mémoire de forme dépend nécessairement du choix des variables. Enumérons les exigences qui doivent être considérées lors de la sélection de

ces variables afin d'établir des critères objectifs pour comparer les différentes approches :

1. l'universalité, autrement dit la possibilité d'appliquer les variables indépendamment du comportement de matériau (la superélasticité, l'effet de mémoire de forme, la transformation initiée uniquement par la température etc...);
2. l'efficacité numérique, c'est-à-dire l'utilisation de paramètres qui performant au sein d'algorithmes numériques. En pratique, il est donc préférable de minimiser le nombre de variables d'état, ce qui rend parfois avantageux l'utilisation de paramètres macroscopiques.

Par la suite, pour chaque variable d'état, il existe une variable associée. Par exemple, la variable associée à la contrainte serait la déformation.

1.2.2 Variables microscopiques

L'approche microstructurale repose sur l'hypothèse selon laquelle le milieu continu est discrétisé sur un nombre fini des volumes représentatifs contenant des variantes de martensite (généralement de l'ordre de 10^{-6} mm³, LIKHACHEV, MALININ, 1993). Dans ce cas, toutes les variables macroscopiques sont reconstruites par la procédure d'homogénéisation à partir des variables microscopiques. Les lois de comportement dans l'approche microscopique sont donc formulées à partir des données expérimentales microscopiques et ensuite généralisées pour chaque point du volume total.

La fraction volumique de martensite en présence dans un AMF est en général une variable du type microscopique. Dans une variante de martensite elle exprime le rapport entre le volume qui a déjà subi la transformation martensitique et le volume total.

La variable associée avec le taux de phase transformée possède un sens physique explicite. En effet, elle représente la force motrice qui provoque la croissance des variantes de martensite. Dans le cas de la superélasticité, il s'agit de la différence entre les énergies internes spécifiques des phases austénitique et martensitique, tandis que dans le cas de l'effet de mémoire de forme, cette variable duale désigne le changement de l'énergie interne spécifique dû au réarrangement des plaquettes de martensite.

GOO, LEXCELLENT en 1997, LEXCELLENT en 1994 et LEXCELLENT, BOURBON en 1996 ont développé une approche fondée sur l'évolution de la fraction volumique microscopique qui leur permet de résoudre le problème thermomécanique couplé. Pour décrire le comportement des AMF au niveau microscopique, les auteurs utilisent une fraction volumique de chaque variante de martensite f_i ($i = 1, \dots, N$) où N est le nombre total de variantes ; f_i est défini comme $f_i = V_i/V$, où V_i est le volume de la $i^{\text{ème}}$ variante et V est le volume total d'un élément représentatif. Ainsi, pour une variante placée dans une matrice infinie V , toutes les solutions obtenues dans un domaine infini (par exemple, la solution d'Eshelby pour une inclusion ellipsoïdale) peuvent être appliquées. Dans ce cas, l'énergie mécanique récupérée dans une variante de martensite joue le rôle d'une variable associée qui permet de déduire la quantité totale d'énergie due à la transformation martensitique dans tout le volume.

Le nouveauté de cette méthode consiste à tenir compte non seulement de la transformation martensitique mais aussi de la réorientation de la martensite. Dans ce dernier cas, les auteurs introduisent des variables supplémentaires $df_{i,j}$ qui représentent le taux de martensite réorienté de la $i^{\text{ème}}$ à la $j^{\text{ème}}$ variante ($i \neq j$). Il permet maintenant - en s'appuyant toujours sur le même concept de la fraction volumique - de reproduire aussi bien le comportement superélastique que l'effet mémoire de forme. Le prix de cette innovation est un grand nombre d'inconnues et, par la suite, la complexité du

problème en général. Notons que les auteurs ont validé leur modèle sur l'exemple d'une seule variante de martensite formée dans un monocristal.

Bien que l'utilisation de taux microscopiques de martensite comme variables d'état augmente la précision du modèle, on ne peut utiliser cette approche que pour un nombre très restreint de problèmes. En effet, le bénéfice apporté par l'introduction de plusieurs variantes de martensite sera complètement absorbé par la complexité des calculs numériques. Il nous semble donc préférable de choisir des variables d'état de nature macroscopique.

1.2.3 Variables macroscopiques

Il existe plusieurs méthodes d'homogénéisation des variables microscopiques qui peuvent être regroupées en deux classes : discrètes ou continues. Dans le cas discret, on considère un matériau possédant un nombre fini de cristaux tandis que dans le cas continu, on pose une distribution stochastique de l'orientation, cf. LAGOUDAS, BO, QUIDWAI (1997). Dans les deux cas, on utilise les paramètres microscopiques pour calculer une déformation inélastique macroscopique.

Ainsi, dans les travaux de LIKHACHEV, MALININ publiés en 1993, les auteurs débutent leur formulation selon une approche purement physique mais ils effectuent le passage au niveau macroscopique en créant deux variables macroscopiques internes qui peuvent être assimilées à des déformations inélastiques. La première déformation inélastique est destinée uniquement au comportement à basse température. Il s'agit d'une déformation de maillage qui dépend de la loi contrainte-déformation isotherme. La deuxième est une déformation de changement de phase qui est proportionnelle à la fraction volumique macroscopique. Cette approche regroupe en une seule formulation un volet microstructural (en ce qui concerne la phase de martensite) et un volet phénoménologique, ce qui permet de simplifier le système, d'alléger les équations à

résoudre et par conséquent, de traiter des problèmes plus complexes. De plus, les contraintes et les déformations sont considérées comme des variables duales. Ainsi, leur produit correspond à l'énergie interne accumulée dans le matériau.

1.2.4 Modélisation des cycles partiels

Les variables décrites ci-dessus sont nécessaires mais pas suffisantes pour modéliser le comportement dans des cycles partiels. La solution est d'introduire les paramètres mécaniques supplémentaires qui permettent de déterminer d'une façon unique l'état thermomécanique du matériau aussi bien sur le cycle principal que sur un cycle partiel quelconque.

Méthode différentielle

AMENGUAL, LIKHACHEV, CESARI ont proposé en 1996 un modèle d'équation différentielle qui donne des résultats assez précis au moins dans le cas des cycles partiels du premier ordre. La modélisation se base sur l'expression de la température en fonction du taux de martensite. Les auteurs introduisent une nouvelle variable d'état: la variation de taux de martensite par rapport à la température; elle correspond à la pente des courbes de cycles partiels.

Les valeurs initiales de cette variable sont données d'une telle façon que les cycles partiels dans leurs extrémités sont soit tangents soit parallèles aux cycles principaux. Par exemple, pour les branches ascendantes de cycles partiels, sur la partie descendante de la boucle d'hystérésis (chauffage) cette variable est égale à la pente de la tangente, tandis que sur la partie ascendante (refroidissement) elle est nulle.

La valeur de la pente d'un cycle partiel dans tous les points à l'intérieur de la boucle d'hystérésis est calculée comme une combinaison linéaire de ces valeurs sur les deux extrémités. Le dernier pas consiste à réécrire cette dernière expression en fonction du taux de martensite et de la température. Cette procédure fait apparaître une équation différentielle du premier ordre, qui notamment donne le nom à cette méthode.

Méthode intégrale

Une autre méthode basée sur le modèle de Preisach a été proposée en 1991 par ORTIN. Les diagrammes contrainte-déformation ont été utilisés et la déformation dans un cycle partiel se représente sous forme de l'intégrale définie :

$$\varepsilon(t) = \iint_{S^+(t)} \frac{\partial^2 (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha\beta})}{\partial \alpha \partial \beta} d\alpha d\beta \quad (1.1)$$

où t signifie le temps, $S^+(t)$ est le triangle curviligne $\alpha \geq \beta$. La fonction sous l'intégrale se détermine d'une façon unique à partir d'une série de courbes de décharge du premier ordre, voir dans la Figure 1.2.

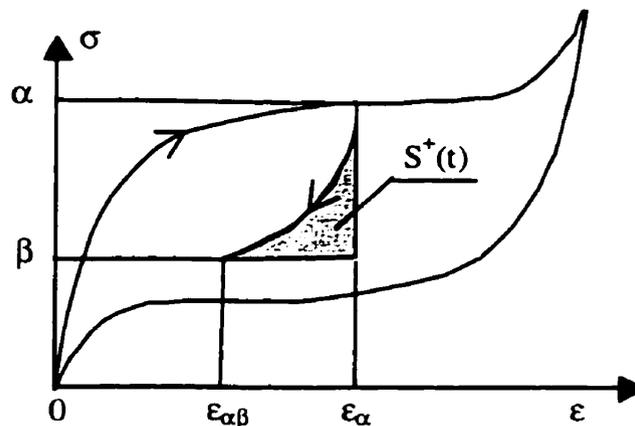


Figure 1.2 : Détermination de ε_α et $\varepsilon_{\alpha\beta}$ à partir de la trajectoire de décharge du premier ordre.

Du point de vue mécanique, chaque état à l'intérieur de la boucle d'hystérésis se représente uniquement par un niveau de contrainte déjà atteint (point de retour α) et une énergie correspondant à l'aire du triangle $S^*(t)$ sur la Figure 1.2.

1.2.5 Mouvements de dislocations et effet de fatigue

La situation devient plus complexe lorsqu'on cherche à considérer l'influence des défauts dans le matériau, notamment l'influence des rassemblements de dislocations sur le maclage. Il devient alors nécessaire de mettre en valeur des aspects de la déformation plastique. Ainsi, pour tenir compte de la fatigue du matériau, la liste de variables d'état doit inclure deux tenseurs de déformation plastique et deux quantités volumiques de la matière plastifiée (un tenseur de déformation et une proportion volumique pour chaque phase en présence) comme le proposent PATOOR et al. (1995, 1992). Une autre solution suggérée en 1996 par LEXCELLENT et BOURBON consiste à diviser le taux de martensite en trois contributions : une martensite auto-accommodante, une martensite orientée pour décrire le comportement athermique, et une martensite résiduelle instantanée, pour représenter des effets cycliques. Cette dernière d'une façon exacte est une fraction volumique de martensite qui pourrait être atteinte au moment t lorsque la charge se réduit instantanément à zéro et la température reste constante.

1.2.6 Variation du volume

L'hypothèse adoptée pour le comportement microscopique des AMF est dans le fait que le maclage qui est la base de la transformation martensitique évolue sans diffusion ni glissement de dislocations (WASILEWSKI, 1970). Il nous semble donc naturel de ne pas tenir compte du changement de volume, compte tenu de son effet négligeable pour

créer des variantes de martensite. En effet, comme en plasticité, les contraintes hydrostatiques génèrent très peu de maclage. Néanmoins, certains auteurs prennent en considération ce phénomène, cf. ORTÍN et PLANES, 1991.

1.3 Construction d'un potentiel thermodynamique

Cette section est consacrée aux principes généraux de construction du potentiel thermodynamique dont le concept fut introduit par Green dans ses ouvrages de 1834-41. L'existence d'un tel potentiel est essentiellement reliée à la capacité des matériaux élastiques à accumuler le travail de forces externes pendant le chargement et à le restituer pendant le déchargement. Il représente l'énergie libre dans le cas isotherme et l'énergie interne dans le cas adiabatique et dépend des variables d'état recensées ci-dessus.

L'aspect positif de l'utilisation du potentiel thermodynamique provient du fait que le problème de sa minimisation par rapport à certaines variables d'état est équivalent, dans les cas simples, à la résolution d'équations différentielles de thermodynamique. Donc le fait d'inclure ces fonctions dans le modèle complexe nonlinéaire permet de tenir compte dès le début du comportement linéaire du matériau. Dans ce cas les équations finales décriront seulement le comportement nonlinéaire. Le choix de la forme du potentiel dépend du type des variables d'état.

Puisque la variation des paramètres d'état produit une variation élémentaire de l'énergie interne, il est possible d'introduire des termes additionnels d'énergie potentielle afin de fixer l'origine absolue de chaque variable. Cette idée sera développée en particulier pour chaque variable d'état.

Ainsi dans la paire déformation-contrainte, la dépendance entre les deux variables est définie à une fonction linéaire près (partie élastique) ce qui permet de déplacer l'origine

de l'énergie potentielle dans un état thermodynamique où le matériau possède déjà une certaine énergie élastique. Pour ce but, on utilise une fonction énergétique H appelée l'enthalpie :

$$H = U + \varepsilon : \sigma \quad (1.2)$$

où U est l'énergie interne de matériau, ε est un tenseur de deuxième ordre de déformation, σ est un tenseur de deuxième ordre de contrainte. Ici les deux tenseurs sont des variables macroscopiques. Physiquement, l'enthalpie présente l'énergie potentielle où le travail des contraintes internes est inclus. Proprement dit, l'énergie potentielle est égale à la quantité de chaleur reçue par le système quand la charge reste constante et qu'il n'y a aucune dissipation.

De la même façon dans la solution du problème thermique, l'entropie résultante est trouvée à une constante près, on fixe donc l'origine de l'énergie interne U dans l'espace température T - entropie s en introduisant une énergie libre Ψ :

$$\Psi = U - T \cdot s \quad (1.3)$$

On peut également prendre la combinaison de ces deux énergies, dite enthalpie libre ou potentiel de Gibbs :

$$G = U - T \cdot s + \varepsilon : \sigma \quad (1.4)$$

A titre d'exemple, pour trouver la composition chimique d'un milieu nonhomogène dans le cadre du comportement isothermique, il suffit de minimiser le potentiel de Gibbs par rapport aux fractions volumiques de phases en présence.

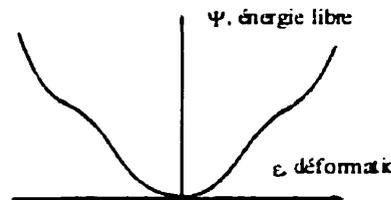


Figure 1.3 : L'énergie libre en fonction d'une variable d'état

Par ailleurs, il est nécessaire d'avoir un critère assurant la minimisation locale des potentiels d'énergie à chaque point d'extremum, c'est-à-dire la position d'équilibre obtenue à chaque point et à chaque instant doit être stable. Cette condition est satisfaite quand les deuxièmes dérivées de la fonction de Green (1.3) sont supérieures ou égales à zéro au voisinage du point d'extremum considéré, ce qui représente le cas de la transformation de phase étant donnée la forme monotone de la courbe de l'énergie libre (la partie convexe correspond à la transformation de phase). En considérant le comportement physique des AMF, MÜLLER et HUIBIN stipulent en 1991 que l'énergie de Gibbs doit avoir deux minimums locaux en fonction des variables d'état qui représentent respectivement une phase de martensite et une phase d'austénite présentes dans le matériau.

En introduisant le potentiel thermodynamique, on cherche à obtenir des lois d'état, c'est-à-dire des relations entre les variables d'état et leurs associées duales. Ces lois proviennent toujours des données expérimentales, d'où l'avantage de considérer des variables de nature explicite : contraintes, déformations et température.

L'approche commune exploitée par ENTERMEYER et al. (1995) et PATOOR et al. (1995) consiste à exprimer l'énergie potentielle totale comme étant la somme de trois contributions distinctes. A chaque contribution est associé un des trois types de déformations suivantes : élastique linéaire, nonlinéaire et thermique. La principale difficulté, qui est également la principale différence entre divers modèles, réside dans la manière d'exprimer l'énergie de transformation et d'interaction entre les phases à haute et à basse température.

D'après PATOOR et al. (1992), la partie nonlinéaire du potentiel est la somme de trois termes : une énergie libre chimique qui est proportionnelle au taux de martensite et au changement de la température, une énergie libre d'interface entre les deux phases en

présence, une énergie bloquée créée par le champ de déformation de transformation qui, entre autres, exprime la présence des contraintes microscopiques résiduelles.

1.4 Lois d'évolution des variables d'état et énergie de dissipation

Dans cette section, les travaux concernant le bilan énergétique total d'un AMF sont présentés. L'accent est porté sur la dissipation d'énergie et les résultats obtenus peuvent servir de base pour les équations du transfert de chaleur.

Pour exprimer le taux d'énergie dissipée, l'inégalité de Clausius-Duhem est utilisée. En réalité, il s'agit d'une combinaison de deux principes thermodynamiques qui signifient globalement la condition d'admissibilité:

$$\sigma : \frac{d\varepsilon}{dt} - \rho \left(\frac{d\Psi}{dt} + s \frac{dT}{dt} \right) - q \cdot \frac{\text{grad} T}{T} \geq 0 \quad (1.5)$$

dont le premier terme est le travail des contraintes internes σ (tenseur de Piola-Kirchoff pour le cas le plus général, c'est-à-dire dans le cas nonlinéaire géométrique). Le second terme (Ψ représente le potentiel thermodynamique) décrit la dissipation mécanique qui s'annule pour les déformations élastiques réversibles. Enfin, le troisième terme est une dissipation thermique où q représente la diffusion de la chaleur. Selon la loi de Fourier le troisième terme est quadratique en fonction du flux de chaleur q . La loi d'évolution du flux de chaleur en fonction du gradient de température en est la conséquence immédiate:

$$q = -k \cdot \text{grad} T. \quad (1.6)$$

SUN et HWANG en 1993, ensuite GOO et LEXCELLENT en 1997 ont proposé que la variation du potentiel puisse être obtenue premièrement à partir des fractions volumiques de martensite créées lors de la transformation directe, et deuxièmement à partir des fractions volumiques de martensite réorientée par le réarrangement des

variantes. En posant la dilatation thermique négligeable, ils ont considéré deux sources de sollicitation dans l'équation de chaleur : l'énergie dissipée par la variation du taux de martensite et un terme proportionnel à cette variation, mais qui provient de la dépendance de l'énergie de transformation envers la température.

La dernière contribution correspond physiquement à la chaleur latente, c'est-à-dire à l'énergie qui est dégagée ou absorbée pendant les déformations isotropes. Le modèle a été utilisé pour calculer le comportement pseudoélastique d'éducation thermique avec une charge uniaxiale en ne considérant qu'une seule variante d'un monocristal de CuZnAl.

LEO et al. (1993), ainsi que ABEYARATNE et al. (1994) ont étudié en profondeur le problème uniaxial découplé pour des fils en AMF subissant des chocs thermiques. Au lieu d'introduire les variables de taux de martensite, ils distinguent deux expressions possibles pour le potentiel selon la phase en présence et ils suivent l'évolution de l'interface entre les deux phases. La sollicitation dans l'équation du transfert de chaleur se présente uniquement sous forme de la chaleur latente.

L'autre voie développée dans les travaux d'ORTÍN et PLANES (1991) consiste à obtenir le taux de dissipation à partir de données expérimentales. Les considérations préliminaires sont les suivantes. La dissipation d'énergie dans le cas superélastique se produit par la récupération de l'énergie interne due à la transformation martensitique. Il est supposé qu'une partie de cette énergie se dissipe sous la forme d'ondes élastiques alors qu'une autre est transformée en entropie. Les conclusions les plus intéressantes sont suivantes :

1. la partie de la dissipation qui correspond à la production d'entropie est en fait négligeable;

2. la différence de chaleurs spécifiques entre les deux phases est non significative;
3. la dissipation d'énergie est la même indépendamment du sens de la transformation.

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons établi le schéma approximatif de la formulation du problème thermomécanique couplé. En étudiant différentes approches, leurs avantages, et leurs inconvénients, on peut déjà formuler une série d'hypothèses préliminaires qui seront la ligne principale pour les futurs travaux:

- le comportement du matériau est quasi-statique, c'est-à-dire que les variables d'état suffisent à décrire les lois de comportement, sans tenir compte des taux de changement de ces variables. L'autre conséquence de cette hypothèse va être la possibilité de décrire le comportement thermomécanique couplé comme l'interposition de deux comportements: mécanique isotherme et thermique sous une charge constante;
- toutes les variables d'état doivent être macroscopiques et leurs lois d'évolution doivent être établies à partir des données expérimentales;
- la variable qui décrit la variation de la fraction volumique de martensite joue un rôle intermédiaire et sera remplacé dans la formulation finale du problème par les variables macroscopiques;
- les données expérimentales relatives à la dissipation permettent de formuler l'équation de transfert de chaleur en se basant seulement sur les courbes de flux de chaleur-température, ainsi que celles de contrainte-déformation-température;

- le matériau est complètement stabilisé, ce qui signifie que l'évolution des lois d'état avec la température est négligeable. On ne tient compte ni de l'effet de la fatigue ni de la plastification du matériau.

CHAPITRE 2

MODÈLE THERMO-MÉCANIQUE COUPLÉ APPLIQUÉ POUR LES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME

Introduction à l'article "Coupled Thermo-Mechanical Model for Shape Memory Alloys"¹

Ce chapitre comporte un article sur la modélisation du comportement thermomécanique des AMF. En tenant compte des considérations faites dans le premier chapitre nous nous proposons ici de déduire l'équation du transfert de chaleur, basée sur deux principes généraux de thermodynamique. Nous décrivons également deux cas particuliers correspondants à deux sources de dissipation de chaleur possibles (transformation de phase et énergie mécanique interne). La formulation permet de remplacer les lois basées sur les variables de taux de martensite par celles de contrainte-déformation-température ce qui permet d'éviter de considérer toutes les variables internes du problème. Dans ce cas les lois thermodynamiques nécessaires sont obtenues à partir des essais de DSC et des essais de traction à température constante. Cette approche phénoménologique se montre bien adaptée pour le calcul numérique dont le modèle est validé en comparant les résultats numériques avec les données expérimentales.

¹ Article écrit en collaboration avec V. Brailovski et F. Trochu, soumis pour Symposium International sur Alliages à Mémoire de Forme : Théorie, Modélisation et Applications Industrielles, 38^{ième} Conférence Annuelle des Métallurgistes, Québec, 1999

COUPLED THERMO-MECHANICAL MODEL FOR SHAPE MEMORY ALLOYS

ABSTRACT

In the present work, a general coupled formulation on the thermomechanical behavior of shape memory alloys is presented. The heat transfer takes into account the sources of dissipation of mechanical nature (elastic dilatation of the material subjected to heating) and chemical origin (phase transformation). Information concerning the rheology laws of shape memory materials (strain-stress-temperature as well as specific heat-temperature curves) is taken from experimental data and approximated by dual kriging using a simple analytical function of strain, stress and temperature, which describes the thermomechanical behavior of the material for any partial loading and/or temperature cycle.

2.1 Introduction

The mechanical behavior of *Shape Memory Alloys* (SMA) deviates widely from that of usual metals. The thermomechanical state of a SMA specimen can be austenitic, martensitic or mixed depending on the values of *stress* σ and *temperature* T . The majority of existing thermomechanical models involves a set of *internal* variables hardly observable from experience. The present article provides an algorithm to solve by finite elements the non isothermal stress boundary value problem for shape memory materials using only external variables obtained directly from experimental data by means of dual kriging interpolation (see TERRIAULT, MEUNIER, TROCHU, 1997).

The following four-steps approach is considered in this article (see LEMAÎTRE, CHABOCHE, 1988):

1) The first step consists of choosing appropriate rheological state variables to describe the actual material behavior. The following must taken into account:

- It should be possible to describe with the same variables all kinds of material behavior associated with phase transformation (superelasticity, shape memory effect and thermal effects).
- Physical parameters should be considered in the numerical algorithms in order to minimize the total number of variables. Let us take, for example, one of the commonly employed internal variables, i. e., the amount of martensite per variant. Referring to GOO, LEXCELLENT, 1997, the use of this variable allows to increase the precision of the numerical response, but the handling of multiple variants may become rather complicated. Therefore, it is desirable to avoid this variable in the final formulation.

2) The second step consists of constructing a thermodynamical potential. The existence of such a function is in direct relation with the ability of the material to accumulate energy during loading and to restore it during unloading. It represents the free energy in the case of an isothermal process and the internal energy for an adiabatic process. Hence, it depends only on variables describing *reversible* processes.

As it has been shown by ENTERMEYER, PATOOR, EBERHARDT, BERVEILLER, 1995 and PATOOR, BENSALAH, EBERHARDT, BERVEILLER, 1995, that the thermodynamical potential includes three terms, each describing one of the three following phenomena: linear elasticity, phase transformation and thermal expansion.

3) The third step consists of establishing thermomechanical material laws, which describe the evolution of state variables and energy dissipation. Using the second principle of thermodynamics, one can obtain the following condition that governs the energy exchange: the difference between variation of the total mechanical energy and the potential energy variations should be always non-negative. This condition, called Clausius-Duhem inequality, allows to determine the rate of dissipated energy as well as to deduce the basic thermomechanical laws.

4) The final step consists of applying the heat transfer equation based on the heat balance between energies dissipated and generated in the phase transformation.

On the basis of this discussion, the following approach is adopted in order to describe the thermomechanical behavior of SMA:

- All rheological state variables are external and the evolution laws that govern their evaluation are established experimentally.

- The thermodynamical potential takes into consideration only reversible processes. Thus, it depends on the elastic strain ε^e , the temperature T and the amount of martensite f . The last variable, in turn, will be expressed through one of the external variables.
- The complex strain-stress-temperature behavior of SMA is modeled by a sequence of alternating mechanical dissipation and latent heat dissipation steps, that the temperature and strain terms are separated in the thermodynamical potential and the phase transformation parameter f can bear mechanical as well as thermal significance.

2.2 Thermal phenomena in SMA behavior

The first principle of thermodynamics written in variational form is adopted as a starting point (conservation of the internal energy in an elementary reference volume):

$$\int_{\Omega} \rho \, de \, d\Omega = \int_{\Omega} (\sigma : d\varepsilon) \, d\Omega + Q \quad (2.1)$$

In expression (2.1) the following variables are used: ρ denotes the material density, de is the elementary variation of the specific internal energy, ε and σ are respectively strain and stress tensors. In the case of SMA, the characteristic size of a representative microscopic volume Ω corresponds to the average size of the martensite plates ($\sim 6 \cdot 10^{-3}$, see LIKHACHEV, MALININ, 1993). It is supposed that within this representative volume, all internal parameters can be homogenized.

The first member in the right hand side of the equation (2.1) describes the mechanical energy corresponding to the internal stress state, while the second member represents a heat energy received or lost by the material because of internal r and external q thermal sources.

$$Q = \int_{\Omega} r \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} (q \cdot n) \, d\Gamma \quad (2.2)$$

According to the second principle of thermodynamics, the energy relative to entropy variations within any characteristic volume is always superior or equal to the amount of heat received by this volume:

$$\int_{\Omega} \rho \, ds \, d\Omega \geq \int_{\Omega} \frac{r}{T} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \frac{q \cdot n}{T} \, d\Gamma \quad (2.3)$$

where ds is the specific entropy variation. After application of the divergence theorem to the second term in the right part of the equation (2.3), we obtain the following inequality:

$$\int_{\Omega} \left(\rho \, ds - \frac{r}{T} + \frac{\nabla q}{T} \right) d\Omega \geq 0 \quad (2.4)$$

where T , r , q and s denote respectively temperature, intensity of the internal heat sources, external heat flow and specific entropy. As it was noticed above, each variable in this inequality can be averaged with respect to the characteristic reference volume, but for sake of simplicity we keep the same notation both for the microscopic and macroscopic variables.

Let us introduce the specific free energy $\psi = e - s T$. Using expressions (2.1) and (2.2), the inequality (2.4) takes the final form, named inequality of Clausius-Duhem:

$$\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \sigma : d\varepsilon - \rho [d\psi + s dT] - \frac{q \cdot \nabla T}{T} \geq 0 \quad (2.5)$$

This inequality means that the total dissipated energy within an elementary volume should always be non-negative at each moment of time and everywhere in the material. The first term in equation (2.5) denotes the internal mechanical energy accumulated during transition from the state ε_1 to the state ε_2 , as illustrated in Figure 2.1.

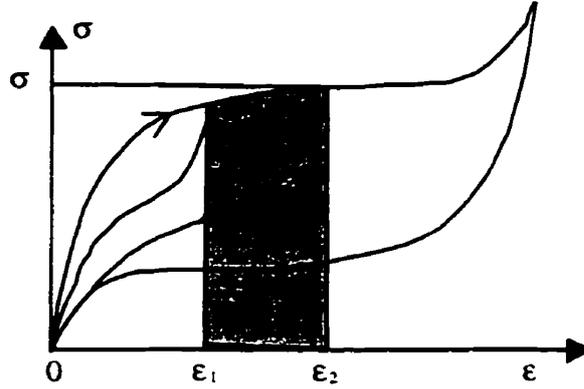


Figure 2.1: Variation of mechanical energy during transition from ε_1 to ε_2 .

If the strain in this formulation can be represented as the sum of two terms corresponding to the elastic and non elastic parts of $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^n$, the free energy can be rewritten in function of three rheological state variables:

$$\psi = \psi(\varepsilon^e, T, f) \quad (2.6)$$

Substituting the differential

$$d\psi = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} : d\varepsilon + \frac{\partial \psi}{\partial T} \cdot dT + \frac{\partial \psi}{\partial f} \cdot df \quad (2.7)$$

in Clausius-Duhem inequality (2.5) leads finally to:

$$\left(\sigma - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon^e} \right) : d\varepsilon^e + \sigma : d\varepsilon^n - \rho \left(s + \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \cdot dT - \rho \frac{\partial \psi}{\partial f} \cdot df - \frac{q \cdot \nabla T}{T} \geq 0 \quad (2.8)$$

The following hypotheses allow to reduce the number of terms in this inequality. Firstly, let us assume that the material undergoes only elastic deformations with a constant ($dT = 0$) and uniform ($\nabla T = 0$) temperature and that Clausius-Duhem inequality (2.8) should be verified whatever the value of ε^e . This implies that:

$$\sigma - \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon^e} = 0 \quad (2.9)$$

Then let us assume that only a thermal expansion strain is considered. Therefore we have: $d\varepsilon^m = 0$, $f = 0$, $\nabla T = 0$, which is satisfied if and only if the following equality is verified:

$$s + \frac{\partial \psi}{\partial T} = 0 \quad (2.10)$$

Since the thermodynamic potential depends only on state variables, the following relation can be introduced by analogy with equations (2.9) and (2.10):

$$\Pi^f(\varepsilon^e, T, f) = \frac{\partial \psi}{\partial f} \quad (2.11)$$

where Π^f defines the intensity of the phase transformation energy associated with the martensitic transformation rate. Hence, from (2.7) and (2.11), we obtain:

$$\rho d\psi = \sigma : d\varepsilon^e - \rho s \cdot dT + \rho \Pi^f \cdot df \quad (2.12)$$

Finally, Clausius-Duhem inequality takes the form:

$$\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \sigma_a : d\varepsilon^m - \rho \Pi^f \cdot df - \frac{q \cdot \nabla T}{T} \geq 0 \quad (2.13)$$

where combination of the first two terms describes the dissipation of mechanical energy occurring during phase transformation. The index "a" on the stress means that we are on the ascending branch of the hysteresis loop shown in Figure 2.1, while the third term expresses the thermal dissipation generated by the heat transfer.

Finally, based on the Clausius-Duhem inequality (2.13) the heat transfer equation that takes into account the phase transformation can be presented in the following way:

$$\begin{aligned} \nabla [K \cdot \nabla T] = & \rho C dT - \sigma_a : d\varepsilon^m + \\ & + \rho \Pi^f df - T \left(\frac{\partial \sigma_a}{\partial T} : d\varepsilon^e + \rho \frac{\partial \Pi^f}{\partial T} df \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

where K is the thermal conductivity tensor of the material, C is a specific energy corresponding respectively to austenitic and martensitic states. The dissipation terms in the heat transfer equation can be described separately in the following way:

- only phase transformation energy dissipation
- only mechanical energy dissipation
- coupled dissipation

Energy dissipation generated by phase transformation

When only the energy generated by phase transformation is taken into account, the following phenomena can be neglected:

- inelastic strain contribution
- thermomechanical coupling
- thermal conductivity variations

The heat transfer equation can be rewritten as follows:

$$\nabla [K \cdot \nabla T] = \rho C dT + \rho \Pi' df - T \left(\rho \frac{\partial \Pi'}{\partial T} df \right) \quad (2.15)$$

In this case, Clausius-Duhem inequality (2.13) takes a simplified form, i. e., it contains only one term corresponding to the dissipated energy generated by phase transformation.

$$\Pi'(f, T) \cdot df \geq 0 \quad (2.16)$$

This inequality should be verified for all df , which means that $\Pi'(f, T) = 0$.

Consequently, by assuming that the specific heat is constant

$$C = C_\epsilon = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_\epsilon \quad (2.17)$$

and that the term in (2.13) containing df vanishes, the equation of heat transfer (2.14) becomes

$$K \Delta T = \rho C_\epsilon dT - T \frac{\partial \Pi'}{\partial T} df - r \quad (2.18)$$

The second term in the right hand side of this equation represents the latent heat of phase transformation. It can be also written in terms of specific heat variations:

$$T \frac{\partial \Pi'}{\partial T} df = -\rho C(T) dT \quad (2.19)$$

The last expression seems to be advantageous because it allows to replace the use of internal variable of the martensite contents by experimental results obtained from differential calorimetry testing (DSC). Finally equation (2.18) may be rewritten in the following simplified way:

$$K \Delta T = \rho [C_e - C(T)] dT - r \quad (2.20)$$

Mechanical dissipation in the case of complete and partial superelasticity cycle

When only mechanical dissipation is considered, equation (2.14) can be rewritten as follows (thermal expansion term is neglected):

$$K \Delta T = \rho C dT - \int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \sigma_a : d\epsilon + \Pi' df - r \quad (2.21)$$

The mechanical energy dissipated in loading can be expressed by:

$$\int_{\epsilon_1}^{\epsilon_2} \sigma_a : d\epsilon = \int_0^{\epsilon_2} \sigma_a : d\epsilon - \int_0^{\epsilon_1} \sigma_a : d\epsilon \quad (2.22)$$

where the first two terms in the right hand side of equation (2.22) correspond respectively to the areas below the ascending curve of the main superelastic cycle (see Figure 2.2). The relationship representing mechanical energy during loading in a superelastic cycle can be expressed in terms of the shaded surfaces in Figure 2.2, where the total accumulated energy is given by:

$$\textcircled{3} + \textcircled{5} = [\textcircled{1} + \textcircled{2} + \textcircled{3} + \textcircled{4} + \textcircled{5}] - [\textcircled{1} + \textcircled{2} + \textcircled{4}] \quad (2.23)$$

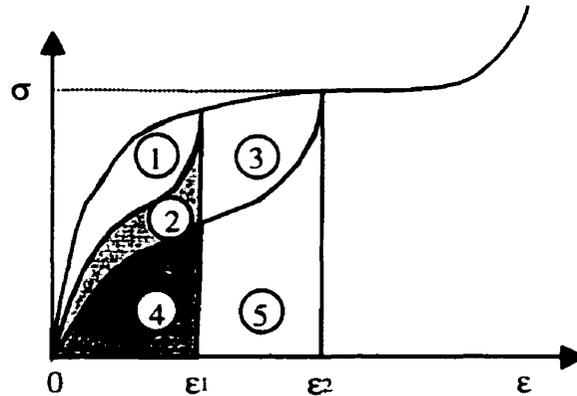


Figure 2.2: Mechanical energy distribution

If it is assumed that the phase transformation part of the thermodynamical potential is equal to the accumulated mechanical energy, one can write:

$$\Pi^f f = \int_{\varepsilon_{f=0}}^{\varepsilon} \sigma_d : d\varepsilon \quad (2.24)$$

where $\varepsilon_{f=0}$ designates the strain value at the starting point of phase transformation. This assumption is physically acceptable, since this quantity corresponds to the energy restored during unloading. In Figure 2.2, this energy corresponds to the area below the unloading branch. Indeed, according to (2.24), the energy recovered corresponding to the state $\varepsilon = \varepsilon_2$ is equal to the area covered by the surfaces 4 and 5, while for the state $\varepsilon = \varepsilon_1$, this energy is equal to the area covered by the surfaces 2 and 4. Therefore, the total restored energy is equal to:

$$[(4) + (5)] - [(2) + (4)] = (5) - (2) \quad (2.25)$$

Consequently, the total dissipated energy can be calculated by subtracting (2.25) from (2.23):

$$[(3) + (5)] - [(5) - (2)] = (3) + (2) \quad (2.26)$$

Physically this represents the surface covered by the descending branch changing from $\varepsilon = \varepsilon_1$ to $\varepsilon = \varepsilon_2$. This last expression allows us to establish an equivalent form of the heat transfer equation (2.21):

$$K \Delta T = \rho C dT - \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} (\sigma_a - \sigma_d) : d\varepsilon - r \quad (2.27)$$

where σ_a and σ_d denote the stresses corresponding to the ascending and descending branches of the hysteresis loop and $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$ is the strain variation. Equation (2.27) presents the following advantage over (2.21): the formulation of a problem does not contain internal parameter of martensite amount.

In addition, the hypothesis (2.24) allows to find the martensite fraction by using the same experimental data, because the energy corresponding to the transformation depends linearly on the martensite rate:

$$\Pi^f = \pi^f \cdot f \quad (2.28)$$

The coefficient of proportionality π^f can be obtained by assuming that the martensite rate varies from 0 to 1 during the phase transformation. Therefore, from expressions (2.24) and (2.28) we may write:

$$\pi^f \cdot f^2 = \int_{\varepsilon_{f=0}}^{\varepsilon} \sigma_d : d\varepsilon \quad (2.29)$$

and the quantity of martensite becomes:

$$f = \frac{\sqrt{\int_{\varepsilon_{f=0}}^{\varepsilon} \sigma_d : d\varepsilon}}{\sqrt{\int_{\varepsilon_{f=0}}^{\varepsilon_{f=1}} \sigma_d : d\varepsilon}} \quad (2.30)$$

If unloading in the case of a superelastic cycle does not create any mechanical dissipation, the energy in a partial cycle is equal to the surface area covered by the descending branch of the partial cycle when the strain changes from ε_1 to ε_2 . In Figure

2.3, this quantity is defined by surface 1. Assuming that the material is mechanically stabilized, the partial cycles can be approximated by means of volume kriging interpolation, (see TROCHU, SACEPE, VOLKOV, TURENNE, 1998).

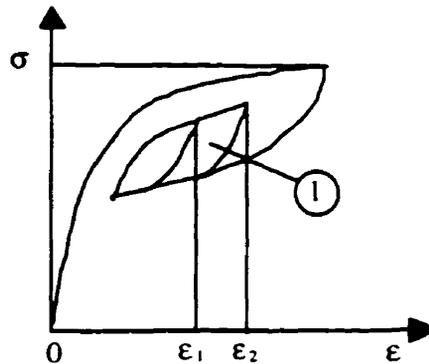


Figure 2.3: Dissipation in a partial cycle

Thermomechanical coupling

As it has been noticed above, the complex strain-stress-temperature behavior of SMA can be modeled in the heat transfer equation by a sequence of mechanical dissipation (2.27) and phase transformation dissipation (2.20). The coupling of these equations yields:

$$\nabla [K \cdot \nabla T] = \rho (C_p - C(T)) dT - \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} [(\sigma_a - \sigma_d) : d\varepsilon^m] - r \quad (2.31)$$

where the only difference from equation (2.27) is a term containing $C(T)$ which describes the evolution of strain-stress curves with respect to temperature. Physically, this represents the specific heat variation due to the phase transformation.

2.3 Numerical simulation

In this section, a partial validation of the proposed model will be done, considering only the thermal effects of the phase transformation. Neither the mechanical dissipation nor the latent heat created by the thermal dilatation in the material are taken into account. Such a behavior corresponds to the thermal response of a SMA specimen, which is free, or under constant mechanical loading.

Let the material be homogeneous on the macroscopic level. This condition implies that the coefficient of thermal conductivity K is constant in the body. In order to take into account the thermal conductivity and specific heat variations with respect to temperature, the following two types of evolution can be analyzed. The first type represents a monotonous function with nearly zero gradients. The second type includes functions with large gradients as shown in Figure 2.4.

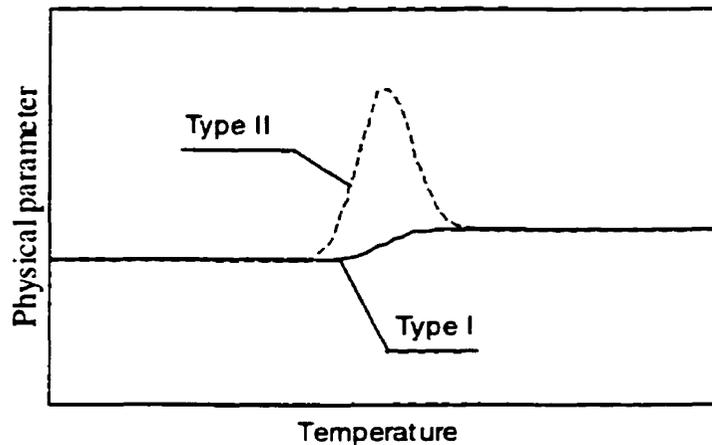


Figure 2.4: Two types of functions describing the evolution of the physical properties in the material with respect to temperature.

Solution based on a weak formulation of the problem

The parabolic heat transfer equation (2.31) contains two main terms: an elliptic operator and an operator that contains the first order derivative. Let us suppose that the solution is interpolated by shape functions ω' :

$$T(t, \bar{x}) = \sum_i T_i(t) \cdot \omega'(\bar{x}) \quad (2.32)$$

The problem consists of finding the amplitude functions $T_i(t)$ corresponding to such a basis.

Using expansion (2.32) in equation (2.21) and multiplying by the j^{th} shape function, the result for a certain representative volume Ω can be integrated as follows:

$$\sum_i T_i(t) \cdot K \int_{\Omega} \Delta \omega' \omega, d\Omega = \sum_i \dot{T}_i(t) \cdot \rho(C_e + C_{eff}(T)) \cdot \int_{\Omega} \omega' \omega, d\Omega - \int_{\Omega} r \omega, d\Omega \quad (2.33)$$

After applying the divergence theorem to the left-hand member, equation (2.33) takes the following form:

$$\sum_i T_i(t) \cdot K_{ij} = \sum_i \dot{T}_i(t) \cdot C_{ij} - F_i \quad (2.34)$$

and the numerical scheme taking into account the non-linearity of the coefficients K_{ij} and C_{ij} becomes:

$$\sum_i \frac{(T_i^{n+1} - T_i^n)}{\Delta t} \cdot C_{ij}^n(T_i^n) = \theta \cdot \sum_i T_i^{n+1} K_{ij}^{n+1} + (1-\theta) \cdot \sum_i T_i^n K_{ij}^n + \theta \cdot F_i^{n+1} + (1-\theta) \cdot F_i^n \quad (2.35)$$

where $\theta=1$ ensures the unconditional stability of the scheme, even if coefficients of C_{ij}^n or F_i^n are functions of type II, (refer to Figure 2.4).

2.4 Validation

An example of heat transfer simulation is validated by experimental data, obtained in BRAILOVSKI, TROCHU, DAIGNEAULT, 1996. Consider a straight shape memory wire immersed in an arbitrary medium and assume that there are two internal heat

sources or sink in the wire: an electrical current and the latent heat of phase transformation. The intensity of the heat sources generated by Joule effect is equal to:

$$r = \frac{i^2 \cdot R}{A^2} \quad (2.36)$$

where i denotes the intensity of the electrical current, R is the material resistance and A is the section area. The variations of the latent heat are approximated from differential scanning calorimetry (DSC) data by means of dual kriging interpolation, (see TROCHU, SACEPE, VOLKOV, TURENNE, 1998). Note that the electrical resistance R is a variable of type I, while specific heat C is of type II (Figure 2.4). Thus the numerical scheme should take into account the latent heat absorption and dissipation during phase transformation. A minor numerical problem consists of optimizing the time increment in order to make a balance between calculation time and precision where the latent heat is highly non-linear with respect to temperature. Indeed, if the time increment is not sufficiently small, latent heat becomes dominant in front of the energy released by the Joule effect, which destabilize the calculation process.

Figure 2.5 presents the comparison between the numerical solution and experimental data. The difference appearing during phase transformation is caused by the approximation of the DSC curve.

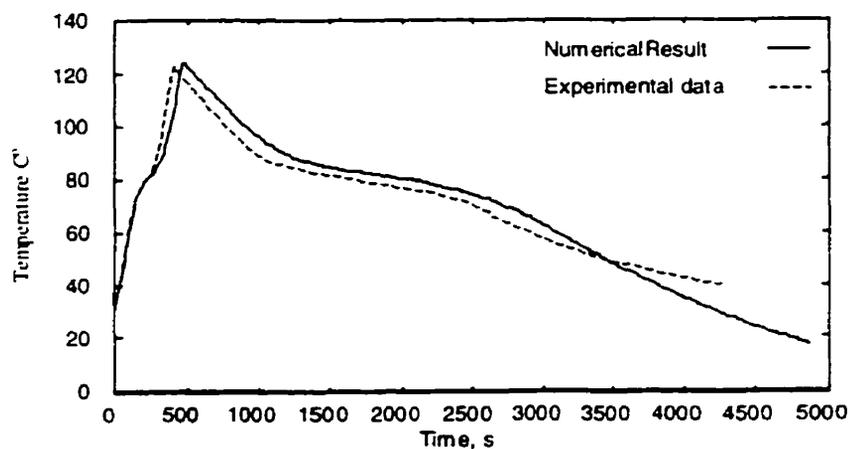


Figure 2.5: Comparison between results obtained by finite elements and experimental data.

2.5 Conclusion

In this article, the coupled thermomechanical model that takes into account the mechanical as well as well thermal dissipation phenomena related to SMA is presented. It is shown that thermomechanical behavior of SMA in case of superelastic cycles can be effectively modeled using only external macroscopic variables. The numerical results obtained are directly influenced by the accuracy of the experimental procedure and can be valid only for a completely stabilized shape memory material.

REFERENCES

BRAILOVSKI, V., TROCHU, F., DAIGNEAULT, G., 1996.

Temporal characteristics of shape memory linear actuators and their application to circuit breakers. *Materials & Design*. Vol. 17, No. 3, p. 151-158.

ENTERMEYER, D., PATOOR, E., EBERHARDT, A., BERVEILLER, M., 1995.

Micromechanical modeling of the superthermoelastic behavior of materials undergoing thermoelastic phase transformation. *Journal de Physique IV*, vol. 5, décembre.

GOO, B.C., LEXCELLENT, C., 1997.

Micromechanics-based modeling of two-way memory effects of a single crystalline shape-memory alloy. *Acta mater*. Vol. 45, no.2, pp. 727-737.

LEMAITRE, J., CHABOCHE, J.-L., 1988.

Mécanique des matériaux solides. Dunod, chap. 2, pp. 40-70.

LIKHACHEV, V.A., MALININ, V.G., 1993.

Structure-analytical theory of strength, St.-Peterbourg, Nauka.

PATOOR, E., BENSALAH, M.O., EBERHARDT, A., BERLEILLER, M., 1992.

Détermination du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme par optimisation d'un potentiel thermodynamique. Revue de Métallurgie, novembre.

TERRIAULT, P., MEUNIER, M.-A., TROCHU, F., 1997.

Application of dual kriging to the construction of a general phenomenological material law for shape memory alloys. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 8(7), 553-630.

TROCHU, F., SACEPE, N., VOLKOV, O., TURENNE, S., 1998.

Characterization of TiNi shape memory alloys using dual kriging interpolation. International Conference on Martensitic Transformation ICOMAT'98, Material Science & Engineering A.

CHAPITRE 3

APPROXIMATION PAR KRIGEAGE DUAL DE LOIS D'ÉTAT POUR LES ALLIAGES À MÉMOIRE DE FORME

Introduction à l'article "Material Law for NiTi Shape Memory Alloys Based on Dual Kriging Interpolation"^{2, 3}

Ce chapitre comporte un article sur la modélisation des lois de comportement thermo-mécanique des AMF. Le développement d'une loi constitutive générale est la première étape importante avant que des calculs fiables de conception des applications des alliages à mémoire de forme puissent être effectués. Cet article présente une nouvelle loi constitutive phénoménologique fondée sur le krigeage dual, qui est un outil mathématique puissant utilisé ici comme méthode d'interpolation pour simuler le comportement macroscopique des alliages à mémoire de forme. A partir d'une série de courbes expérimentales déformation-température données à charge constante, deux surfaces sont construites dans l'espace contrainte-déformation-température. Elles permettent de décrire le comportement général du matériau. La réponse d'un spécimen soumis à un chargement thermomécanique complexe peut être calculée par krigeage dual partout à l'intérieur du domaine d'hystérésis délimité par les surfaces principales de refroidissement et de chauffage. Cette approche présente l'avantage de fournir immédiatement l'équation explicite de n'importe quel cycle partiel à l'intérieur du cycle thermique principal et par la suite, de construire une loi de comportement générale pour des alliages à mémoire de forme. Les validations préliminaires pour une série d'exemples simples démontrent le potentiel de cette nouvelle approche.

² L'article écrit en collaboration avec V. Brailovski, N. Sacépé, P. Terriault and F. Trochu, soumis pour Journal of the Mechanical Behavior of Material, mars, 1999

³ Voir ci-joint l'Annexe V intitulée "Parametrical Kriging"

MATERIAL LAW FOR NITI SHAPE MEMORY ALLOYS BASED ON DUAL KRIGING INTERPOLATION

ABSTRACT

A large number of industrial applications could benefit from the remarkable properties of shape memory alloys. The development of a general material law is the first important step before reliable design calculations of shape memory devices can be carried out. This paper presents a new phenomenological constitutive law based on dual kriging, which is a powerful mathematical tool used here as an interpolation method to simulate the macroscopic behavior of shape memory alloys. From a set of experimental strain-temperature curves given at constant loads, two surfaces are constructed in the stress, strain and temperature space which describe the cooling and heating behavior of the material at any stress. The response of a specimen subjected to complex thermomechanical loadings can then be calculated by dual kriging, using a general three-dimensional parametric solid model of the hysteretic domain delimited by the main cooling and heating surfaces. This approach presents the advantage of yielding immediately the explicit equation of any partial cycle inside the main hysteretic thermal cycle, thus allowing to construct a general material law for shape memory alloys. Preliminary validations for a set of simple examples demonstrate the potential of this new approach.

3.1 Introduction

The mechanical behavior of *Shape Memory Alloys* (SMA) deviates widely from that of usual metals. The thermomechanical state of the material can be austenitic, martensitic or mixed depending on the values of *stress* σ and *temperature* T . The observed responses of strain in function of stress $\varepsilon(\sigma)$ and of strain in function of temperature $\varepsilon(T)$

cover various types of behavior which may be divided into three main groups: superelasticity, pseudo-plasticity and shape memory effect (SME).

Each of these remarkable properties of SMA may be characterized by a specific thermomechanical test. The stress-strain curve at constant temperature illustrates well superelasticity and pseudo-plasticity, whereas the strain-temperature diagram obtained in stress-free state or under constant load usually describes the one-way or assisted two-way shape memory effects. Therefore, three important physical parameters interact in the description of SMA: stress, strain and temperature. These variables define a general three-dimensional physical space, in which the complex mechanical behavior of the material could be described. In this article, a new phenomenological model capable of describing in a single formulation superelasticity and shape memory effect is presented. This study breaks up into two parts.

Firstly, we describe how the experimental data related to the behavior of alloy are obtained. For this purpose, a special test bench was constructed to measure strain recovery with temperature. This experimental set-up makes possible to analyze the assisted two-way shape memory effect by heating a specimen subjected to constant load. Two types of experimental cycles are studied: (a) a *main thermal cycle* consisting of heating and cooling the specimen through the zone of phase transformation, so that the material passes from full martensitic state to pure austenite, and conversely; (b) a *partial thermal cycle* consisting of incomplete phase transformations when two phases coexist in the material. The partial cycle belongs to the space delimited by the hysteresis of the main cycle.

Secondly, the experimental data supplied by thermal cycles are interpolated using a new technique called *dual kriging* /1/. In fact, three-dimensional volume parametric kriging /2/ is used here instead of surface parametric kriging /3/ to simulate the behavior of SMA specimens under various thermomechanical loadings.

The existing phenomenological models describing martensitic transformation can be regrouped in two main families:

- 1) Models that use the martensite volume fraction as unique transition parameter that controls the phase transformation. – For example, Amengal *et al.* /4/ use a differential equation based on the fact that the slopes of all higher order partial paths are supposed to be the same as that of first order partial cycles. It is proved that this model describes correctly first order partial cycles for fixed values of stress.
- 2) Models based on a parametrical description of the SMA hysteresis. – For example, Ortín /5/,/6/ proposed to use the Preisach hysteretic model. The strain is given as a function of two stress history parameters that are necessary to attain the actual state on a partial cycle curve, where the function is constructed from a set of experimental data. This approach generates stress-strain trajectories for any given temperature, but the precision of this approximation has been validated only for first order partial cycles.

Another model based on two-dimensional surface kriging was proposed by Terriault *et al.* /3/. This phenomenological constitutive law simulates the material behavior of the principal hysteresis cycles and embedded partial cycles of any order in the three-dimensional stress-strain-temperature space. In the present work, a similar technique is used to create the material model, but it is more general in the sense that thermomechanical response of the material for any stress, strain or temperature increment is calculated by three-dimensional volume kriging instead of two-dimensional parametric kriging. This approach leads to an easier determination of imbedded partial cycles compared to the model of

Terriault et al. /3/ in which a new set of loading or unloading subsurfaces must be constructed for each level of imbedded partial cycles.

Finally, note that the present article represents an extension for the work of Trochu et al. /8/ in the sense that it gives more detailed explanations on three-dimensional parametric kriging as well as a validation of this approach for a simple set of data.

3.2 Experimental analysis

This section presents the experimental set-up and the procedure followed to obtain typical strain recovery curves in function of temperature.

3.2.1 Presentation of the testing bench

The testing bench represented in Figure 3.1 is designed to subject a SMA wire or ribbon to heating and cooling cycles under constant load. The specimen is heated by an electrical current of given intensity (Joule effect), while the sample is cooled by convection. A linear variable differential transformer (LVDT) records the variations in length variations of the specimen, and the temperature is measured by a thermocouple fixed directly on the sample. The experimental data are recorded and treated by a specific acquisition system. The testing bench allows to control also the minimum and maximum temperatures of the specimen, so that it is possible to realize partial transformations of the alloy.

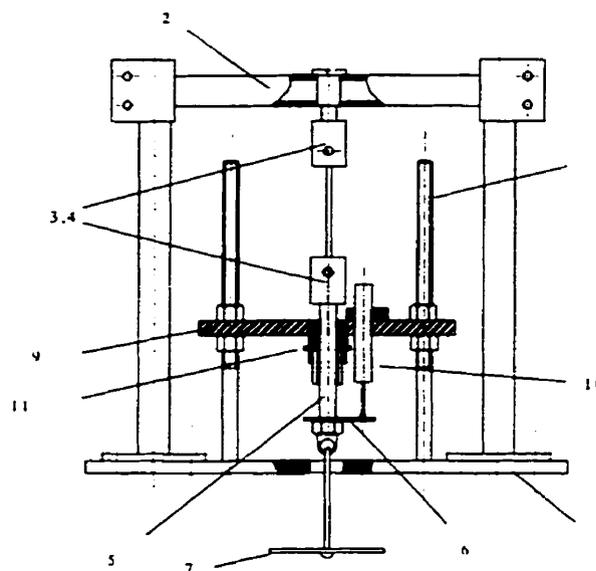


Figure 3.1: Assisted two-way SME test bench: (1) base plate; (2) frame; (3,4) grips; (5) guiding rod; (6) thrust block; (7) load bed; (8) column; (9) holding plate; (10) LVDT; (11) cylindrical sliding bearing.

3.2.2 Experimental procedure

The testing bench is used to measure during heating and cooling under constant load the elongation of the sample as a function of temperature in case of complete as well as partial assisted two-way shape memory cycles. The procedure is repeated for several values of constant load. At the beginning of each partial cycle, the amount of the martensite in the material must be identical for each loading case, because these partial cycles will be used to generate, by kriging interpolation, heating and cooling surfaces in stress-strain-temperature space. The NiTi specimens used in this analysis are stabilized before testing, i.e.; the specimens have undergone several *thermal* cycles in order to stabilize their mechanical properties and phase transformation temperatures.

For each case of loading, the experimental procedure may be described as follows:

1) Main heating and cooling cycle. – As shown in Figure 3.2, the sample is loaded in the martensitic state, then heated to a temperature $T > A_F$ (1-2-3), and finally cooled until it comes back to its martensitic state (3-4-1). The main thermal cycle obtained in this way breaks up into two parts: the higher section of the diagram corresponds to heating, and the lower one to cooling.

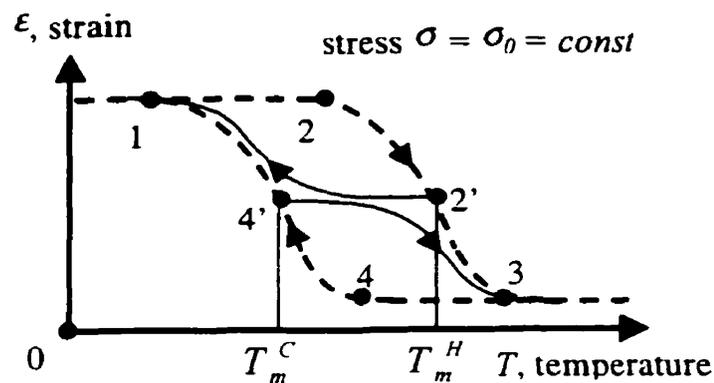


Figure 3.2: Cooling and heating partial cycles.

2) Identification of the average temperature. – The average temperature T_m corresponds to the medium point of the deformation either during heating (T_m^H) or cooling (T_m^C).

3) Partial heating or cooling cycles. – The sample is loaded and heated up to a temperature $T > A_F$ (1-2-3), then cooled down to temperature T_m^C (3-4-4') as illustrated in Figure 3.2. When this state is reached, the alloy is heated up again until $T > A_F$ (4'-3). Finally, it is cooled until it reaches its final martensitic state (see in Figure 3.3

the lower subcycles inside each main hysteresis curve). Partial cooling cycles have also been represented in Figure 3.3 (upper subcycles in the main hysteresis curves).

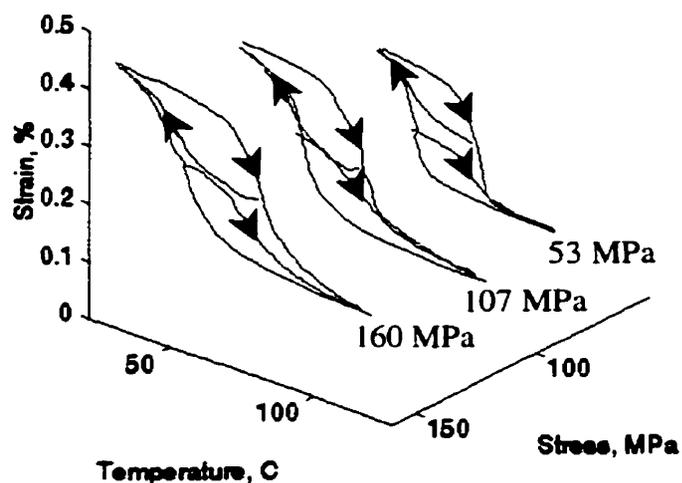


Figure 3.3: Main and partial thermal cycles obtained experimentally for three cases of loading: 53, 107 and 160 MPa. (Partial cycles correspond here to about 50 % of the martensite content.)

3.3 Parametric modeling using three-dimensional kriging

This section presents the shape memory model based on dual kriging [1], a general interpolation method which contains spline and Bezier curves or surfaces as particular cases, and least square methods as a limit case. The thermomechanical behavior of the stabilized SMA samples is totally defined in a three-dimensional space of strain, stress and temperature. The response of the material is described by a series of curves and surfaces. At each point M inside the hysteresis volume defined by the main thermal cycle, only one downward surface corresponding to *heating* and only one ascending surface corresponding to *cooling* may exist.

In order to define a thermomechanical heating or cooling trajectory, it is necessary to introduce supplementary curvilinear coordinates in the model. This will be done using parametric dual kriging.

One basic requirement for the natural parameters to be used in the dual kriging interpolation is the necessity to confine them an explicit physical meaning. The parameters introduced here are the following: as shown in Figure 3.4, ϵ_H is the normalized strain on heating, ϵ_C the normalized strain on cooling, and σ denotes the normalized stress. The minimum and maximum values of each variable are normalized here between 0 and 1. By this parameterization of the SMA behavior, a volume is generated between two surfaces corresponding respectively to heating and cooling. The variation of parameters $(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)$ is represented in a unit cube. Indeed, by fixing one of the coordinates at a constant value while varying the two others in a unit interval, a single plane perpendicular to one parametric axis is obtained in the parameter space.

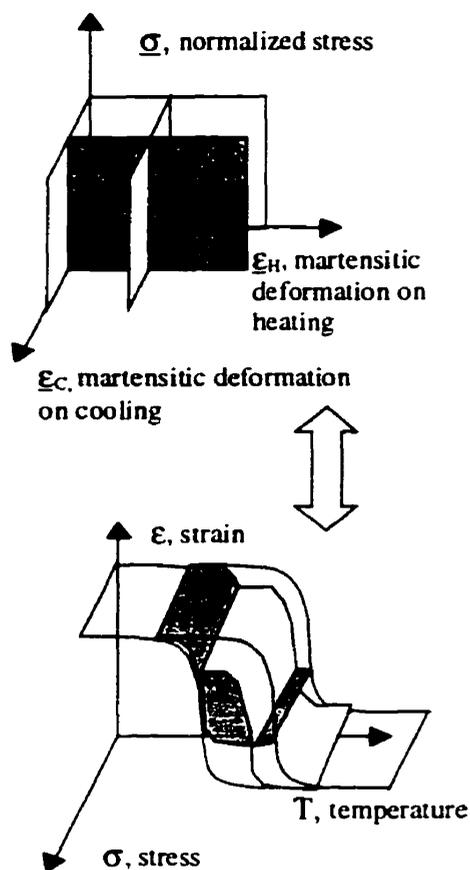


Figure 3.4: A plane in the parameter space $(\epsilon_H, \epsilon_C, \underline{\sigma})$ associated with a single surface in the space (ϵ, T, σ) .

Two sets of parameteric surfaces are constructed: the first set represents the variation of the parameter ϵ_H , and the corresponding surfaces in the space $(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)$ describe partial *heating* cycles in the stress-strain-temperature space (see Figure 3.5). The second set represents the variation of ϵ_C , and the corresponding surfaces in the space $(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)$ describing partial *cooling* cycles. As illustrated in Figure 3.4, these surfaces can be represented as the two sets of planes parallel to $(0, \epsilon_C, \sigma)$ and $(\epsilon_H, 0, \sigma)$ in the unit cube $(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)$. The advantage of this representation is that we can control any path in the

stress-strain-temperature space including any type of partial cycle by knowing only three coordinates (ϵ_H , ϵ_C , σ).

3.4 Kriging results

By using three-dimensional volume parametric kriging [1], the hysteretic heating and cooling volumes are completely described by the following parametric equations (for sake of completeness, a more detailed description of the method is outlined in the Appendix V):

$$\begin{aligned}\epsilon_{\text{heating}} &= \epsilon_{\text{heating}}(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma) \\ T_{\text{heating}} &= T_{\text{heating}}(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)\end{aligned}\tag{3.1}$$

and

$$\begin{aligned}\epsilon_{\text{cooling}} &= \epsilon_{\text{cooling}}(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma) \\ T_{\text{cooling}} &= T_{\text{cooling}}(\epsilon_H, \epsilon_C, \sigma)\end{aligned}\tag{3.2}$$

3.4.1 Verification

The first experimental set of thermal cycles shown in Figure 3.3 was treated numerically to define the heating volumes. Figure 3.5 shows the results of calculated heating thermal cycles.

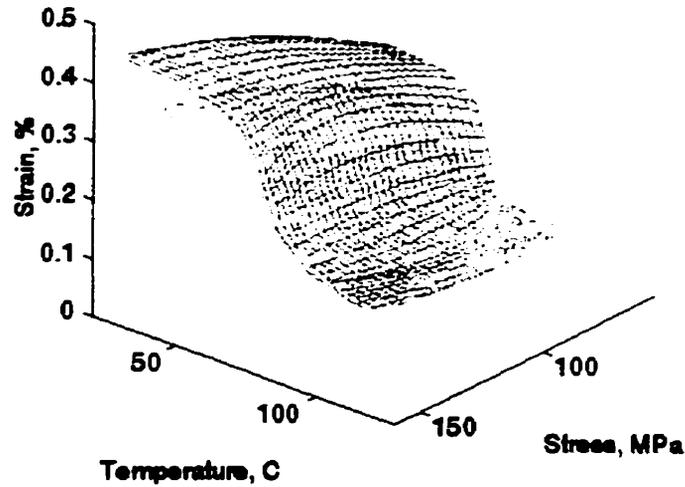


Figure 3.5: Heating thermal cycles corresponding to an initial content of 40, 70 and 100% of martensite: the hysteretic volume is created using the three sampling sets of Figure 3 obtained for loads of 53, 107 and 160 MPa.

Figure 3.6 shows the comparison between calculated trajectories and the experience. We verify here that the approximated curves match accurately the partial heating cycle. This demonstrates the stability of the model with respect to the initial data used to generate the kriged volume. The next step will be to validate this approach by comparison with a stress-strain experimental curve at a given temperature.

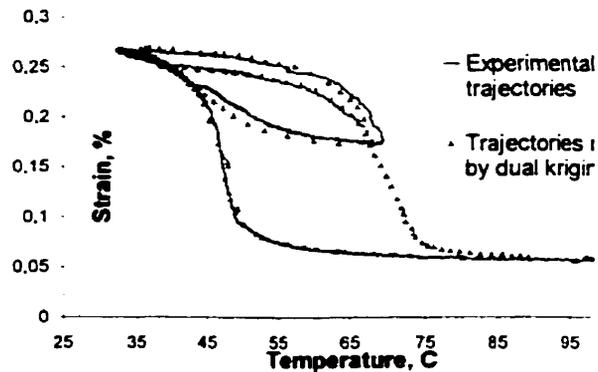


Figure 3.6: Experimental and calculated trajectories of partial thermal cycle obtained for a load of 53 MPa.

3.4.2 Experimental validation of the main interpolation cycle

Validation consists of reconstructing strain-stress isothermal curves from strain-temperature curves. Initial data both for strain-temperature and strain-stress curves are taken from [7]. The kriged volume is created from two strain-temperature curves presented in Figure 3.7. The default stress interval is between 128 and 174 MPa, but it can be extended within reasonable limits.

A parametrical representation of the hysteretic volume obtained in this way allows us to determine the isothermal behavior of the main cycle corresponding to $T = 18\text{ }^{\circ}\text{C}$ and $T = -34\text{ }^{\circ}\text{C}$. The comparison between calculated and experimental isothermal curves is presented in Figure 3.8.

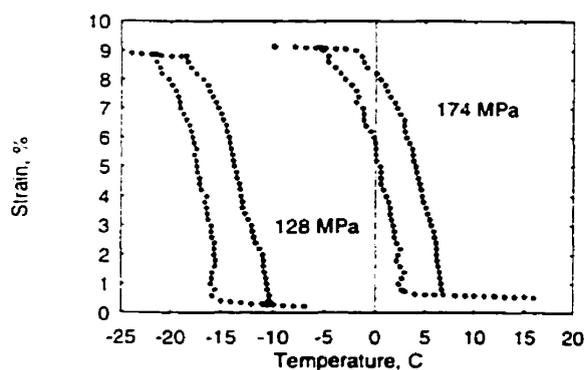


Figure 3.7: Experimental isostress curves (from [7])

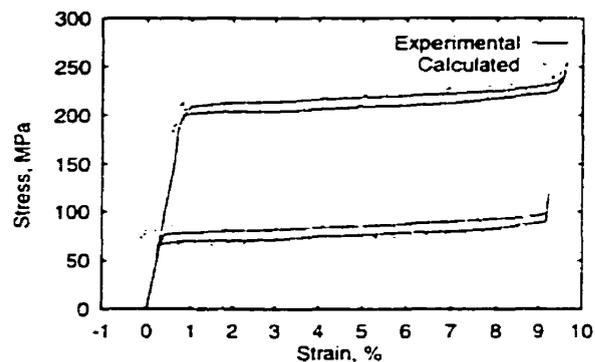


Figure 3.8: Comparison between calculated and experimental isothermal curves (from [7])

3.5 Conclusion

The model presented in this article shows the benefits of three-dimensional kriging to simulate the mechanical behavior of SMA. The most interesting feature of the model lies in its ability to describe the main and partial thermal cycles of a SMA specimen with a single analytical formulation. Initial data are provided experimentally in order to obtain a material law defined in a stress-strain-temperature space that allows to simulate complex thermo-mechanical loading paths.

Several ideas could be tested to improve this methodology, both from experimental and numerical points of view:

- 1) The testing bench could be improved in order to provide more reliable experimental results, particularly concerning partial cycles data. Indeed, partial cycles are constructed in function of the average strain of the specimen. Thus, in order to control more precisely the release of partial cycles, a displacement control seems to be more appropriate than the currently programmed temperature control.
- 2) The accuracy of the method strongly depends on the degree of specimen stabilization. Even the samples that are definitely settled in the main cycle can change their behavior during partial cycles. Moreover, any partial cycle modifies the profile of the next ones.
- 3) Further validation should be performed for new thermal cycles (obtained for a stress different from the ones used to construct the model) and for isothermal strain-stress experimental curves.

References

- /1/ F. Trochu, *Engineering with Computers*, 1993, 9: 160-177.
- /2/ A. Limaien, *Computer-Aided CMM Inspection Planning and Verification*, Ph.D. Thesis, McMaster University, September 1996.
- /3/ P. Terriault, M.-A. Meunier, F. Trochu, *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 8(7), 553-630, 1997.
- /4/ A. Amengual, A. A. Likhachev, E. Cesari, *Scripta Materialia*, Vol. 34, No. 10, pp 1549-1554, 1996
- /5/ J. Ortín, *Journal de Physique IV*, Vol. 4, novembre 1991.
- /6/ J. Ortín, A. Planes, *Journal de Physique IV*, Vol. 1, novembre 1991
- /7/ E. Patoor, A. Eberhardt, M. Berveiller, *Acta metall.* Vol. 35, No. 11, pp 2779-2789, 1987
- /8/ F. Trochu, N. Sacépé, O. Volkov, S. Turenne, accepted in proceeding of International Conference of Material Transformation ICOMAT'98, Material Science & Engineering A

CONCLUSIONS

Le travail s'est concentré sur deux aspects : théorique et numérique. La base théorique établie dans le chapitre 2 permet de simuler le comportement thermique des alliages à mémoire de forme en tenant compte en même temps de l'état actuel mécanique du matériau. Il s'agit ici d'un problème thermomécanique couplé, dont le couplage se passe au niveau des équations de conservation d'énergie.

Ces études permettent de développer un outil de calcul numérique qui résout le problème de transfert de chaleur sur la base des calculs par éléments finis. Le programme contient l'interface entre l'équation de transfert de chaleur et le logiciel de calcul par éléments finis. Le guide d'utilisateur ainsi que le guide de programmeur sont présentés dans les annexes I et II. Une série de restrictions est imposée sur le comportement thermomécanique du matériau :

- ce modèle est réservé pour les cas du comportement superélastique. (Dans le cas de changement de forme dû à la réorientation des plaquettes de martensite, toute l'énergie introduite mécaniquement dans le matériau sera bloquée dans la forme de l'énergie d'interface entre les plaquettes. Il n'existe donc pas d'énergie dissipée sous forme de chaleur. Le comportement thermique d'un tel matériau peut être correctement décrit par le modèle de dilatation thermique.)
- ce modèle ne tient pas compte des effets thermiques causés par la fatigue ou par la plastification du matériau. (Il existe déjà plusieurs modèles élasto-plastiques qui tiennent compte de l'écroutissage isotrope et cinématique des métaux ordinaires, mais la base expérimentale du comportement plastique des AMF n'est pas encore suffisamment élaborée.)

- les effets thermiques causés par la dilatation thermique sont négligeables. En effet, selon LEMAÎTRE, CHABOCHE, 1988 l'énergie récupérée par le changement de pente élastique est équivalent à :

$$\frac{E}{(1-2\nu)}\alpha \cdot \dot{\varepsilon} \approx 2.4 \cdot \dot{\varepsilon} \text{ MPa}$$

où E est le module élastique, ν est le coefficient de Poisson, α est le coefficient de dilatation thermique et $\dot{\varepsilon}$ est la vitesse de déformation. En général, cette quantité est égale à un pour cent de l'énergie dissipée par la transformation de phase.

Néanmoins, le logiciel est construit d'une façon flexible et il permet, si nécessaire, d'inclure ces effets dans la formulation principale.

BIBLIOGRAPHIE

ABEYARATNE R., KIM S.-J., KNOWLES J.K. (1984). Continuum modeling of shape-memory alloys. *Mechanics of Phase Transformations and Shape Memory Alloys*, ASME.

AMENGUAL I. A., LIKHACHEV A.A., CESARI E. (1996). An experimental study of the partial transformation cycling of shape-memory alloys. *Scripta Materialia*, 34, no. 10, 1549-1554.

COUTURE L., CHAHINE C., ZITOUN R. (1980). *Thermodynamique classique et propriétés de la matière*. Dunod Université, chap. 5, 105-115.

GOO B.C., LEXCELLENT C. (1997). Micromechanics-based modeling of two-way memory effect of a single crystalline shape-memory alloy. *Acta mater.*, 45, no.2, 727-737.

ENTERMEYER D., PATOOR E., EBERHARDT A., BERVEILLER M., (1995). Micromechanical modelling of the superthermoelastic behavior of materials undergoing thermoelastic phase transformation. *Journal de Physique IV*, 5, décembre.

LAGOUDAS D., BO Z., QIDWAI A.M. (1996). A unified thermodynamic constitutive model for SMA and finite element analysis of active metal matrix composites. *Mechanics of Composite Materials and Structures*, 3

LEMAITRE J., CHABOCHE J.-L. (1988). *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, chap. 2, 40-70, 1988.

LEO P.H., SHIELD T.W., BRUNO O.P. (1993). Transient heat transfer effects on the pseudoelastic behavior of shape-memory wires. Acta metall. mater., 41, no. 8, 2477-2485.

LEXCELLENT C. (1994). Some remarks about thermodynamics of pseudoelasticity. Progress in partial differential equations : the Math. surveys 2, 23-37.

LEXCELLENT C., BOURBON G. (1996). Thermodynamical model of cyclic behavior of Ti-Ni and Cu-Zn-Al shape memory alloys under isothermal undulated tensile tests, Mechanics of Materials 24, 59-73.

LIKHACHEV V.A., MALININ V.G. (1993). Structure-analytical theory of strength. (in Russian Структурно-Аналитическая Теория.) St.-Peterbourg, Nauka.

MÜLLER I., XU HUIBIN (1991). On pseudo-elastic hysteresis. Acta Metall. Mater., 39, No. 3. 263-271.

ORTIN J. (1991). Partial hysteresis cycles in shape-memory alloys experiments and modelling. Journal de Physique IV, Colloque C4, 1.

ORTÍN J., PLANES A. (1991). Thermodynamics and hysteresis behavior of thermoelastic martensitic transformation. Journal de Physique IV, 1, novembre, 13-29.

PATOOR E., BENSALAH M.O., EBERHARDT A., BERLEILLER M. (1992), Détermination du comportement thermomécanique des alliages à mémoire de forme par optimisation d'un potentiel thermodynamique. Revue de Métallurgie, novembre.

PATOOR E., SIREDEY N., EBERHARDT A., BERLEILLER M. (1995). Micromechanical approach of the fatigue behavior in a superelastic single crystal. Journal de Physiques IV, 5, décembre, 227-232.

PLANES A., MACQUERON J.L., ORTIN J. (1988). Energie contribution in the martensitic transformation of shape-memory alloys. Phil.Mag.Lett., 57, 291.

RIO G., FAVIER D., DESPLATS H. (1995). Finite element simulation of mechanical behavior of shape memory alloys coupled with a non-stationary thermal field. Journal de Physique IV, C8, 5, 215-220

SUN Q.P., HWANG K.C. (1993). Micromechanics modelling for the constitutive behavior of polycrystalline shape memory alloys - I. Derivation of general relations. J. Mech. Phys. Solids, 41, no. 1, 1-17.

TROCHU F., BRAILOVSKI V., VACHON N., TERRIAULT P. (1997). Les alliages de mémoire de forme et leurs applications industrielles. Rapport EPM/RT-97/22, École Polytechnique de Montréal.

WASILEWSKI R.J. (1970). Deformation twinning as a mode of energy accomodation. Metallurgical transactions, 1, may, 1333-1335.

ANNEXE I

GUIDE D'UTILISATEUR DU LOGICIEL DE SIMULATION THERMIQUE HEATAMF

I.1 Introduction

Le programme HEATAMF, dont la base est le logiciel LCMFLOT, permet de simuler la réponse thermique d'un corps soumis à des sollicitations thermomécaniques en considérant différents types de lois de comportement. Le programme travaille dans le mode console et permet de faire le calcul sous les différents systèmes d'exploitation : DOS, WINDOWS 3.x/9x/NT et UNIX.

Le calcul est effectué par éléments finis. Il faut donc créer la géométrie du corps, générer le maillage, fixer les conditions aux limites et définir les paramètres physiques du matériau. Ainsi, pour la mise en marche du programme, il est nécessaire de lui fournir deux fichiers contenant respectivement le maillage et des paramètres physiques du problème.

Le fichier du maillage doit être donné sous format .unv et peut être donc généré à l'aide des mailleurs qui admettent l'enregistrement en format .unv. L'exemple d'un tel mailleur est le programme GMSH présenté sur le site internet: (<http://www.meca.polymtl.ca/~remacle>).

Le fichier contenant les paramètres physiques possède une structure à macro-langage analytique et peut être modifié dans un éditeur de texte quelconque. Ce macro-langage, rendu plus puissant grâce à la calculatrice analytique, permet de décrire n'importe quel modèle mécanique indépendamment des relations qui existent entre les paramètres physiques.

Avant de procéder à la description de ce macro-language, il est nécessaire de comprendre l'interaction entre les deux fichiers d'initialisation. Les mailleurs de Catia, de Ideas, de Patran et de GMSH permettent de créer des *zones* physiques à l'intérieur du corps, des *groupes* des conditions aux frontières et d'attribuer à ces zones et ces groupes un numéro d'indentification. Ces numéros sont utilisés comme référence pour attacher la physique du matériau à la géométrie du corps. L'exemple de la déclaration d'une référence sera présenté ci-dessous dans le contexte du deuxième fichier d'initialisation, voir Annexe IV.

I.2 Syntaxe du macro-language

Ce fichier contient la définition des paramètres physiques. Il peut être aussi muni de commentaires. Chaque nouvelle définition commence par son nom mis entre crochets et finit lorsque tous les éléments nécessaires sont introduits. Par conséquent, aucun crochet ne doit apparaître dans les commentaires et aucun commentaire ne doit apparaître dans le corps de la définition. Les erreurs de syntaxe provoquent l'arrêt du programme. Un exemple d'une déclaration est présenté ci-dessous.

Le corps de la définition est placé juste après son nom. Le type du paramètre physique doit être placé sur la première ligne de la définition. Dans la présente version du programme deux types sont définies:

```
Type=function
```

ou

```
Type=variable
```

Les paramètres du type *variable* peuvent être créés pour deux raisons :

- servir de référence pour plusieurs variables physiques;
- initialiser une variable physique

Le type `function` permet de décrire une variable physique quelconque comme une fonction d'autres variable. Dans ce cas, le programme propose deux formes possibles:

```
Form=analytical
```

ou

```
Form=numeric
```

La fonction dans la forme analytique est définie par une expression symbolique commencée par `value=` dont le liste des opérations acceptées est indiquée dans le tableau suivant:

Opération :	Type :	Commentaires :
<code>+, -, *, /</code>	arithmétique	Quelque soit la forme des opérandes, le programme les traite toujours comme des nombres à double précision.
<code>()</code>	expression	
<code>^</code>	puissance	
<code>sin(), cos()</code>	trigonométrique	
<code>ln(), exp()</code>	logarithmique	
<code>D()</code>	fonction de Dirac	Cette fonction est égale à un quand l'argument est zéro et s'annule partout ailleurs.
<code>H()</code>	fonction Heaviside	Cette fonction est égale à

... valeurs en concordance avec
la liste des paramètres

Dans la version actuelle du programme les paramètres doivent être tous dans la même système d'unité de mesure tandis que la prochain version aura la possibilité d'avoir une unité de mesure associé avec chaque paramètres. Le programme fera la conversion automatique. Il existe néanmoins des restrictions imposées sur la syntaxe. On distingue ainsi trois types de paramètres :

1. Paramètres qui sont vitaux pour le calcul. Leur nom sont donc bien fixé.

Groupe des conditions aux limites

```
[Group]
Type=variable
Value=0.
```

Pour évoquer cette variable, on peut utiliser, par exemple, la fonction de Dirac $D(\dots)$. La syntaxe suivant donne 2(1) quand le groupe est égale à 1(2) :

```
Value=D([Group]-1)*2+D([Group]-2)*1
```

Le même exemple peut être utilisé pour les zones du matériau.

Zones

Ce paramètres décrit les différentes zones à l'intérieur du corps. La numérotation des zones doit correspondre exactement à la numérotation faite par le mailleur.

```
[Zone]
Type=variable
Value=0.
```

Condition aux limites

La condition de type Dirac est imposée à l'aide de la variable de température; l'exemple suivant donne 30 pour le groupe numéro 20 et 25 partout ailleurs.

```
[Temperature]
Type=fonction
Value=D([Groupe]-20)*5+25
```

En outre, en utilisant ce paramètre, l'utilisateur peut initialiser la température à l'intérieur du corps. Dans ce cas, il pourrait être également une fonction de la variable de zone.

Les conditions aux limites qui contiennent le terme du gradient de la température sont modélisées à l'aide de la variable [Temperature Gradient]. Par exemple l'expression suivante donne les conditions de Neumann (flux de chaleur constant) sur le groupe numéro 20.

```
[Temperature Gradient]
Type=fonction
Value=D([Group]-20)*6.5
```

Voici encore un exemple qui permet d'imposer les conditions naturelles sur le groupe 20.

```
[Temperature Gradient]
Type=fonction
Value=D([Group]-20)*6.5*([Temperature]-25)
```

Densité du matériau

```
[Density]
Type=variable
Value=30.
```

Coefficient de conduction

```
[Conduction]
Type=variable
Value=10.
```

Chaleur spécifique

```
[Specific Heat]
Type=fonction
Value=700.
```

Source de chaleur

```
[Heat Source]
Type=variable
Value=1000.
```

2. Paramètres qui doivent toujours garder les noms attribués par défaut, mais qui ne sont pas vitaux pour le calcul. S'il n'est pas déclaré, le paramètre physique lui correspondant est initialisé à une valeur de défaut.

Taux de croissance de la température

Comme il est nécessaire parfois de contrôler la croissance de la température, ce paramètre physique peut être donc évoqué à l'aide de la déclaration suivante :

```
[Temperature Rate]
Type=variable
Value=0.
```

Il est égale à zéro par défaut.

Coordonnées spatiales

```
[X]
Type=variable
Value=0.

[Y]
Type=variable
Value=0.

[Z]
Type=variable
Value=0.
```

Temps

Par défaut, il est égale à zéro.

```
[Time]
Type=variable
Value=0.
```

Pas dans le temps

```
[Time Step]
Type=variable
Value=1000.
```

3. Paramètres définis par l'utilisateur dans le but de fixer les calculs intermédiaires.

Un exemple d'un fichier de données présenté dans l'Annexe IV. Dans cet exemple, on interpole l'incrément de temps et la chaleur latente en fonction de la température ainsi que l'intensité du courant en fonction du temps.

ANNEXE II

GUIDE DE PROGRAMMEUR DU LOGICIEL DE SIMULATION THERMIQUE HEATAMF

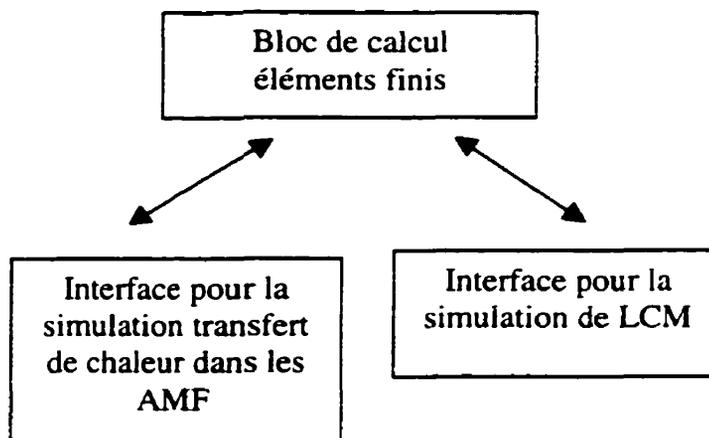
Le programme de simulation thermique HEATAMF basé sur le bloc de calcul par éléments finis LCMFLOT a été conçu en fonction des critères suivants : portabilité et indépendance du code.

Portabilité

Le programme a été développé en langage C++ (standard ANSI) afin d'assurer une portabilité maximum du code. Bien que la version actuelle du logiciel ait été testée seulement sur micro-ordinateur (Visual C++ 5.0, 6.0) et sur station de travail (GNU C++ 2.7.*), il est possible de la compiler dans les autres environnements de C++. Dans ce cas il est important d'assurer la présence de la librairie de patrons.

Indépendance

Les modules thermiques AMF sont créés de façon à intervenir au minimum dans le code principal du bloc de calcul par élément finis. La dépendance du code thermique AMF envers le reste de LCMFLOT peut être résumée dans le schéma suivant :



C'est ainsi que le module thermique AMF fournit un interface entre les fonctions qui traitent les données physiques provenant de l'utilisateur et les fonctions qui effectuent la gestion de ces données au niveau du programme de calcul par éléments finis.

Le programme contient les deux classes suivantes:

variable.h

Cette classe effectue la gestion des variables qui contiennent les propriétés physiques du problème. Le constructeur de classe crée une structure de données vide, ensuite l'opérateur >> lit les données à partir du fichier d'initialisation, (voir l'exemple dans Annexe IV). Pour accéder à des propriétés de l'objet, il existe la série des fonctions suivante:

<code>double getValue();</code>	- lire la valeur actuelle de la variable
<code>void putValue(double);</code>	- attribuer une valeur numérique à une variable
<code>char *getSValue();</code>	- lire la valeur de la variable de type fonction symbolique

```

double getNValue(double); - lire la valeur de la variable de type fonction
                           numérique

int getParameterNumber(); - lire le nombre de paramètres dont dépend la
                           variable de type fonction

char *getParameter(int); - lire le nom d'un paramètre dont dépend la
                           variable de type fonction

void putName(char*); - attribuer le nom à un paramètre dont dépend
                       la variable de type fonction

```

Pour transformer la fonction symbolique dans une valeur numérique exacte la fonction `getSValue` interroge la calculatrice symbolique qui se trouve dans le module `calc`.

curve.h

Cette classe permet de créer un profil de krigeage de courbe à partir d'un échantillonnage des points.

Par ailleurs, il existe deux fonctions - `GetValue` et `PutValue` - qui servent respectivement pour lire et attribuer des valeurs numériques aux variables physiques déjà déclarées. Un bref exemple ci-dessous montre comment dans le bloc principal de calcul par éléments finis on actualise les variables de position géométrique d'un élément ("X", "Y", "Z") et comment on définit la source thermique à partir d'une variable "Heat Source".

```

static double source_thermique (double x, double y , double z){
    PutValue("X",x);
    PutValue("Y",y);

```

```
PutValue("Z",z);  
return GetValue("Heat Source");  
}
```

ANNEXE III

**DONNÉES EXPÉRIMENTALES UTILISÉES
DANS LES CALCULS NUMÉRIQUES.**

Propriétés géométriques :	Ruban	Rondelle	Fil
Longueur	0.1 m	–	0.3 m
Largeur	$5.1 \cdot 10^{-3}$ m	–	–
Épaisseur	$2. \cdot 10^{-4}$ m	$2. \cdot 10^{-5}$ m	–
Aire de section	$1.02 \cdot 10^{-6}$ m ²	–	$50.265 \cdot 10^{-6}$ m ²
Volume	$102 \cdot 10^{-9}$ m ³	$8,04224 \cdot 10^{-9}$ m ³	$150.7 \cdot 10^{-7}$ m ³
Diamètre	–	$3.2 \cdot 10^{-3}$ m	$8 \cdot 10^{-3}$
Masse	–	$13 \cdot 10^{-3}$ g	–

Tableau III.1: Les propriétés géométriques des échantillons AMF

Densité	6500 kg/m^3
Capacité thermique	$700 \text{ J/kg } ^\circ\text{C}$
Conductivité thermique	$10 \text{ W/m } ^\circ\text{C}$
Coefficient d'échange thermique par convection	$7 \text{ W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$
Résistivité du matériau	$725 \cdot 10^{-9} \text{ Ohm m}$

Tableau III.2: Les propriétés physiques des échantillons AMF

ANNEXE IV

UN EXEMPLE DU PROGRAMME DE SIMULATION UTILISÉ PAR LE LOGICIEL DE SIMULATION THERMIQUE

Ce programme correspond à un exemple de calcul thermique présenté dans le paragraphe 2.4.

Calcul thermique pour un ruban AMF
fait par Volkov Oleg 12 dec. 1998

[Temperature]
Type=variable
Value=27.

[Temperature Rate]
Type=variable
Value=0.0

On determine le source de chaleur. Pour cela il faut d'abord determiner de certains parametres physiques:

Intensite du courant electrique

[Current]
Type=function
Form=analytical
Value= $H(90.-[Temperature])*6*H([Temperature Rate])$

Resistivite (ne pas confondre avec resistance)

[Resistivity]

Type=variable
Value=0.000000800

Aire de la section transversale

[Section Area]
Type=variable
Value=0.00000102

Densite

[Density]
Type=variable
Value=6500.

Enfin, l'energie correspondant a la source de chaleur

[Heat Source]
Type=function
Form=analytical
Value=[Current]^2*[Resistivity]/([Section Area]^2)

Pas dans le temps

[Time Step]
Type=variable
Value=0.1

Chaleur specifique

[Specific Heat]
Type=function
Form=numeric
Number=10
Value=f([Temperature])

ANNEXE V

PARAMETRICAL KRIGING

In the present appendix, the principle of parametrical kriging that is a particular case of the more general theory of dual kriging is given. Briefly speaking, the dual kriging consists in an approximation of a set of discrete data by a continuous analytical function. As shown in /1/, dual kriging is, in fact, a generalization of well-known approximation methods like spline or Bezier interpolation.

As a preliminary, we briefly review certain notions from the analysis of functions used in the sequel. An *isomorphism*, or *isomorphic* mapping, from A onto A' is a one-to-one mapping from the set A onto the set A' which determines an equivalence relation by splitting any set on which it is defined into disjoint equivalence classes – the classes of pairwise isomorphic systems (cf. Encyclopaedia of Mathematics. Kluwer academic publishers, 1995). For example, the function that associates the hysteretic volume in the strain-stress-temperature space with a three-dimensional unitary cube in the parametrical space is an isomorphism since it should take into account pairwise isomorphic systems of points, lines and surfaces representing partial hysteresis curves.

Given two sets of points in the n -dimensional Euclidean space: the first one contains parameter values denoted $[x]$, the second – function values denoted $[f]$. Kriging interpolation consists in constructing an isomorphic mapping from $[x]$ to $[f]$. The only restriction imposed here on the approximating function is that it should be continuous.

The approximating function is divided into two parts: average term $a(x)$ called *drift* and fluctuation term $b(x)$ called *covariance*, so that $f(x)$ can be written as:

$$f(x) = a(x) + b(x) \tag{V.1}$$

where $a(x)$ and $b(x)$ are interpolated in two subsets of continuous functions $f_{drift}(x)$ et $f_{covar}(x)$, respectively the drift and the covariance, which define together a *profile* for kriging, i.e., the set of parameters that determine the structure of the kriging interpolator. Expression (V.1) may be then presented in the form:

$$f(x) = \sum_{i=1}^m a_i f'_{drift}(x) + \sum_{i=1}^n b_i f_{covar}(\|x - x_i\|) \quad (V.2)$$

or in vector notation:

$$f(x) = [f_{covar}(h), f_{drift}(x)] \cdot \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} \quad (V.3)$$

with the distance $h = \|x - x_i\|$ where i corresponds to the index of b_i .

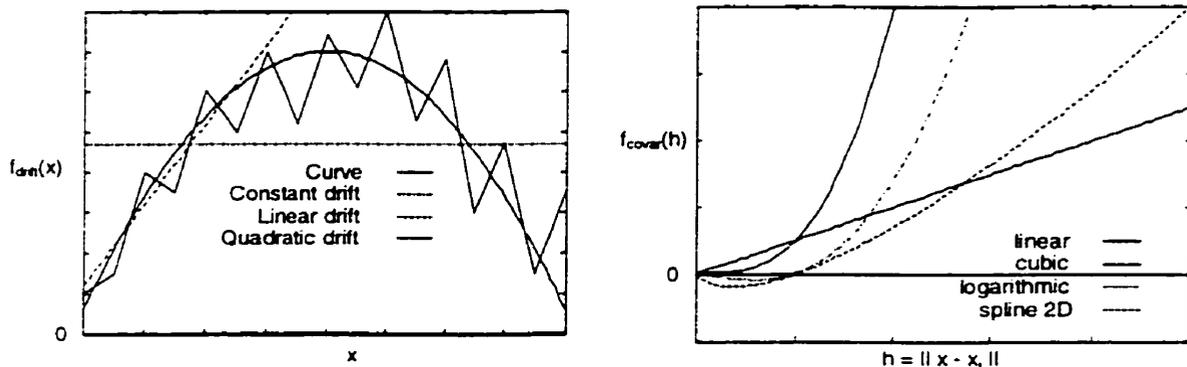


Figure V.1: Drift and covariance functions most frequently used in kriging approximation

The problem of approximation reduces to the determination of a set of coefficients a_i, b_i , that will be denoted thereafter as vector $[b, a] = (b_1, b_2, \dots, b_N, a_0, \dots, a_m)$. The required coefficients can be found by solving the following linear system of equations:

$$\begin{bmatrix} [f] \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{covar}(0) & f_{covar}(h_{21}) & \cdot & f_{covar}(h_{n1}) & f_{drift}(x_1) \\ f_{covar}(h_{12}) & f_{covar}(0) & \cdot & f_{covar}(h_{n2}) & f_{drift}(x_2) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ f_{covar}(h_{1n}) & f_{covar}(h_{2n}) & \cdot & f_{covar}(0) & f_{drift}(x_n) \\ f_{drift}(x_1) & f_{drift}(x_2) & \cdot & f_{drift}(x_n) & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ b_n \\ a \end{bmatrix} = [K] \cdot \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} \quad (V.4)$$

where $h_{IJ} = ||x_I - x_J||$ represents the distance between two points x_I and x_J . $[K]$ defines a *kriging matrix*. Note that the last equation results from the *unbiased estimation condition* (cf./11).

Since the matrix $[K]$ is assumed to be non-degenerate, one obtains a vector of the unknown multipliers $[b, a]$, by multiplying the system (V.4) by $[K]^{-1}$. Substituting the vector $[b, a]$ into equation (V.3), the final kriged function becomes:

$$f(x) = [f_{covar}(h), f_{drift}(x)] \cdot [K]^{-1} \cdot \begin{bmatrix} [f] \\ 0 \end{bmatrix} \quad (V.5)$$

Parametric kriging differs from the simple kriging by the fact that each component of the vector $[x]$ is associated with its proper unique profile $[f_{covar}, f_{drift}]$. This property enables us to define a particular data structure; with a vector of direction corresponding to the i^{th} component of vector $[x]$:

$$k_x = [f_{covar}(h), f_{drift}(x)] \cdot [K]^{-1} \quad (V.6)$$

This structure is built by knowing only the samples $[x]$ and the type of kriging profiles $[f_{covar}, f_{drift}]$. In simple kriging, all k_x are identical, since only one profile for all the variables is considered.

As a matter of example, let us consider the case of parametric surface kriging. We denote by $[x, y]$ a set of points coordinates and by $[f_x, f_y]$, the set of corresponding function values. Following the procedure explained in the previous paragraph, the two-dimensional set $[x, y]$ generates two directions of kriging k_x, k_y , and the final kriged function takes the form:

$$f(x, y) = k_x \cdot \begin{bmatrix} [f] & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot k_y \quad (\text{V.7})$$

where $[f]$ stands for a quadratic matrix containing $[f_x, f_y]$ values.

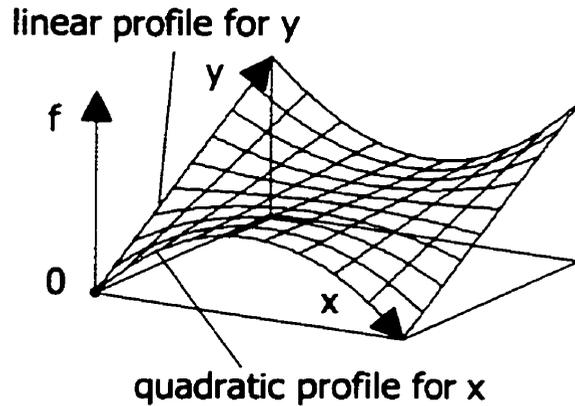


Figure V.2: Curvilinear surface described by a set of parametric co-ordinates (x, y)

A similar procedure can be used to build parametric volume kriging interpolation on three-dimensional data sets $[x, y, z]$ and $[f_x, f_y, f_z]$. In this case, $[f]$ represents a cubic matrix which can be defined along three directions k_x, k_y, k_z . The procedure to obtain the value of a kriged function $f(x, y, z)$ is the following: the multiplying the cubic matrix $[f]$ by k_z in order to decrement its dimension by 1. Thus, the final solution takes the form similar to (V.7):

$$f(x, y, z) = k_x \cdot \begin{bmatrix} [f]k_z & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot k_y \quad (\text{V.8})$$

In a similar way, n -dimensional volume kriging may be derived using the algorithm exhibited above.