

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

THÈSE PAR ARTICLES PRÉSENTÉE À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION D'UN DOCTORAT EN GÉNIE Ph.D.

PAR Alexandre PARADIS

CARACTÉRISATION ET MODÉLISATION DE LA DÉGRADATION DES PROPRIÉTÉS FONCTIONNELLES DES AMF SOUMIS À UN CHARGEMENT CYCLIQUE

MONTRÉAL, LE 11 FÉVRIER 2010

© Alexandre Paradis, 2010

CETTE THÈSE A ÉTÉ ÉVALUÉE

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. Patrick Terriault, directeur de thèse Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Simon Joncas, président du jury Département de génie de la production automatisée à l'École de technologie supérieure

M. Vladimir Brailovski, membre du jury Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Jean-Sébastien Plante, membre du jury Département de génie mécanique de l'Université de Sherbrooke

ELLE A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 11 FÉVRIER 2010

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Le présent travail de recherche menant à l'obtention du grade de docteur en génie n'aurait pas été possible sans l'appui de plusieurs personnes de mon entourage. Il y a tout d'abord mon directeur de recherche, Patrick Terriault, qui a su me proposer un sujet passionnant touchant à mes champs de compétences. Il y a aussi Vladimir Brailovski qui a su toujours trouver de bonnes propositions pour aider à la compréhension de certains phénomènes propres aux AMF. Également, tous mes collègues du LAMSI m'ont à leur façon supporté dans ma démarche de recherche, soit par des discussions de nature théorique, expérimentale ou tout simplement en discutant de choses et d'autres. Il y a parmi eux Yannick, Vincent, Daniel, Thomas, Pierre-Luc, Charles, Karina, Emeric, Jean-Sébastien ainsi que plusieurs gens de passage, Sébastien, Étienne, Karine, Maxime, et tous ceux et celles que j'oublie.

Je me dois également de remercier le département des enseignements généraux de l'ÉTS qui m'a permis de pourvoir continuer à travailler avec le même statut tout en faisant mon doctorat à temps plein.

Finalement, mes plus gros remerciements vont à ma famille. Mes parents, Claire et Michel, vous qui m'avez toujours supporté dans mes projets, quels qu'ils soient, mon frère Jean-François et ma sœur Isabelle qui ont également toujours su me prodiguer de bons conseils et d'une autre façon mes enfants Anabelle et Charles, qui, malgré votre jeune âge, m'avez apporté toujours un sourire motivant. Mais surtout, je tiens à remercier mon épouse Marie-Josée, sans qui je n'aurais pas réussi la moitié de ce que j'ai accompli. Tu m'as toujours apporté ton support inconditionnel, même dans les moments plus difficiles.

CARACTÉRISATION ET MODÉLISATION DE LA DÉGRADATION DES PROPRIÉTÉS FONCTIONNELLES DES AMF SOUMIS À UN CHARGEMENT CYCLIQUE

PARADIS, Alexandre

RÉSUMÉ

L'objectif principal de cette thèse consiste à élaborer un modèle qui prédit le comportement mécanique d'un alliage à mémoire de forme NiTi soumis à des sollicitations cycliques. Les objectifs spécifiques consistent à se doter par expérimentation d'une base de données touchant le comportement en contrainte, en déformation et en température, ainsi qu'à se doter d'une plus grande versatilité de modélisation. Le modèle développé dans cette thèse tient compte des comportements observés expérimentalement. Les modèles actuellement utilisés par le Laboratoire sur les Alliages à Mémoire et les Systèmes Intelligents (LAMSI) de l'ÉTS ont été bien rodés pour des applications quasi-statiques. Par contre, lorsque le modèle est employé pour simuler une évolution cyclique (application sur des actionneurs par exemple). le modèle actuel néglige les effets de la dégradation du matériau. Le but recherché par cette thèse est de produire un modèle fiable incorporant la dégradation des propriétés mécaniques de l'alliage à mémoire de forme NiTi. La méthodologie consistera en une série de tests mécaniques sur un alliage NiTi choisi. Tout d'abord, il y aura des tests en traction, en relaxation et des tests en sollicitation cyclique, sous différents paramètres. Il y aura une étude statistique des résultats ainsi qu'une vérification de cohérence avec les théories existantes. Le chapitre 2 présente de nouveaux résultats sur le comportement cyclique, décrivant l'effet d'une pause dans la sollicitation. Le développement d'un meilleur modèle de comportement sous sollicitation cyclique des alliages NiTi est par la suite fait au chapitre 3, en se basant sur le modèle de Likhachev. Une adaptation de ce modèle pour l'utilisation dans des logiciels de calcul par éléments finis est présentée au chapitre 4. Ceci permettra entre autre de développer de meilleurs actionneurs en AMF pour le domaine aéronautique et robotiques, actionneurs de plus en plus en vogue pour les nouveaux appareils.

CARACTÉRISATION ET MODÉLISATION DE LA DÉGRADATION DES PROPRIÉTÉS FONCTIONNELLES DES AMF SOUMIS À UN CHARGEMENT CYCLIQUE

PARADIS, Alexandre

ABSTRACT

The principal objective of the present thesis is to elaborate a computational model describing the mechanical properties of NiTi under different loading conditions. Secondary objectives are to build an experimental database of NiTi under stress, strain and temperature in order to validate the versatility of the new model proposed herewith. The simulation model used presently at Laboratoire sur les Alliage à Mémoire et les Systèmes Intelligents (LAMSI) of ÉTS is showing good behaviour in quasi-static loading. However, dynamic loading with the same model do not allows one to include degradation. The goal of the present thesis is to build a model capable of describing such degradation in a relatively accurate manner. Some experimental testing and results will be presented. In particular, new results on the behaviour of NiTi being paused during cycling are presented in chapter 2. A model is developed in chapter 3 based on Likhachev's micromechanical model. Good agreement is found with experimental data. Finally, an adaptation of the model is presented in chapter 4, allowing it to be eventually implemented into a finite-element commercial software.

TABLE DES MATIÈRES

Page

INTF	RODUCTION	1	
СНА	PITRE 1 CONSIDÉRATIONS GÉNÉRALE		
1.1	Présentation générale des alliages à mémoire de forme		
12	2 Problématique et objectif de recherche		
13	Revue de littérature	7	
1.5	1 3 1 Identification des facteurs qui influencent les propriétés	7	
	1 3 2 Références générales sur la dégradation des matériaux	14	
	1 3 3 Hypothèses théoriques de la dégradation des AMF	15	
	1.3.3.1 Bases cristallographiques		
	1.3.3.2 Propagation des fissures		
	1.3.3.3 Autres facteurs		
	1.3.4 Modélisation de la dégradation des AMF		
1.4	Originalité des travaux	29	
1.5	Méthodologie		
СНА	APITRE 2 ARTICLE 1: ON THE PARTIAL RECOVERY OF RESIDUAL STRAIN ACCUMULATED DURING AN INTERRUPTED CYCLIC LOADING OF NITL SHAPE MEMORY ALLOYS	35	
21	Introduction		
2.1 2.2	Experimental Procedure	37	
2.3	Experimental Results	40	
2.5	2 3 1 First Experimental Design (DOE 1)	40	
	2.3.2 Second Experimental Design (DOE 2)	46	
	2.3.3 Temperature Variations		
2.4	Discussion		
	2.4.1 Stress Increase		
	2.4.2 Residual Strain Recovery		
2.5	Conclusions	57	
2.6	References	58	
СНА	APITRE 3 ARTICLE 2: MODELING OF RESIDUAL STRAIN ACCUMULATION OF NITI SHAPE MEMORY ALLOYS UNDER UNIAXIAL CYCLIC LOADING	c 64	
3.1	Introduction	65	
3.2	Likhachev's Micromechanical Model: Basic Description	66	
3.3	Minimum Volume Fraction of Martensite	70	
3.4	Plastic Strain	75	
3.5	Macroscopic Thermal Model	80	
3.6	Complete Model Description		
3.7	Characterization of the Model: Material Constant Determination		

3.8	Theoretical Capability		
3.9	Validat	ion	89
	3.9.1	Validation based on residual strain approach	89
	3.9.2	Other qualitative validations	92
3.10	Conclu	sion	95
3.11	Acknow	wledgement	96
3.12	Referen	nces	96
CHAI	PITRE 4	ARTICLE 3: GENERAL 3D STRAIN-CONTROLLED	
		FORMULATION OF LIKHACHEV'S MODEL FOR SHAPE	
		MEMORY ALLOYS	102
4.1	Introdu	ction	103
4.2	Backgr	ound of the Likhachev's Model (Stress Controlled 3D Formulation)	105
	4.2.1	Elastic Contribution	105
	4.2.2	Phase Transformation Contribution	106
	4.2.3	Degradation Contribution	108
4.3	Strain (Controlled 3D Formulation	109
4.4	Algorit	hm Implementation	118
4.5	Numer	ical Validation	119
4.6	Conclu	sion	125
4.7	Acknow	wledgment	126
4.8	Referen	nces	126
CHAI	PITRE 5	ARTICLE 3: DÉVELOPPEMENT RÉCENT	130
CON	CLUSIO	N GÉNÉRALE	133
LISTI	E DE RÉ	FÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	136

VII

LISTE DES FIGURES

Page

Figure 1.1	Représentation des différentes phases cristallines d'un alliage fait de titane (sphères noires) et de nickel (sphères blanches) ainsi que trois des principaux modes de sollicitation.	4
Figure 1.2	Effet de l'emplacement dans la chambre thermique, 450°C, 600s. Test effectué à une déformation de 8%, 0,15%/s	32
Figure 1.3	Porte-échantillon pour traitement thermique	33
Figure 2.1	Ishikawa diagram of the main factors influencing the mechanical	38
Figure 2.2	Schematic and actual thermocouples set up.	39
Figure 2.3	Stress-strain curve for the first 20 cycles for an 8% strain amplitude and 0.105 mm/s elongation rate.	41
Figure 2.4	(a) Stress-strain and surface temperature variations when a discontinuity occurs for the 1st cycle. (b) Surface temperature variations as a function of time for the 10th cycle.	42
Figure 2.5	Residual strain as a function of number of cycles for the first DOE: (a) 2%, (b) 5% and (c) 8% strain amplitude.	43
Figure 2.6	Residual strain as a function of cycle number, with a pause after the 50th cycle for selected experiment: (a) 5% strain amplitude (3600 s pause) and (b) 8% strain amplitude (600 s pause)	45
Figure 2.7	Comparison of the influence of the pause on the a) residual strain and b) and c) mechanical hysteresis as a function of the number of cycles	46
Figure 2.8	From top to bottom: pause times of 5, 20, 50, 70 and 95 seconds. The left graphs show stress-strain curves and the right graphs give the evolution of the surface temperature during the pause.	49
Figure 2.9	General diagram for surface temperature variation of NiTi sample under cyclic loading	51
Figure 2.10	Surface temperature (thermocouple 2) at different elongation rates: a) 1.05 mm/s, b) 0.105 mm/s, and c) 0.0105 mm/s	53
Figure 2.11	Stress-temperature state diagram	54

Figure 2.12	Procedure for the validation of the thermal-effect hypothesis: (a) 11th cycle (measured), (b) 11th cycle (measured and fitted points) and (c) 12th cycle (calculated and measured)	55
Figure 2.13	Thermal-effect hypothesis applied to a sample with a different loading history: (a) cycle 20, with modeled data, and (b) cycle 21, with calculated data (equation (1)).	56
Figure 2.14	Typical first cycle illustrating the thermal effect.	57
Figure 3.1	Graphical representation of the kinetic transformation rule equation (3.6)	69
Figure 3.2	Visual representation of the one-dimensional virtual space	71
Figure 3.3	Determination of rule 30, according to Wolfram [35].	72
Figure 3.4	(a) Cellular automata evolution and (b) minimum volume fraction of martensite as a function of time	74
Figure 3.5	Determination of the Ramberg-Osgood constants.	76
Figure 3.6	Plasticity threshold σ_y as a function of temperature superimposed on SMA state diagram.	77
Figure 3.7	Residual strain accumulation	78
Figure 3.8	Different residual strains corresponding to different values of n for the same volume fraction ratio of 0.995.	79
Figure 3.9	Model construction diagram for the calculation of the next state considering the material constants, the loading and the previous state	83
Figure 3.10	Characterization of the Ramberg-Osgood constant from an experimental stress-strain curve.	84
Figure 3.11	Typical superelastic cycle exhibiting strain accumulation	86
Figure 3.12	Example of thermal cycling with strain accumulation, 5 cycles shown	87
Figure 3.13	Shape-memory effect with strain accumulation	88
Figure 3.14	Tensile test to illustrate the stress plasticity.	89
Figure 3.15	Schematics of the applied load on the sample (cycling rate of 50 N/s)	90
Figure 3.16	a) Stress-strain curves for the experimental and b) for the simulated procedures.	91

Figure 3.17	Different contributions of the algorithm to the residual strain	92
Figure 3.18	Effect of a 60 s pause at 0 N during cycling for a) experimental and b) simulated data.	93
Figure 3.19	5 cycles at 4 K higher than A_f for a) experimental and b) simulated data	94
Figure 4.1	Graphical representation of the kinetic transformation rule of equation (4.6).	107
Figure 4.2	Graphical representation of the kinetic transformation rule of equation (4.19).	113
Figure 4.3	Graphical determination of the new material constants.	113
Figure 4.4	Effect of temperature on the transformation kinetics: a) $T = T_I$, b) $T > T_I$ and c) $T < T_I$	115
Figure 4.5	Comparison between the stress-controlled and strain-controlled formulations of the Likhachev model.	121
Figure 4.6	Loading at three different temperatures (without degradation)	122
Figure 4.7	Experimental curves: two superelastic cycles at 328 K.	123
Figure 4.8	Simulated curves: two superelastic cycles at 328 K	123
Figure 4.9	Loading in different directions.	124
Figure 4.10	Simulation of stress-generation with temperature	125

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

AMF	Alliages à Mémoire de Forme
ANN	Réseau de neurone artificiel
ASM	American Society of Metals
ASME	Assisted Shape Memory Effect
ASTM	American Society for Testing and Materials
at	atomique
CRIAQ	Consortium de Recherche et d'Innovation en Aérospatiale au Québec
DOE	Design of Experiment
DSC	Differential Scanning Calorimetry
ÉTS	École de technologie supérieure
LAMSI	Laboratoire sur les Alliages à Mémoire et les Systèmes Intelligent
MET	Microscope électronique à transmission
NiTi	Nickel-Titane
NY	New York
SHPB	Split Hopkinson Pressure Bar
SMA	Shape Memory Alloy
USA	United States of America
wt	weight

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

m	mètre
mm	millimètre
%	pourcentage
S	seconde
Hz	Hertz
K	Kelvin
mK	milliKelvin
°C	degré Celcius
kg	kilogramme
J	Joule
mJ	milliJoule
MJ	MégaJoule
Pa	Pascal
MPa	MégaPascal
GPa	GigaPascal
W	Watt
Ν	Newton
mm/s	millimètre par seconde
%/s	pourcentage par seconde
N/s	Newton par seconde
J/m ³	Joule par mètre cube

INTRODUCTION

De nombreux domaines scientifiques ont recours à l'utilisation de méthodes numériques pour la résolution de problèmes. Avec les ordinateurs actuels, les possibilités de calculs et de simulations des propriétés des matériaux sont à la portée d'un plus grand nombre d'entreprises. Il est avantageux, tant sur le plan économique que sur le plan du design, d'avoir de bons modèles pour décrire le comportement de l'alliage. La simulation numérique remplace en effet de plus en plus la méthode de développement par prototype fondée sur une approche dite par « essais et erreurs ». Cependant, il importe d'avoir des modèles de simulation adéquats et fiables.

Depuis quelques années, le Laboratoire sur les Alliage à Mémoire et les Systèmes Intelligents (LAMSI) de l'ÉTS travaille sur des projets qui impliquent les alliages à mémoire de forme (AMF). Les modèles actuellement utilisés pour étudier le comportement des AMF au sein de diverses applications fonctionnent très bien en régime quasi-statique. Que ce soit pour des applications profitant de l'aspect mémoire de forme ou de la superélasticité, les modèles actuels ont été validés et implantés dans des logiciels commerciaux (le logiciel d'analyse par éléments finis ANSYS par exemple). Par contre, lorsque la pièce étudiée est soumise à des sollicitations cycliques, les modèles actuels ne sont plus fiables, car la dégradation des propriétés fonctionnelles n'est pas considérée. Des facteurs de sécurité supplémentaires doivent donc être introduits dans l'élaboration des prototypes, réduisant ainsi l'optimisation de l'application.

Le but de la présente thèse est de proposer et valider une démarche expérimentale et théorique visant à combler cette lacune. L'objectif ultime est d'obtenir un modèle numérique validé et opérationnel permettant de prédire l'évolution des propriétés fonctionnelles des AMF lors de sollicitations cycliques.

La présente thèse sera divisée de la façon suivante. Une courte présentation de la problématique de recherche sera mise de l'avant au chapitre 1. Elle sera suivie d'une

présentation des buts recherchés, d'une revue de littérature, de la présentation de l'originalité des travaux effectués ainsi que de la méthodologie expérimentale utilisée.

Par la suite, les chapitre 2, 3 et 4 présenteront les résultats des travaux sous forme d'articles, soit publiés (chapitre 2 et 3) ou soumis pour publication (chapitre 4). Le chapitre 2 portera principalement sur l'aspect expérimental de la dégradation. De nouvelles observations expérimentales ont été en partie expliquées. Les chapitres 3 et 4 porteront sur l'aspect modélisation. Le chapitre 3 portera sur la présentation d'un modèle micromécanique incluant des modules de dégradation. Il s'agit d'une extension du modèle de Likhachev contrôlé en contrainte et température. Le chapitre 4 portera sur une description du modèle mais en contrôlant le déplacement et la température, favorisant ainsi sa possible implémentation dans un logiciel de calcul par éléments finis. Chaque article sera précédé d'une présentation sommaire qui mettra en contexte le but recherché.

CHAPITRE 1

CONSIDÉRATIONS GÉNÉRALE

1.1 Présentation générale des alliages à mémoire de forme

Depuis leur découverte dans les années 1930, les alliages à mémoire de forme (AMF) ont connu un développement que nous pouvons qualifier d'exponentiel. Très peu de travaux sur ce type d'alliage sont répertoriés avant les années 60. Puis, grâce aux développements techniques sur la fabrication des alliages, les publications sur l'utilisation à des fins commerciales des AMF ont commencé à voir le jour. Une description intéressante de l'évolution des AMF jusqu'aux années 80 se retrouve dans certains articles de revue (Hodgson 2004) ainsi que dans certains ouvrages spécialisés (Otsuka and Wayman 1998; Brailovski, Prokoshkin et al. 2003). À partir des années 80, l'industrie a cherché de plus en plus d'applications potentielles pour les AMF, en utilisant leurs propriétés particulières.

Les alliages à mémoire de forme portent ce nom car ils ont la faculté de se souvenir de l'état dans lequel ils étaient avant qu'ils ne soient déformés. Considérons un échantillon d'AMF (un fil fait d'un alliage équiatomique de titane-nickel, par exemple) initialement en phase martensitique non-orienté. Il s'agit d'une phase cristalline à basse température dont les grains n'ont pas d'orientation particulière. Considérons qu'il soit soumis à une déformation (tension-relâche). Il restera déformé aussi longtemps que le matériau restera en deçà d'une certaine température. La raison est que la martensite s'est orientée suite à l'application de la tension. Pour que l'échantillon retrouve sa forme originelle, il suffit de le chauffer au-delà d'une certaine température, A_f, afin de transformer la martensite en état austénitique. En refroidissant l'alliage à sa température initiale, il retournera en phase martensitique, comme il était avant la déformation, c'est-à-dire non-orientée. Le phénomène ainsi observé est l'effet mémoire de forme (voir figure 1.1). En réalité, il s'agit d'une transformation de phase à l'état solide (transformation martensitique), sans variation de volume. Le matériau dans l'état initial est dans une phase cristalline appelée martensite (B19', monoclinique : cette phase existe en 24 variantes, qui sont en fait différentes orientations spatiales de l'aspect

monoclinique). Lors du chauffage subséquent, les atomes se réorganisent en phase plus stable appelée l'austénite (B2, cubique). La figure 1.1 permet de visualiser l'aspect cristallin de ces phases, superposé à un diagramme standard de phase contrainte/température.



Figure 1.1 Représentation des différentes phases cristallines d'un alliage fait de titane (sphères noires) et de nickel (sphères blanches) ainsi que trois des principaux modes de sollicitation.

Une autre particularité des AMF apparaît lorsqu'ils sont en phase austénitique. Nous obtenons cette phase en augmentant la température ambiante de telle sorte que l'échantillon soit constamment au-delà de la température A_f . Lorsqu'un échantillon d'AMF dans cette phase est déformé, nous observons un phénomène appelé la superélasticité. Ce phénomène se traduit par la possibilité pour l'échantillon de subir une déformation réversible souvent qualifiée de pseudo-élastique, pouvant atteindre 8 %. On observe une hystérésis (chemins différents à l'aller et au retour) dans les courbes contrainte/déformation mesurées durant la traction/relâche. Cette hystérésis provient du fait que la contrainte de début de transformation de phase austénite-martensite (cas traction) est supérieure à la contrainte de début de

transformation de phase martensite-austénite (cas relâche). Elle est caractéristique des AMF et est une mesure de l'énergie dissipée lors d'un cycle. Sur la figure 1.1, un cycle typique de superélasticité est représenté dans le coin supérieur droit. Ce cycle se compose, lors de la traction, d'une portion austénitique élastique, suivit d'un plateau de transformation de phase et d'une portion martensitique élastique. Au niveau de la relâche, il y a une portion élastique martensitique, suivit d'un plateau de transformation inverse et d'une portion élastique austénitique.

Un fait intéressant à noter sur la figure est la présence d'une déformation plastique (déformation résiduelle), notamment sur la figure superélastique. Cette portion plastique apparaît de façon systématique lors de cycles superélastiques. Elle est formée de plusieurs contributions qui feront l'objet de plus amples explications dans les prochains paragraphes et chapitres.

Il est important de noter que la figure 1.1 montre les phases cristallines pour un alliage de titane-nickel (NiTi). Cependant, il n'y a pas seulement cet alliage qui possède la mémoire de forme. Une grande portion de la littérature sur les AMF porte sur des alliages cuivreux. Ces alliages ont des propriétés similaires aux alliages de NiTi. De plus, ils sont moins onéreux à produire. Par contre, ils sont moins stables pour des applications à long terme et ils ne sont pas biocompatibles, ce que sont les alliages NiTi. La présente thèse portera exclusivement sur l'étude des alliages NiTi.

De plus, cette figure ne montre que l'aspect en tension de l'alliage. Un point important des alliages NiTi est leur comportement asymétrique au niveau des propriétés contraintes/déformation lorsque soumis à des tests de tension et de compression. Cette particularité est décrite dans certains ouvrages et articles (Huang 1999; Brailovski, Prokoshkin et al. 2003).

1.2 Problématique et objectif de recherche

Les connaissances actuelles de la superélasticité des AMF indiquent que si un échantillon est soumis à une sollicitation cyclique, les propriétés de ce dernier évoluent en fonction, entre autre, du nombre de cycles effectué. Cette évolution se traduit notamment par l'apparition d'une déformation résiduelle, par l'abaissement du plateau de transformation de phase austénite-martensite et par une diminution de la largeur de l'hystérésis. Plusieurs excellentes publications sur le sujet seront présentées dans la prochaine section. Cependant, il ne semble pas y avoir de consensus sur la cause exacte de ces modifications et sur les effets observés, notamment s'il y a une pause dans la sollicitation. Un des buts de cette thèse est donc de comprendre de façon la plus complète possible le phénomène de dégradation des AMF sous sollicitation cyclique, avec ou sans présence de pause. Cette compréhension doit tenir compte des différents facteurs pouvant influencer les propriétés dans différents types d'applications.

Dans la littérature, il existe de nombreux modèles qui décrivent efficacement le comportement complexe des AMF, mais la majorité d'entre eux se limitent au régime quasistatique. Ainsi, la dégradation des propriétés subit lors de sollicitations cycliques est négligée. Le Laboratoire sur les Alliages à Mémoire et les Systèmes Intelligents (LAMSI) de l'ÉTS travaille sur des projets qui utilisent des composantes en AMF soumises à des charges répétitives. Les outils de calcul actuellement employés ne prennent pas en compte les phénomènes de dégradation des propriétés fonctionnelles, ce qui affecte la précision des résultats de modélisation d'un composant en AMF soumis à un chargement cyclique. De plus, de nombreux modèles de simulation nécessitent la définition de constantes difficilement caractérisables, voire impossible à déterminer expérimentalement. La présente thèse à pour but de remédier à cette lacune.

Également, les algorithmes de simulation des AMF employés par le LAMSI (quasi-statique) ne sont pas optimisés pour une application dans des logiciels de calcul par éléments finis. En effet, les algorithmes itératifs actuellement employés nécessitent des temps de calcul trop élevés pour le calcul d'une pièce de géométrie complexe. La présente thèse offre une solution

à ce problème en élaborant un algorithme facilement implantable dans un logiciel de calcul par éléments finis qui évite l'emploi d'un algorithme itératif.

Les objectifs spécifiques visés par ces travaux de recherche sont :

- Recenser les travaux en relation avec la modélisation de la dégradation des AMF par une revue de littérature,
- Comprendre les mécanismes responsables de la dégradation des AMF et interpréter certains effets observés (chapitre 2),
- -Développer un modèle constitutif permettant de prédire la dégradation des AMF de façon précise et rapide, fondé sur les théories de la transforation de phase, et en n'ayant recours qu'à un nombre restreint de constantes (chapitre 3),
- -Adapter le modèle précédemment développé afin qu'il puisse être implanté le plus efficacement possible dans un logiciel de calcul par éléments finis (chapitre 4).

1.3 Revue de littérature

1.3.1 Identification des facteurs qui influencent les propriétés

Cette section débute en traitant de certains articles se rapportant de près ou de loin à la fatigue et la dégradation des AMF. Pour bien comprendre la fatigue et les phénomènes menant à la dégradation des propriétés fonctionnelles des AMF, plusieurs auteurs se sont concentrés sur la connaissance globale des matériaux. Notamment, un diagramme de phase pour l'alliage NiTi est proposé par Otsuka et Ren (Otsuka and Ren 1999a; Otsuka and Ren 1999b). Ce type de diagramme est intéressant pour comprendre le comportement particulièrement capricieux de l'alliage NiTi, grandement influencé par le pourcentage atomique de chaque élément ainsi que par le traitement thermomécanique appliqué. Ce point est fondamental pour l'étude des AMF. Otsuka et Ren mettent d'ailleurs l'emphase sur la structure atomique de l'alliage dans leur revue. Ils présentent ainsi les différentes phases cristallines de l'alliage (austénite B2, martensite B19 et B19').

Un aspect important des AMF est le fait qu'ils possèdent une certaine asymétrie entre les propriétés observées en tension et compression. Une étude expérimentale a été effectuée sur ce phénomène entre autre par Liu et al. (Liu, Xie et al. 1998) qui, en plus d'étudier les courbes contrainte/déformation en tension et en compression, ont étudié la cristallographie de l'alliage à l'aide d'un microscope électronique à transmission (MET).

Un article intéressant sur la dégradation des AMF est celui de Hornbogen (Hornbogen 2004). Bien que ce dernier présente beaucoup d'aspects de dégradation par déformation cyclique thermique, il présente un bon compte rendu des différentes connaissances sur le sujet de la dégradation globale. Il présente une définition de la fatigue. Il la définit comme étant de l'accumulation irréversible de changements structuraux localisés dans l'alliage. Il distingue la fatigue (dégradation du matériau) de la friction interne, qu'il associe à une perte d'énergie lors du changement de phase. Il mentionne la façon de provoquer de la fatigue en créant des désordres dans le réseau cristallin durant des cycles répétés. Il mentionne que la fatigue des matériaux entraîne la formation de défauts de surface. Ces défauts peuvent s'accumuler jusqu'à former des fissures (relativement petites). Il explique l'influence de la préparation de l'échantillon (traitement thermique) sur les propriétés de l'échantillon. L'augmentation de la dureté de l'échantillon par traitement adéquat permet d'obtenir une plus grande stabilité sur des échantillons soumis à des déformations cycliques. Il termine en énonçant neuf points à travailler pour produire des alliages résistant à la dégradation. Il faudrait maximiser la dureté de l'austénite, le degré d'ordre cristallin, le nombre de précipités cohérents et le point de fusion. Il faudrait par contre minimiser le changement de volume de la transformation, le rapport de la déformation totale sur la déformation du plateau de transformation de l'austénite en martensite, la diffusion atomique, la fragilité des frontières intergranulaires et l'incompatibilité structurelle de l'alliage.

Hornbogen mentionne également de nombreuses applications des AMF, notamment dans la fabrication de prothèses endovasculaires (stents). Pour ce type d'application, l'alliage est soumis à au moins 10 millions de cycles dans sa vie utile (Hornbogen 2004). Par conséquent, certains auteurs se sont penchés sur l'étude de la propagation des fissures dans les AMF. La

particularité des expérimentations effectuées par McKelvey et Ritchie (McKelvey and Ritchie 1999) sur la propagation des fissures est qu'ils ont effectué leurs expériences à 37°C dans l'air, dans l'eau et dans une solution semblable au plasma sanguin. Les conclusions auxquelles ils sont parvenus sont : 1- la résistance à la propagation des fissures est relativement faible dans l'alliage 55wt%Ni-45wt%Ti (ce point revient chez plusieurs auteurs) et 2- l'élongation résiduelle observée dans les courbes de contrainte-déformation semble plafonner à 60 cycles. Ce nombre de cycles est en accord avec Moumni et al. (Moumni, Van Herpen et al. 2005), mais en désaccord avec Piedboeuf et al. (Piedboeuf, Gauvin et al. 1998) et Nemat-Nasser et Guo (Nemat-Nasser and Guo 2006) qui en proposent 100, et avec Dolce et Cardone (Dolce and Cardone 2001) qui en proposent seulement 20. Néanmoins, tous s'accordent pour affirmer que les propriétés évoluent rapidement durant les premières

Une autre application des AMF, nécessitant une bonne connaissance de la dégradation des propriétés fonctionnelles, est l'utilisation de la propriété d'amortissement de l'alliage (dissipation en énergie) pour fabriquer des systèmes d'amortisseurs sismiques. Un des premiers articles proposant une démarche expérimentale de quantification expérimentale du facteur d'amortissement des AMF en mode superélastique est celui de Piedboeuf et al. (Piedboeuf, Gauvin et al. 1998). Dans leur étude, ils ont décidé de ne pas tenir compte de l'effet de la dégradation des premiers cycles, en éduquant l'alliage. Le but étant de stabiliser l'échantillon. Ils ont développé un modèle énergétique basé sur les transformations de Fourier (Fast-Fourier Transform). Ils concluent que l'effet de la fréquence empêche la dissipation de l'énergie de transformation de phase, influençant ainsi la dite transformation. L'effet combiné de la température et de la fréquence est donc important. Plusieurs auteurs ont également noté ce point, comme nous le verrons ultérieurement.

dizaines de cycles pour ensuite se stabiliser.

Tamai et Kitagawa (Tamai and Kitagawa 2002) ont fait une étude intéressante sur la dissipation d'énergie d'un alliage Ti-54,55wt%Ni-Co. La méthode expérimentale avait pour but de déterminer plusieurs modes (fréquence, amplitude) potentiels d'applications. Les résultats obtenus montrent qu'avec un traitement thermique adéquat, la résistance à la fatigue

augmente. La contrainte amorçant la transformation dépend de la température ambiante. Cette particularité intéressante est également un point important des travaux de Eggeler et al. (Eggeler, Hornbogen et al. 2004) qui en tiennent compte dans leurs études. Ils notent également le fait que le taux d'accumulation de la déformation résiduelle décroît avec l'augmentation du nombre de cycles.

Van Humbeeck (Van Humbeeck 2003) a fait plusieurs constats sur ce qui affecte l'amortissement dans les AMF. Notamment, que la perte d'amortissement par déformation cyclique peut être récupérée par une pause dans les cycles. Toutefois, il n'approfondi pas le sujet. Sur les fissures, il mentionne qu'elles se développent plus rapidement dans le NiTi que dans d'autres AMF (même constat que McKelvey et Ritchie (McKelvey and Ritchie 1999)), mais quelles sont plus stable dans l'austénite que dans la martensite. Eggeler et al. (Eggeler, Hornbogen et al. 2004) obtiennent d'ailleurs un résultat similaire en indiquant que les fissures se propagent moins rapidement dans l'austénite que dans la martensite.

Revenant sur la reprise des propriétés fonctionnelles après une pause, il est intéressant de mentionner les travaux de Wagner et al. (Wagner, Nayan et al. 2008) sur la déformation de l'alliage à l'état martensitique. Ils proposent une méthode de guérison (healing) consistant à chauffer l'alliage au-delà de la température A_f pour une brève période, puis de refroidir à la température martensitique. L'effet obtenu est le même que lors d'une pause en déformation cyclique en phase austénitique.

Il est important de mentionner que la plupart des articles mentionnés ci-haut font l'état d'études réalisées à partir de fils d'AMF relativement fins (diamètres compris entre 0,1 et 5 mm). Il n'y a que dans les applications sismiques où certains auteurs parlent de fils de plus grand diamètre. L'article de DesRoches et al. (Desroches, McCormick et al. 2004) porte sur l'aspect dimensionnel des échantillons de titane-nickel. Ils ont étudié la relation entre la dimension du barreau de nitinol (variant de 1,8 à 25,4 mm), la fréquence et différentes propriétés du matériau. Ils ont regardé la contrainte de plateau en chargement σ_L , la contrainte de plateau en décharge σ_{UL} , la déformation résiduelle et l'amortissement visqueux

équivalent. Malgré les quelques différences, la forme des courbes est comparable pour les différentes dimensions étudiées, ce qui laisse supposer que le comportement global d'un alliage donné est indépendant de la taille des échantillons.

Une approche particulière sur l'étude de la dégradation des AMF est celle apportée par Brinson et al. (Brinson, Schmidt et al. 2004). Ils ont étudié la fatigue in-situ par déformation cyclique sous microscope optique. Pour pouvoir prendre des photos, ils ont, par moment, arrêté la transformation, ce qui affecte légèrement les courbes contrainte-déformation. Ils ont démontré que la transformation martensitique et l'accumulation de martensite résiduelle n'a pas lieu seulement à la frontière des grains. Elle se produit au travers des grains de l'alliage, de façon aléatoire (variantes de martensite aléatoires). En fait, ils concluent que la transformation martensitique n'a pas seulement lieu en bandes localisées (Luders-like bands (Sittner, Liu et al. 2005)), mais que cette transformation a également lieu en des points isolés, tout au long de l'échantillon.

Une technique d'analyse très intéressante est celle employée par Schmidt (Schmidt 2006). Il a analysé des échantillons de Ti-50,9at%Ni sous forme de fils. Il a soumis ces fils à des tests cycliques en traction. Un thermographe a permis d'observer la variation de température à la surface de l'échantillon en fonction de la transformation de phase. Il a observé qu'il y a concentration de transformations en bandes horizontales (bandes de Luders). Par la suite, il présente un modèle qu'il sait imparfait (entre autre ne traitant pas de la dégradation des propriétés fonctionnelles) afin de calculer le module de rigidité E. Ce modèle prend en compte la déformation de transformation (E_A et E_M étant les modules de Young de l'austénite et de la martensite, ε^{Tr} étant la déformation de transformation et ε_{max}^{Tr} la déformation maximale de la fin de la transformation):

$$E = E_A - \frac{\varepsilon^{Tr}}{\varepsilon_{\max}^{Tr}} (E_A - E_M)$$
(1.1)

Il propose ensuite de reconsidérer le modèle sous divers aspects, notamment de tenir en compte la dégradation des propriétés et de considérer deux modèles, un pour la charge et un pour la décharge.

Gall et al. (Gall, Sehitoglu et al. 2001) ont étudié en tension et en compression un monocristal de Ti-50,8at%Ni. Ils ont également démontré la grande influence de l'interaction des plans de martensite, avec les précipités, sur l'évolution des propriétés fonctionnelles de l'alliage, soumis à une contrainte cyclique. Ils ont étudié l'alliage en contrainte sous l'angle cristallographique en impliquant les facteurs de Schmid. L'aspect le plus important de l'article est une remarque sur ce qui s'apparente à une pause durant les cycles. Ils mentionnent que si un échantillon ayant été soumis à un certains nombres de cycles (présence de déformation résiduelle), que cet échantillon est laissé libre de contrainte jusqu'à ce qu'il reprenne la température ambiante, puis qu'il est soumis de nouveau à une sollicitation cyclique, alors il n'aura pas subit de modifications (reprise) sur les propriétés fonctionnelles qu'il avait perdues. Ceci va à l'encontre de Van Humbeeck (Van Humbeeck 2003).

Un autre article de Gall et Maier (Gall and Maier 2002) présente une étude sur les monocristaux de Ti-50,9at%Ni. Cette fois, ils s'attardent sur l'influence des précipités de Ti₃Ni₄. Les conclusions qu'ils obtiennent sont intéressantes car elles permettent de comprendre la raison de l'étude micromécanique des AMF. Premièrement, ils ont remarqué que de petits précipités (inférieurs à 100 nm) permettent une meilleure résistance à la dégradation. Ensuite, si les précipités sont cohérents (alignement), la martensite est plus stable et il y a peu de dislocations dans le matériau. Par contre, si les précipités sont incohérents, les dislocations sont plus fréquentes et la stabilité de la martensite est seulement locale.

Un aspect important des AMF est le vieillissement. Le vieillissement est surtout présent dans les alliages à base de cuivre. Il s'agit d'une modification des propriétés en fonction du temps. L'alliage de titane-nickel est réputé être résistant au temps. Partant de ce point, Zhang et al. (Zhang, Ren et al. 1999) ont étudié l'équilibre entre le nickel et le titane (équilibre Ti-Ni et Ti_3Ni_4) dans un alliage Ti-51at%Ni. Cet équilibre est stable à long terme, ce qui permet une stabilité générale de l'alliage.

Torra et al. (Torra, Isalgue et al. 2001) pour leur part étudient de façon plus précise l'alliage Cu-Zn-Al. Ils posent que la température de transformation M_s est fonction du temps et de la température ambiante tel que :

$$M_{s}(t) = M_{s}(T^{0}) + a_{1}(T^{1}(t) - T^{0}) + a_{2}(T^{2}(t) - T^{0})$$
(1.2)

Les termes a_1 et a_2 étant des constantes empiriques, t le temps, T⁰ la température ambiante et T¹ et T² des températures internes de l'échantillon. Ils avancent ensuite que ces effets observés sur les alliages cuivreux de façon macroscopique sont aussi présents dans le NiTi, mais à plus petite échelle.

Finalement, Belyaev et al. (Belyaev, Petrov et al. 2004) ont utilisé la technique de compression Split Hopkinson Pressure Bar (SHPB). Cette technique permet d'étudier la compression excessivement rapide de l'échantillon (même méthode que celle utilisée par Nemat-Nasser et Guo (Nemat-Nasser and Guo 2006)). Ils ont proposé un modèle de déformation et de contrainte basé sur les relations classiques de cette technique (A_s étant l'aire de la section de l'échantillon, A_b l'aire de la barre soutenant l'échantillon, E le module de Young, $\varepsilon(t)$ la déformation en fonction du temps, les indices I, R, T indiquent les ondes incidentes, réfléchies et transmises et $\sigma(t)$ est la contrainte en fonction du temps) :

$$\varepsilon(t) = \int \dot{\varepsilon}(\tau) d\tau$$

$$\sigma(t) = \frac{A_b E}{2A_c} (\varepsilon_I + \varepsilon_R + \varepsilon_T)$$
(1.3)

En somme, nous pouvons résumer cette section en mentionnant que nombre de facteurs influencent les propriétés fonctionnelles des alliages à mémoire de forme lors de sollicitations cycliques. Il y a, sans ordre précis, le temps, la température, la vitesse à laquelle

sont effectuée les cycles, le nombre de cycles effectués, la contrainte atteinte lors des cycles, la présence d'une pause lors de la sollicitation, la composition de l'alliage, la présence de défauts dans le cristal et la qualité de la surface des échantillons.

1.3.2 Références générales sur la dégradation des matériaux

De façon générale, la dégradation des matériaux est produite par trois types de facteurs :

 i) les facteurs intrinsèques comme les défauts structuraux, les impuretés et les défauts de surface,

ii) les facteurs mécaniques, soit le type de sollicitation (monotone, cyclique, tension, compression, torsion), la durée ou la grandeur des contraintes externes, et

iii) les facteurs environnementaux (milieu environnant, température).

Ces facteurs interagissent généralement entres eux. Une bonne revue de base de ces facteurs se retrouve dans le livre de Baïlon et Dorlot (Baïlon and Dorlot 2000). Dowling (Dowling 1999) a pour sa part écrit un livre général sur le comportement mécanique des matériaux. Les chapitres 11 à 14 du livre sont très intéressants puisqu'ils présentent des modèles sur l'aspect cyclique de l'étude des matériaux. Puisque la plupart des articles de la présente revue décrivant des aspects expérimentaux traitent de la fatigue et de la dégradation des AMF (fatigue classique et fatigue due à l'aspect particulier des AMF), il est important de bien cerner la notion de fatigue dans les métaux. Tout d'abord, il y a le livre de Bannantine et al. (Bannantine, Comer et al. 1990) traitent de l'aspect expérimental de la fatigue des métaux. Le livre de Bolotin (Bolotin 1999) traite exclusivement de la mécanique de la fatigue, tant chez les métaux que chez les polymères. Il constitue une excellente ressource concernant les notions théoriques avancées sur le sujet. De même, le site internet de l'ASM (ASM) (anciennement American Society of Metals) propose une gamme complète d'information non seulement sur la théorie, mais surtout sur les principales constantes applicables aux matériaux.

Outre la fatigue et la dégradation, la notion de plasticité des matériaux est un aspect important à comprendre. La plupart des théories de plasticité repose sur des bases de mécanique des milieux continus. Le livre de Spencer (Spencer 2004) est un excellent ouvrage de base sur ces notions. Également, l'ouvrage de Sedov (Sedov 1997; Sedov 1997) offre une vue d'ensemble très complète. Pour ce qui est d'un traitement plus théorique de l'aspect plasticité des matériaux, un ouvrage classique est celui de Hill (Hill 1998). Il traite le sujet de façon concise et ne se base que sur des considérations théoriques. Finalement, pour une présentation claire et complète de la plasticité et de différents types d'approche de dégradation dans l'étude des éléments finis, il y a le livre de Bathe (Bathe 1996) qui est un incontournable, ainsi que le livre de Zienkiewicz (Zienkiewicz and Morgan 1983).

1.3.3 Hypothèses théoriques de la dégradation des AMF

D'un point de vue plus spécifique à la présente problématique de recherche, plusieurs articles portent sur diverses théories existantes expliquant la dégradation des propriétés fonctionnelles des AMF. Dans cette section, un survol des principales théories existantes est effectué. Les différentes théories ont été classifiées ici en trois groupes, soient les bases cristallographiques, la propagation des fissures et les autres facteurs affectant la dégradation. Ces groupes ne sont pas des entités fermés, ils se recoupent souvent dans leurs propos.

1.3.3.1 Bases cristallographiques

Il y a deux principaux courants de recherche fondés sur des théories cristallographiques décrivant les AMF. Tout d'abord, notons l'apport important de Otsuka et Ren (Otsuka and Ren 1999a) qui, dans un premier article, posent les bases cristallographiques des connaissances sur l'alliage titane-nickel. Ils expliquent les relations entre la martensite et l'austénite du point de vue atomique. Ils expliquent la dépendance du temps sur la stabilité de la structure, expliquant que l'alliage NiTi est très peu sensible au vieillissement (aging).

Le second courant de recherche, basant leurs travaux et explications théoriques sur l'aspect cristallographique, se base sur l'étude des monocristaux de NiTi. Gall et al. (Gall, Sehitoglu et al. 2001; Gall and Maier 2002) étudient l'influence de l'orientation des cristaux sur la dégradation. Ils partent du modèle de glissement interplanaire pour trouver une explication

théorique de la dégradation observée. En fait, ils calculent le facteur de Schmid selon chaque orientation cristalline et vérifient l'exactitude des calculs avec les résultats expérimentaux.

1.3.3.2 Propagation des fissures

Les travaux pionniers de Melton et Mercier (Melton and Mercier 1979) sur la dégradation des AMF proposent une explication basée en partie sur la propagation des fissures. En fait, un des éléments de l'évolution des propriétés des AMF en sollicitation cyclique que proposent Melton et al. est la loi de Coffin-Manson, qui serait valide pour la déformation plastique de l'alliage :

$$N^{\beta} \Delta \varepsilon_{p} = C \tag{1.4}$$

Il est à noter que l'exposant β est défini selon le type d'alliage étudié, N représentant le nombre de cycles, $\Delta \varepsilon_p$ l'accumulation de déformation plastique et C une constante empirique.

Vaidyanathan et al. (Vaidyanathan, Dunand et al. 2000) ont étudié la propagation des fissures dans les alliages TiNi et TiNi-TiC. Ils ont proposé que l'évolution des fissures de surface de l'échantillon, menant éventuellement à la rupture, dans la phase martensite de l'alliage, se propage selon la loi classique de Paris :

$$\frac{da}{dN} = C\Delta K^m \tag{1.5}$$

Ici, ΔK est le coefficient de cohésion, d**a**/dN la variation de la longueur de la fissure (**a**) en fonction du nombre de cycles et C et m sont des constantes du matériau. L'hypothèse importante qu'ils posent pour pouvoir appliquer cette relation est que la surface doit être relativement rugueuse. Le problème avec les surfaces rugueuses est qu'elles augmentent la probabilité de génération des fissures. Il est donc prévisible que la loi de Paris s'applique.

Hornbogen et Eggeler (Hornbogen and Eggeler 2004) ont fait une distinction intéressante en ce qui concerne les propriétés fonctionnelles des AMF. Ils ont indiqué la distinction à faire

entre la fatigue classique (génération et propagation des fissures) et la détérioration des propriétés produites par sollicitation cyclique. La fatigue classique est présente sur les AMF, même si la surface est polie. Il y a un lien avec la détérioration des propriétés, car cette dégradation proviendrait en partie de la formation de défauts de surface suite aux cycles répétés. Ce type de défauts se caractérise par l'exclusion de matériau à la surface, formant des monticules ovoïdale, près des zones où il y a eu transformation de phase. Ces protubérances sont accompagnées de crevasses formant le point de départ de la propagation probable des fissures. Ils ne s'entendent pas par contre sur la détérioration des propriétés.

1.3.3.3 Autres facteurs

Outre l'aspect des fissures précédemment discuté, Melton et Mercier (Melton and Mercier 1979) proposent que la dégradation des propriétés est provoquée par l'accumulation de la déformation plastique irrécupérable ($\Delta \varepsilon_p$) causée par la réorientation de la martensite. Pour l'expliquer, ils ont développé l'expression suivante où la déformation totale ($\Delta \varepsilon_{tot}$) se décompose en trois déformations : déformation plastique ($\Delta \varepsilon_p$), déformation élastique ($\Delta \varepsilon_{el}$) et déformation pseudoélastique ($\Delta \varepsilon_{pseu}$) :

$$\Delta \varepsilon_{tot} = \Delta \varepsilon_p + \Delta \varepsilon_{el} + \Delta \varepsilon_{pseu} \tag{1.6}$$

Hornbogen (Hornbogen 2002) a fait le même constat en poussant la réflexion un peu plus loin. Selon ce qu'il propose, l'initiation des fissures est produite soit par l'accumulation de martensite ou soit par la présence dans le cristal de dislocations localisées. Il y a, à ces endroits, augmentation des contraintes ce qui provoque la génération d'une fissure.

Pour leur part, Liu et al. (Liu, Xie et al. 1998) basent leur compréhension de la dégradation des propriétés fonctionnelles des AMF sur des mécanismes microstructuraux. Ils proposent que le processus de réorientation des mailles du réseau soit responsable de l'apparition des défauts, qu'ils soient ponctuels (lacunes ou interstitiels) ou linéaires (dislocations).

Pour terminer cette section, il est important de mentionner l'approche de McCormick et al. (McCormick, DesRoches et al. 2006). Dans leur étude phénoménologique sur une éventuelle application sismique, ils ont proposé que la baisse du plateau de transformation de l'austénite en martensite est provoquée par l'apparition de glissements localisés. Cette hypothèse rejoint en quelque sorte celle de Hornbogen décrite plus haut.

1.3.4 Modélisation de la dégradation des AMF

Cette section comporte une description de certains travaux marquants sur la modélisation des AMF. Les modèles présentés concernent principalement le comportement superélastique, certains modèles sont phénoménologiques tandis que d'autres plus constitutifs. Cette section n'a pas pour but de présenter de façon exhaustive tous les modèles constitutifs permettant de modéliser le comportement des AMF. Le choix des modèles présentés ici est en grande partie basé sur la variété présentée par les modèles ainsi que l'universalité de certaines hypothèses.

Le premier modèle analysé est un modèle basé sur l'utilisation des réseaux de neurones artificiels (ANN). Il s'agit en fait d'un modèle utilisant comme point de départ des courbes superélastiques expérimentales. Le modèle est construit de façon à pouvoir, dans un premier temps, répéter les courbes de contraintes-déformations obtenues expérimentalement. Si un nombre élevé de ces courbes sont fournies au réseau de neurones, ce dernier apprendra le principe de base de leur création, puis pourra les modéliser facilement. Li et al. (Li, Cui et al. 2007) proposent ce modèle comme alternative pour modéliser rapidement et avec exactitude le comportement global des AMF. L'idée de base permet effectivement de bien modéliser la dégradation (bien qu'une partie des tests qu'ils proposent soit effectués après éducation du matériau, ce qui enlève de la généralité au modèle). Par contre, le coût expérimental pour bien quantifier le modèle est relativement élevé. Les ANN fonctionnent par convergence mathématique d'une fonction et, pour qu'il y ait bonne convergence, le modèle requiert au minimum une quarantaine de courbes, de différentes amplitudes.

Un des modèles les plus importants au niveau de la modélisation de la dégradation est celui proposé par Tanaka et al. (Tanaka, Nishimura et al. 1995). Son importance provient du fait qu'il a inspiré de nombreuses publications subséquentes. À la base, il s'agit d'une extension de son modèle bilinéaire (Tanaka 1986; Tanaka, Kobayashi et al. 1986). Dans le modèle de 1995, ils ont introduit trois nouveaux termes se rapportant à la dégradation : un terme de contrainte résiduelle microscopique σ_{ir} , un de déformation résiduelle microscopique ε_{ir} et un autre de martensite résiduelle ξ . Le plus important des trois, du point de vue calculatoire, est la contrainte résiduelle microscopique. En effet, si l'on regarde les équations (1.7) à (1.9), il est clair que ce terme permet de définir les deux autres.

$$\sigma_{ir} = S \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{V}\right) \right] \tag{1.7}$$

$$\dot{\varepsilon}_{ir} = \left(\frac{n}{A}\right) \left(\frac{\sigma_{ir}}{A}\right)^{n-1} \dot{\sigma}_{ir} + \varepsilon_{\infty ir}$$
(1.8)

$$\dot{\xi} = \Xi \dot{\sigma}_{ir} \tag{1.9}$$

où les points désignent une dérivée selon le temps et S, n, A, Ξ et v sont des constantes du matériau. Pour définir la contrainte globale Σ et la déformation globale E, les auteurs proposent les calculs suivants :

$$\Sigma = \sigma - \sigma_{ir} \tag{1.10}$$

$$E = \varepsilon + \varepsilon_{ir} \tag{1.11}$$

Les valeurs de ε et de σ sans indice indiquent la valeur initiale. Il est à noter que la proportion de martensite est utilisée dans la cinétique de transformation.

Une approche similaire à celle de Tanaka pour la forme de dégradation est celle proposé par Auricchio et al. (Auricchio, Marfia et al. 2003; Auricchio and Reali 2007). Tout d'abord, ils considèrent deux contributions à la dégradation : la présence de dislocations et l'accumulation de martensite résiduelle (permanente). En posant une seule variante de martensite, ils proposent que la fraction volumique de martensite soit la somme de deux contributions: celle irréversible et celle réversible. L'approche consiste à définir la déformation totale à partir de la déformation élastique et de la déformation associée à chacune des deux composantes de martensite. Par la suite, ils appliquent la méthode classique pour déterminer la contrainte, soit la loi de Hooke, mais avec un module de Young variant en fonction de la proportion de martensite. Finalement, pour calculer la fraction de martensite irréversible, ils proposent l'utilisation d'une fonction exponentielle, bornée par une valeur maximale de martensite irréversible.

Le modèle semble offrir des résultats intéressants. De plus, il existe une extension à ce modèle proposé par Auricchio et Reali (Auricchio and Reali 2007). Cette extension permet la compression et est validée, pour l'instant, seulement en terme théorique. Le modèle a par contre le défaut de ne pas tenir compte du taux de variation, malgré la présence d'un facteur temporel. Malgré cela, le modèle offre une avenue intéressante et est d'ailleurs implanté dans certains logiciels de calcul par éléments finis (Auricchio 2001).

Il y a un modèle assez récent sur l'utilisation d'un algorithme constitutif tridimensionnel dans un logiciel de calcul par éléments finis. Il s'agit du modèle de Thamburaja et Nikabdullah (Thamburaja and Nikabdullah 2009). Il est basé sur des considérations thermodynamiques (énergie de Gibbs et de Helmholtz), comme la plupart des modèles existants. Les résultats obtenus sont intéressants, mais encore exempts de dégradation.

Considérons maintenant le modèle de Tamai et Kitagawa (Tamai and Kitagawa 2002). Les travaux expérimentaux qu'ils ont effectués ont été la base de leur modèle. En fait, ils ont posé une série d'hypothèses pour établir des équations relativement simples. Notons tout d'abord qu'ils ont négligé l'effet de la martensite résiduelle accumulée par chaque cycle. De plus, ils ont posé que la transformation de phase se comporte de façon linéaire. Finalement, bien qu'ils considèrent le fait que la température et la contrainte appliquée sont des facteurs importants de la transformation, ils négligent la conduction thermique dans l'échantillon et la variation du module de Young provoqué par les contraintes internes. Le modèle ainsi proposé

est relativement simple. Dans le cas de la transformation directe, il se présente sous la forme suivante, par le calcul de la fraction volumique de martensite présente :

$$\xi = 1 - \exp(a_M \cdot (M_s - T) + b_M \cdot \sigma) \tag{1.12}$$

Selon le formalisme des auteurs, ξ est la fraction volumique de martensite, σ le tenseur de contraintes de Cauchy, T la température du matériau, M_s la température de début de la martensite et a_M et b_M des paramètres expérimentaux. Ce type de formulation décrit bien le comportement général de la martensite pour un seul cycle. Par contre, il ne donne pas une idée précise des subtilités des courbes réelles, le modèle étant bilinéaire.

Un autre modèle est celui présenté par Zhang et al. (Zhang, Ren et al. 1999). Ce modèle est intéressant car il prend racine dans l'analyse monocristalline. Premièrement, ils décrivent un modèle pour monocristaux. Ce modèle s'appui sur des bases viscoplastiques pour décrire la transformation de phase. Ils définissent un tenseur de déformation tenant compte de l'aspect élastique, thermique et viscoplastique. Il est à noter que le terme viscoplastique est fonction de la variante de martensite. Ce tenseur est nommé ε_{ij} . Cette approche pour déterminer la déformation est similaire à celle proposée par Melton et Mercier (Melton and Mercier 1979). Par la suite, ils appliquent l'hypothèse de Reuss, qui consiste à considérer le polycristal comme une série de monocristaux soumis à la même contrainte, et ils obtiennent une expression pour la déformation macroscopique E_{ij} :

$$E_{ij} = \frac{1}{V} \int_{V} \varepsilon_{ij} dV \tag{1.13}$$

La valeur de V est le volume du matériau, le terme ε_{ij} est le tenseur de déformation d'un grain. Ce modèle ne tient cependant pas compte du phénomène d'éducation tel que décrit auparavant.

Un modèle traitant peu de la dégradation sera maintenant examiné. Il s'agit du modèle proposé par Sadjadpour et Bhattacharya (Sadjadpour and Bhattacharya 2007). Le modèle présente certaines particularités qui valent la peine d'être mentionnées. Il s'agit tout d'abord d'un modèle micromécanique. Par conséquent, il développe des équations sur le plan microscopique et il passe au macroscopique par sommation de tous les éléments microscopiques. Dans leur article, les auteurs développent une série d'équations pour les contraintes et l'énergie libre d'Helmholtz. Ces équations dépendent de la portion élastique, de la transformation martensitique et de la déformation due à la plasticité. Ce qui est intéressant de ce modèle est la dépendance de la fraction volumique de martensite sur le taux de variation de la déformation. Ils impliquent cette dépendance dans les termes énergétiques. Cette dépendance montre donc un type de dégradation, non pas dans le temps mais en fonction du type de cycle imposé. Ceci est cohérent avec les expérimentations.

Le prochain modèle traité est obtenu par la mise en commun de plusieurs travaux. Certaines disparités apparaissent dans la formulation précise du modèle de chaque chercheur ayant contribué au modèle général décrit ci-après. Par contre, la base est la même pour tous les auteurs. Il s'agit du modèle proposé par Lagoudas, Entchev, Popov, Patoor, Brinson et Gao (Lagoudas, Entchev et al. 2006; Patoor, Lagoudas et al. 2006), basé sur les travaux de Bo et Lagoudas (Bo and Lagoudas 1999; Bo and Lagoudas 1999; Bo and Lagoudas 1999; Lagoudas and Bo 1999). Cette série d'articles décrit de façon étendue un modèle d'AMF se basant sur la thermodynamique (énergie de Gibbs) et sur l'orientation cristallographique des variantes de martensite. Il a été montré que ce modèle offre de très bons résultats si et seulement si les constantes du modèle sont définies avec précision.

La principale modification proposée par Lagoudas et al. (Lagoudas, Entchev et al. 2006) dans leur article est la possibilité de tenir compte de la dégradation d'une façon plus précise que ce qui avait été proposé par le passé. Pour ce faire, ils ont proposé de modifier l'énergie de Gibbs en y introduisant des termes de déformation plastique, de retour de contrainte et de contrainte de traînée. Par conséquent, le modèle se base sur l'étude du terme thermodynamique suivant :

$$G^{mix} = -\frac{1}{\rho}\sigma(\varepsilon^{t} + \varepsilon^{p}) - \frac{1}{\rho}\int_{0}^{\xi} \left[\alpha \frac{\partial \varepsilon^{p}}{\partial \hat{\xi}} + \eta \right] d\hat{\xi} + G_{0}^{ch} + G^{p}$$
(1.14)

où les G indique l'énergie de Gibbs (ch pour chimique et p pour interaction plastique), α la contrainte de retour, η la contrainte de traînée, ρ la densité du matériau et ξ la fraction volumique de martensite. La modification entraîne entre autre un changement au niveau de la cinétique de transformation (contrainte énergétique imposé). Il en résulte que la dégradation du matériau est bien définie. Le modèle global proposé par ces auteurs est relativement complexe, mais décrit assez bien les observations expérimentales.

Lagoudas a également publié un modèle simplifié bilinéaire ne traitant que de la superélasticité (Lagoudas, Mayes et al. 2001). Ce modèle est relativement simple à quantifier car il ne nécessite qu'un test en traction et une connaissance des températures de transition. Par conséquent, il est une avenue intéressante pour servir de base à un modèle de design.

Il est important de noter qu'au moins un autre groupe de recherche a utilisé le modèle simplifié de Lagoudas dans l'étude de la dégradation des propriétés fonctionnelles des AMF. Il s'agit de Ren et al. (Ren, Li et al. 2007). En utilisant le modèle de Lagoudas comme base, et avec une étude statistique appropriée, ils ont produit un modèle de dégradation basé sur l'étude d'un seul type d'alliage (traitement thermique fixe). Les valeurs obtenues ne dépendent cependant que du cycle étudié. Il n'y a aucune dépendance de la contrainte calculée sur la déformation atteinte ni sur le taux de déformation.

Un autre article intéressant sur la dégradation est l'approche abordé par Schmidt (Schmidt 2006). Tout d'abord, il propose une relation entre le taux de variation de la température et le taux de transformation :

$$\dot{T} = -\delta(T - T_R) + C\dot{\varepsilon}^{T_r}$$
(1.15)

où \dot{T} comme le taux de variation de température, $\dot{\varepsilon}^{Tr}$ le taux de variation de la déformation au moment de la transformation, δ un coefficient d'échange de chaleur, T la température, T_R la température ambiante et C une constante. Par la suite, il propose une modification à cette dernière en jouant sur le terme C (renommé C_{enh}) et en introduisant les constantes L, S et U:

$$C_{enh} = L + S \left[e^{U(\varepsilon^{T'}/\varepsilon_{\max}^{Tr})} - 1 \right]$$
(1.16)

L'utilité d'une telle modification est de tenir compte de la dégradation lors de la simulation.

Un modèle intéressant par sa simplicité relative est celui mis de l'avant par Macélot et al. (Malecot, Lexcellent et al. 2006). Il repose sur une base thermodynamique. Les auteurs ont déduit une relation à partir de la première loi de thermodynamique (conservation de l'énergie). Ils démontrent, en dérivant chaque terme, qu'une seule relation peut relier les variations de température de l'échantillon au module de Young et à la déformation. Il y a cependant énormément de terme à calculer et à caractériser (voir équation 1.17). Par contre, les résultats obtenus tiennent compte de l'évolution de la déformation résiduelle, ce qui est très intéressant pour des applications cycliques.

$$k\Delta T - \rho C v \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \dot{h} T z \left(\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial T} h + \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial T} \right) =$$

$$\rho \left(z_T u_0^m - \frac{E \cdot \gamma}{\rho} (\varepsilon - \gamma \cdot z + \alpha_0 T_0) - \Delta u_h^* - \Delta u^* + (1 - 2z) u_0 \right) \dot{z}_{\sigma}$$

$$+ \rho \left(z_\sigma u_0^m - \frac{E \cdot \gamma}{\rho} (\varepsilon - \gamma \cdot z + \alpha_0 T_0) - \Delta u_h^* - \Delta u^* + (1 - 2z) u_0 \right) \dot{z}_T - (z (\overline{\phi} h + \overline{\phi})) \dot{h}$$

$$(1.17)$$

Les variables sont définies de façon précise dans l'article, ici mentionnons que Δ signifie le Laplacien, T la température du système, ρ la densité, Cv la chaleur spécifique, h est la fraction de martensite résiduelle, k est un paramètre cinétique, z la fraction totale de martensite (l'indice T pour l'auto-accommodante et l'indice σ pour l'orientée), $\overline{\phi}$ et $\overline{\phi}$ des fonctions sur la force de transformation, u de l'énergie libre, E le module de Young, γ
l'élongation maximale d'une transformation complète et α le coefficient d'expansion thermique.

Lorsque le taux de variation de la martensite orientée est supérieur à zéro, il peut y avoir augmentation de la fraction volumique de martensite résiduelle, h, telle que :

$$\varepsilon_{ir} = \gamma h \tag{1.18}$$

où la valeur de γ est celle de la déformation maximale atteinte. Il y a l'imposition d'une limite sur la valeur de h, de sorte qu'il y a stabilisation de l'évolution de la déformation résiduelle. En utilisant ces données dans l'inégalité de Clausius-Duheim, ils peuvent obtenir un calcul énergétique relativement simple. Mais ce n'est pas là le plus important. L'autre contribution qu'ils ont apportée sur la dégradation des propriétés est l'utilisation d'un module de Young complexe. Celui-ci est emprunté de l'étude de l'amortissement des matériaux viscoélastiques. Par conséquent, la valeur de la contrainte est définie en fonction du temps par l'équation (1.19), où E est le module de Young et $\varepsilon(t)$ la déformation (τ étant la variable d'intégration):

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^{t} E(t-\tau) \frac{d\varepsilon(\tau)}{d\tau} d\tau$$
(1.19)

Un modèle très similaire est également traité par Lexcellent et al. (Lexcellent, Boubakar et al. 2006) dans le but d'y inclure un module thermique. Il s'agit dans leur cas d'une description purement théorique d'un modèle tridimensionnel.

Par ailleurs, plusieurs de ces modèles ont été façonnés pour pouvoir simuler l'application d'actionneur divers dans des applications en ingénierie. Il y a entre autre Seelecke et Müller (Seelecke and Muller 2004) qui utilise un modèle basé sur deux variantes de martensite et sur l'énergie libre de Gibbs. L'application sur des actionneurs se fait par calcul par éléments finis (itération de base de Newton-Raphson). Il y a également les travaux de Benzaoui et al.

(Benzaoui, Lexcellent et al. 1997) et de Leclerq et al.(Leclercq, Lexcellent et al. 1996) qui permettent une modélisation en trois dimensions d'actionneur à l'aide de logiciel de calcul par éléments finis. Dans les deux cas, le modèle de base est celui de Lexcellent décrit plas haut dans cette section. Finalement, il y a les travaux de Chang et al. (Chang, Shaw et al. 2006) ayant une base plus rhéologique et permettant la modélisation uniaxiale des AMF.

Il est bon de mentionner que l'aspect asymétrique de l'alliage a égalament été l'objet de modélisation. Les travaux de Huang (Huang 1999) offre une solution cristallographique à cette asymétrie. Ce type de résultat a été modélisé entre autre dans les travaux de Thiebaud et al. (Thiebaud, Lexcellent et al. 2007), dans les travaux d'Auricchio (Auricchio 2001) et dans ceux de Thamburaja et Nikabdullah (Thamburaja and Nikabdullah 2009). Il y a néanmoins peu d'auteurs qui traitent de cet aspect de l'alliage dans la modélisation.

Il convient de présenter les travaux effectués par Likhachev et les travaux influencés par le modèle qu'il a proposé. Ce modèle servira de point de départ théorique pour le modèle proposé dans cette thèse. Tout d'abord, suite à ses travaux expérimentaux, Likhachev (Likhachev and Malinin 1988; Likhachev 1995) a proposé un modèle théorique décrivant les AMF. Le principe de base consiste à relier les relations micromécaniques avec la mécanique des milieux continus. Pour ce faire, il considère l'apport microscopique des termes élastiques, thermiques, de transformation et de cisaillement. Ensuite, il propose de faire la moyenne dans toutes les orientations pour obtenir le tenseur de déformation macroscopique. Le modèle ne considère qu'une seule variante de martensite pour le calcul, mais considère que le solide est formé d'une multitude de régions, toutes orientées différemment dans l'espace. Ceci permet de simuler l'effet des différentes variantes. Les équations (1.20) expriment les différents termes, tel que décrit par Likhachev.

$${}_{b}\mathcal{E}_{ik} = {}_{b}\beta_{ik}^{e} + \beta_{ik}^{\Phi} + {}_{b}\beta_{ik}^{I} + {}_{b}^{r}\beta_{pq}^{a}$$

$${}_{b}\dot{\beta}_{ik}^{e} = \left(C_{rlts}^{b}\dot{\tau}_{pq} + \frac{\partial C_{rlts}^{b}}{\partial T}\tau_{pq}\dot{T}\right) (\chi_{ir}\chi_{kl}\chi_{pt}\chi_{qs}\Delta_{bM} + \delta_{ip}\delta_{kq}\Delta_{bA})$$

$$\dot{\beta}_{ik}^{\Phi} = D_{ik}\Phi$$

$${}_{b}\dot{\beta}_{ik}^{T} = \gamma_{pq}^{b}(\chi_{ip}\chi_{kq}\Delta_{bM} + \delta_{ip}\delta_{kq}\Delta_{bA})\dot{T}$$

$${}_{b}\dot{\beta}_{pq}^{a} = A_{b}\frac{{}_{b}\overline{\tau}_{pq}^{r}}{T_{\tau}^{b}} (\dot{T}_{\tau}^{b} - {}_{b}\dot{\tau}_{o}^{s})H(T_{\tau}^{b} - {}_{b}\dot{\tau}_{o}^{s})(\chi_{ip}^{o}\chi_{kq}^{o}\Delta_{bM} + \delta_{ip}\delta_{kq}\Delta_{bA})$$

$$(1.20)$$

Dans ces équations, les points définissent la dérivée par rapport au temps, ${}_{b}\varepsilon_{ik}$ le tenseur de déformation macroscopique, ${}_{b}\beta^{e}_{ik}$ la microdéformation élastique, β^{Φ}_{ik} la microdéformation thermique, ${}_{b}^{F}\beta^{a}_{pq}$ la microdéformation de cisaillement, C^{b}_{rlts} les tenseurs de module élastique, τ_{pq} les tenseurs de microcontraintes, T la température, χ_{ir} des composantes de la matrices de rotation spécifique au réseau, Δ_{bM} terme similaire à un delta de Kronecker, δ_{ip} le tenseur identité, D_{ik} le tenseur de transformation de déformation de la proportion de martensite, γ^{b}_{pq} le tenseur d'expansion thermique et A_{b} la constante de durcissement. Il est à noter que les indices et les exposants peuvent changer la signification spécifique de certaines valeurs.

Le modèle de Likhachev présenté dans le paragraphe précédent est le plus simple présenté dans l'article. Par la suite, il précise certaines modifications qui peuvent modifier l'aspect du modèle et le rendre plus près de la réalité. Certains auteurs ont travaillé sur ce modèle, notamment Evard et Volkov (Evard and Volkov 1999; Evard and Volkov 1999; Brailovski, Prokoshkin et al. 2003). Ils ont apporté des modifications au modèle de Likhachev pour tenir compte de la dégradation. Leur contribution à ce modèle est par l'introduction de la microplasticité, tel que montré dans l'équation (1.21) pour la déformation d'un grain :

$$\varepsilon^{gr} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} D_n (\Phi_n + \Phi_n^p)$$
(1.21)

où N est le nombre de variantes par grains, D_n la matrice de déformation de la variante n, Φ_n la fraction volumique de martensite de la variante n et Φ_n^p la fraction de martensite déformé par microplasticité. Cet ajout relativement simple est plus complexe qu'il n'y paraît à calculer. En effet, les valeurs de fraction volumique de martensite dépendent de la cinétique de transformation et de la valeur de l'énergie de Gibbs selon une valeur de référence. Ceci implique l'introduction d'une force thermodynamique de friction entre les grains de l'alliage lors de la transformation de phase. Par conséquent, il y a contribution des contraintes internes à la dégradation.

D'autres auteurs ont utilisé le modèle de Likhachev pour introduire les notions de dégradation. Il y a entre autre les travaux de Breczko et Kus (Breczko and Kus 2001; Breczko and Kus 2002) qui introduisent une contribution purement exponentielle dans le calcul des contraintes et déformations. Cette fonction exponentielle est similaire en certains points à l'approche de Tanaka discutée auparavant dans ce chapitre. Il y a également l'article de Wong et al. (Wong, Boissonneault et al. 2005) sur une application simplifiée du modèle de Likhachev à l'étude de micro-actionneurs. Cette approche repose sur un aspect discret du matériau, en considérant un nombre relativement faible de sous-régions (entre 100 et 200).

Pour terminer cette section, nous pouvons retenir qu'il existe de nombreuses approches à la modélisation des alliages à mémoire de forme. La plupart des approches présentées dans cette section donnent des résultats satisfaisants quant à la qualité de la modélisation. Par contre, pour les fins de la présente thèse, une attention plus particulière sera porté sur le modèle de Likhachev. Les principales raisons motivant le choix de ce modèle sont les suivantes. Tout d'abord, le modèle de Likhachev a la particularité d'être relativement simple à caractériser et il ne comporte que quelques constantes ad-hoc. De plus, de par sa formulation micromécanique, il est relativement aisé d'y inclure de nouvelles contributions

théoriques. Finalement, il s'agit du modèle déjà utilisé au sein du LAMSI, donc un bassin de connaissances connexes au modèle est disponible.

1.4 Originalité des travaux

Le but poursuivi par les travaux de recherche exposés dans le présent document est de développer et valider un modèle décrivant la dégradation des AMF soumis à des sollicitations cycliques. Le développement d'un tel modèle facilitera la conception et l'optimisation des composantes en AMF employées au sein d'une multitude d'applications industrielles. Parmi les principaux projets menés au LAMSI qui pourront bénéficier de ces travaux, on note le projet de l'aile déformable (projet CRIAQ) capable de modifier sa forme grâce à des actionneurs en AMF afin d'offrir les performances aérodynamiques optimales (réduction de la consommation de carburant). Il y a aussi la conception de prothèses endovasculaires (stents) en AMF, ces dernières étant soumises à une sollicitation cyclique causée par la pression sanguine variable.

Suite à la revue de littérature, malgré le fait que plusieurs travaux portent sur la modélisation des AMF, peu d'entres eux portent un regard précis sur les sollicitations cycliques. De plus, parmi les modèles simulant l'aspect cyclique des AMF, très peu d'entre eux offrent une approche intéressante pour étudier la dégradation dans des applications concrètes. Souvent, les modèles sont lourds à caractériser correctement. Ils présentent les principaux aspects observés expérimentalement qui affectent la dégradation tels la température, la fréquence, la portion de martensite formé et la martensite résiduelle.

Par contre, dans le cas d'applications industrielles réelles, il arrive fréquemment que la sollicitation cyclique ne soit pas en continue. Dans de tels cas, la sollicitation peut se produire de façon continue pendant un certain temps, subir une pause, puis recommencer. Certains auteurs discutent vaguement de l'effet d'une pause dans le processus cyclique sans toutefois décrire de façon extensive son influence. D'ailleurs, sur certains points, il y a contradiction dans la description du phénomène tel que rescencé par les auteurs. Une

clarification du phénomène doit donc être faite. Ce type de sollicitation n'a jamais été modélisé, à notre connaissance.

Par conséquent, une des originalités du travail qui est décrit dans ce document provient entre autre de l'étude de l'apport d'une pause lors de la sollicitation cyclique dans le but de quantifier l'effet observé. Ceci constituera l'aspect expérimental de cette thèse et sera développé au chapitre 2.

Également, l'utilisation de la théorie des automates cellulaires et d'un modèle empirique dans une adaptation du modèle micromécanique de Likhachev (Likhachev 1995) permettra l'élaboration d'un modèle hybride tenant compte de la dégradation et de l'effet d'une pause dans le chargement cyclique. Ce modèle a pour but principal d'offrir une capacité de modélisation du comportement de l'alliage tout en étant facilement caractérisable. Les outils mathématiques présentées n'ont pas été à ce jour, à la connaissance de l'auteur, utilisés pour modéliser les AMF. Le modèle ainsi développé sera présenté au chapitre 3.

Finalement, l'obtention d'une version du modèle de Likhachev simplifié (discret et n'ayant que trois termes) et contrôlé en contrainte et en température, est adaptée afin de pouvoir l'implantée dans un logiciel de calcul par éléments finis où les paramètres de contrôle sont la température et la déformation. Une telle adaptation n'a pas été faite à ce jour. L'article rapportant ces développements sera présenté au chapitre 4.

1.5 Méthodologie

Le choix de l'alliage pour effectuer ce travail de recherche a été fait en se basant sur plusieurs critères. Tout d'abord, le choix d'un alliage de titane-nickel repose essentiellement sur la stabilité de cet alliage dans le temps, sur sa biocompatibilité et sur le fait qu'il représente l'alliage ayant le plus gros volume industriel. Cet aspect est assez important au niveau d'application potentiel de la théorie qui sera développé grâce à ce travail. Par conséquent, un alliage de Ti-50,6at%Ni de la compagnie Special Metals, fourni sous la forme

d'un fil d'un diamètre de 2 mm, a été choisi. Cet alliage est fourni tel quel par la compagnie (as drawn). Par conséquent un traitement thermique adéquat doit être appliqué à nos échantillons pour pouvoir étudier la dégradation de l'alliage en mode superélastique.

Le choix du traitement thermique à appliquer aux échantillons est un sujet délicat. Dans le cas des alliages à mémoire de forme, le traitement thermique est ce qui permet à l'échantillon d'avoir ses propriétés particulières. Une faible variation dans les paramètres (température, temps de chauffe, trempe, etc.) du traitement appliqué provoque une variation appréciable des propriétés de l'alliage. Un exemple est donné à la figure 1.2, où une superposition de quatre courbes faites selon les mêmes paramètres (même porte-échantillon (positionnement dans le porte-échantillon est différent), même traitement simultané) montre une bonne différence dans le résultat. Les quatre échantillons ont été soumis simultanément au même traitement, mais leur positionnement dans le four était légèrement différent. Le temps de traitement relativement faible de 600 secondes (10 minutes) explique ici la non-uniformité des résultats. Il est donc important d'effectuer un traitement assez long pour minimiser l'influence du positionnement relatif des échantillons dans le porte-échantillon dans le four.



Figure 1.2 Effet de l'emplacement dans la chambre thermique, 450°C, 600s. Test effectué à une déformation de 8%, 0,15%/s.

Le traitement thermique choisi pour la présente étude consiste à mettre au four les échantillons pendant 3600 secondes (une heure), à 450°C, puis à effectuer une trempe rapide dans l'eau à température pièce. Le porte échantillon utilisé est montré à la figure 1.3. Il peut accueillir 8 fils simultanément. Le fait que le porte-échantillon soit fait de deux plateaux montés axialement sur une tige filetée permet d'avoir une certaine pré-tension dans le traitement thermique. Pour notre étude, aucune pré-tension n'est appliquée. Par contre, le porte-échantillon a servi à rendre le fil rectiligne.



Figure 1.3 Porte-échantillon pour traitement thermique.

Ce traitement permet d'avoir des échantillons stables qui ont de bonnes propriétés de dégradation. Les propriétés mécaniques de l'échantillon varient avec le nombre de cycles, tout en se stabilisant après un certain nombre de cycles. Ceci est consistant avec les descriptions de l'évolution générale des AMF tel que décrit précédemment.

Dans la présente thèse, la dégradation des propriétés fonctionnelles de l'alliage a été caractérisée à l'aide de l'étude des courbes contraintes/déformations en tension à une température supérieure à A_f (superélasticité). De façon plus précise, l'approche adoptée pour obtenir le maximum d'information avec le minimum de mesures expérimentales est l'utilisation d'un plan d'expérience adéquat. En l'occurrence, un modèle statistique de Box-Behnken (Montgomery 2005) a été développé selon les critères voulant être étudiés (vitesse de déformation, temps de pause, déformation maximale). Les détails expérimentaux se retrouvent dans le chapitre 2.

Pour ce qui est de l'approche théorique employée (chapitres 3 et 4), les concepts mathématiques suivants ont été utilisés. Tout d'abord, le modèle qui a été employé pour décrire les AMF est celui de Likhachev, tel que décrit dans la section 1.3. Le modèle se base

sur la mécanique des milieux continus, branche de l'ingénierie qui se décrit bien à l'aide du calcul tensoriel. Par conséquent, les développements théoriques reposent sur une notation tensorielle.

L'aspect théorique le plus nouveau pour le domaine du génie mécanique qui sera exploité dans le chapitre 3 est la notion d'automate cellulaire. Cette branche des mathématiques qui utilise le comportement de «cellules» lors d'une évolution temporelle sera utilisée pour introduire un comportement résiduel irrécupérable dans l'alliage. Une description théorique sur les automates cellulaires se trouve dans les ouvrages suivants, traité de façon mathématiques, grand public et physique respectivement (Wolfram 1994; Wolfram 2002; Chopard and Droz 2005). Une brève introduction sur ce sujet est néanmoins fournie au chapitre 3.

Enfin, dans le chapitre 4, les notions mathématiques utilisées relèvent principalement de l'algèbre linéaire. Certaines hypothèses physiques seront utilisées afin d'obtenir une formulation du modèle du chapitre 3 mieux adaptée aux éléments finis où les paramètres de contrôle sont la température et la déformation plutôt que la température et la contrainte.

CHAPITRE 2

ARTICLE 1: ON THE PARTIAL RECOVERY OF RESIDUAL STRAIN ACCUMULATED DURING AN INTERRUPTED CYCLIC LOADING OF NITI SHAPE MEMORY ALLOYS

Paradis, A.¹, **Terriault, P.**¹ (corresponding author[†]), **Brailovski, V.**¹, **Torra, V.**²

¹ Département de Génie Mécanique, École de Technologie Supérieure, 1100, Notre-Dame

Street West, Montréal, Qc, Canada, H3C 1K3

² CIRG-DFA-ETSECCPB-UPC, Campus Nord B-4, E-08034 Barcelona, Spain

[†] E-mail: <u>patrick.terriault@etsmtl.ca</u>, phone :1-514-396-8518, fax :1-514-396-8530 Cet article a été publié dans la revue <u>Smart Materials and Structures</u>, Vol. 17, No. 6, Dec 2008, doi :10.1088/0964-1726/17/6/065027.

Résumé

Il est bien connu que les propriétés fonctionnelles des AMF évoluent lorsque soumis à une sollicitation cyclique. Par exemple, lors d'une sollicitation superélastique, une augmentation de la déformation résiduelle est observée avec l'augmentation du nombre de cycle, tout particulièrement dans les premiers cycles. Cet article à pour but de démontrer, en premier lieu, qu'une portion de cette accumulation, qui était considérée irréversible, est en fait récupérable. En second lieu, il sera montré qu'après une pause dans la sollicitation, il y a une légère augmentation passagère de la contrainte à laquelle s'effectue la transformation de phase. Une explication de ces phénomènes est proposée en utilisant des notions thermiques associées à la transformation de phase, qui est soit endothermique ou exothermique, en utilisant l'influence de la convection thermique avec le milieu ambiant et en se basant sur la relation de Clausius-Clapeyron pour les AMF.

Abstract

It is well known that the behaviour of shape memory alloys (SMA) evolves when subjected to cyclic loading. For instance, during superelastic cycling of an SMA, an increasing residual strain is observed, mainly during the first cycles. This paper first reports that i) this residual strain that is believed to be irreversible can be partially recovered and ii) a stress increase is

observed after a pause during cyclic loading. Also, it suggests an explanation of these experimental observations based on the endo and exothermic phase transformations of the alloy, the heat exchange by convection around the sample and the Clausius-Clapeyron relation characterizing SMA.

2.1 Introduction

Nowadays, many applications benefit from shape-memory alloys (SMA) used as actuators, dampers, and flexible components. Some of these applications subject SMA to cyclic or repetitive loading. The ability to understand and predict the evolution and degradation of SMA's mechanical behaviour under cyclic loading is vital for these applications.

Over the past years, many attempts were made to develop models to describe the way SMA behave under different thermomechanical loadings. It is usually accepted that there are two general trends: (a) constitutive modeling based on thermodynamic, microscostructural or macrosctructural approaches, and (b) phenomenological modeling, less physically rigorous, but much simpler to calibrate and implement. The main advantage of constitutive modeling is its capacity to predict all aspects of SMA behaviour, from shape memory effect to superelasticity. These models are in general complete and very complex. Good examples of constitutive modeling based on thermodynamics are the works of Brinson [1], Patoor et al. [2] and Lagoudas et al. [3]. It consist of a micromechanical description of the martensitic transformation and it has been used by others [4]. Another micromechanical model is the one proposed by Likhachev [5, 6] and adapted by Evard et al. [7, 8], Volkov et al. [9], Wong et al. [10], and Pushtshaenko et al. [11]. The model proposed by Likhachev introduces the concept of "effective temperature" that describes both stress and temperature states within the framework of the general Clausius-Clapevron relation. Finally, constitutive models based on a macroscopic approach have been developed by Tanaka et al. [12, 13], and Aurrichio et al. [14].

When a quick approximation of the mechanical behaviour of a SMA device is needed, phenomenological modeling becomes a good alternative to constitutive modeling. It allows rapid calculations using experimental results exclusively. Examples of phenomenological models are the curve-fitting approach of Ren et al. [15], the artificial neural network algorithm of Li et al. [16], and the interpolation technique of Macelot et al. [17].

The main limitation associated with all the above mentioned models is their inability to consider the degradation of the SMA properties under cyclic loading. Very few papers deal with the subject in a constitutive manner (Evard et al. [7, 8] and Terriault et al. [18]). In addition, to date, none of the models reproduce the experimentally observed "pause effect" related to an interruption in the cyclic loading sequence, and which affects the mechanical behaviour of the sample. While this pause effect has been briefly described by Van Humbeeck [19] and Gall et al. [20, 21], it has not yet been modeled, to the knowledge of the authors. The main reason for this lacuna in the existing models probably resides in the absence of valuable experimental data.

The purpose of the present paper is to propose an explanation of the temporary partial recovery of accumulated residual strain and stress increase observed while interrupting a superelastic cyclic loading sequence. First, experimental evidence of this phenomenon will be shown. These include sample surface temperature monitoring with thermocouple during cycling. Such information can be eventually introduced in theoretical model. Then, based on these observations, a physical explanation will be suggested.

2.2 Experimental Procedure

The experimental procedure used to obtain the maximum information about the global mechanical behaviour of the alloy is as follows: Based on the Design Of Experiment theory (DOE), two Box-Behnken designs were introduced: one "modified" to study the general features of degradation, and one "standard" to quantify the pause effect (temporal interruption during cyclic loading). The "modified" Box-Behnken design is a standard

design with a non-symmetrical experimental space over one axis. Both designs were built to cover the experimental space as much as possible. This experimental space is composed, in theory, of all the possible combinations of all the variables affecting the mechanical behaviour of shape memory alloys. Figure 2.1 shows the global picture (Ishikawa diagram) of one such possible experimental space, based on a non-exhaustive literature review [21-36].



Figure 2.1 Ishikawa diagram of the main factors influencing the mechanical behaviour of SMA.

The first DOE used was the "modified" DOE. It brings forward the three main factors affecting the degradation of the alloy's mechanical properties: strain amplitude, elongation rate, and duration of a pause. This third parameter is considered in order to verify the assumption that an interruption in the cycling plays an important role in the global life of the alloy. The chosen values for the parameters are: strain amplitude of 2, 5, and 8%, elongation rate of 0.0105, 0.105, and 1.05 mm/s and pause duration of 0, 600, and 3600 s.

The second DOE was developed to reach a better comprehension of the surface temperature evolution during the pause. Hence, shorter pauses where introduced. For the entire design, strain amplitude was fixed at 8% in order to maximize the residual strain for all elongation

rates. The three parameters chosen are pause (5, 50 and 95 s), elongation rate (0.015, 0.15 and 1.5 mm/s), and number of cycles prior to the pause (2, 11 and 20 cycles). Since both DOE study different aspect, elongation rate did not have to be the same.

The experimental apparatus used for both DOEs consisted of a tensile testing machine, MTS-858 MiniBionix, equipped with a thermal chamber to control the environmental temperature during testing. For all experiments, elongation was monitored by the head displacement of the machine. Three thermocouples were fixed to the samples during testing to monitor the specimen surface temperature. The use of three thermocouples was to ensure an average look at the distribution of heat on the sample surface. The position was chose after Schmidt [31].

Type K thermocouples where distributed along the half-length of each sample: thermocouple 1 is in the center and thermocouples 2 and 3 are respectively 23 mm and 12 mm above the bottom grip (see figure 2.2). Each thermocouple was held with 2 mm-wide tape. To ensure maximum thermal conduction, silicon-based heat sink compound was used on the tip of every thermocouple. All measurements were carried out and processed using a desktop computer. The control system was provided by the MTS company.



Figure 2.2 Schematic and actual thermocouples set up.

The specimens used for the present study are 2 mm-diameter Ti-50.6at%Ni wires received as-drawn from Special Metals (NY, USA). The initial length of the samples (distance between the grips) was fixed at 70 mm. Annealing was performed at 450°C for 3600 seconds, followed by water quenching at room temperature. This procedure gives the following transformation temperatures measured by a differential scanning calorimeter (DSC Perkin-Elmer Pyris 1) according to ASTM F2004 standard: $A_f = 31^{\circ}$ C, $A_s = 11^{\circ}$ C, $M_f = -35^{\circ}$ C, and $M_s = -14^{\circ}$ C. In order to ensure superelastic behaviour of the alloy, mechanical testing was performed at 55°C.

The experimental procedure for the first DOE was carried out as follows: First, the sample was superelastically cycled 50 times (loading of the sample up to a prescribed strain and unloading until the force reaches 0 N) at a constant elongation rate, which produces a symmetric triangular wave in strain. Then, an interruption was applied, according to the pause time. It consisted of holding the sample at zero stress for a specified time. Finally, another 50 superelastic cycles were performed on the samples.

The experimental procedure for the second DOE was done in a similar way. 2, 11 and 20 cycles were realized prior to the interruption. Then, the samples were held at zero stress for the pause duration, followed by the remaining cycling, to reach a total of 50 cycles overall.

2.3 Experimental Results

2.3.1 First Experimental Design (DOE 1)

Striking evidence of degradation is revealed by the residual strain accumulating throughout cycling. It is accepted that there is generally a stabilization in the accumulation of residual strain between cycles 20 and 100, depending on the maximum superelastic strain applied, according to several authors [22, 23, 25, 37]. It can also be the case that no stabilization occurs. For the samples used in the present work, almost-complete stabilization occurs approximately around the 20th cycle, although there is continuous residual strain accumulation for up to 100 cycles.

Figure 2.3 presents a typical stress-strain curve for the first 20 cycles of the SMA wire tested. The evolution of the residual strain with the number of cycles is obvious.



Figure 2.3 Stress-strain curve for the first 20 cycles for an 8% strain amplitude and 0.105 mm/s elongation rate.

It is interesting to notice in figure 2.3 that there are some discontinuities in the transformation plateau during the very first cycles. They do not represent slip in the grips, but rather discontinuous transformation. It appears that at some points during loading, sudden phase transformation occurs. This fact seems attributable to the strong anisotropy of our polycrystalline samples. Since with increasing number of cycles, the specimen becomes trained, those abrupt transformations gradually disappear.

Figure 2.4 a) shows the surface temperature during the first cycle of a specimen loaded at a 0.105 mm/s elongation rate. The correlation between the temperature increase (associated with phase transformation) and the discontinuity is clearly visible in thermocouple 1. Indeed, an abrupt temperature variation coincides with the onset of the discontinuity on the stress-strain curve. Even if the discontinuity is practically instantaneous, the thermal diffusion needs a certain time to be measured by the thermocouple and that explains the lag between

the end of the temperature increase and the discontinuity. For the present case, it appears that the discontinuity is from a transformation near thermocouple 1, because both remaining thermocouples register no temperature increase at that point. The fact that there is more than one discontinuity for each plateau indicates that there might be more than one transformation site. This fact was also observed by Brinson et al. [38] and Schmidt [31]. One can notice from figure 2.4 that all three thermocouples give different result over a small portion of the cycling. It is for the present case attributed to the fact that the data presented are for the first cycle. The overall temperature variation on the sample is stabilizing after a few cycle, just has the discontinuities disappear (training of the sample; see figure 2.4 b). Therefore, the thermocouples start to behave in a similar manner. For the remaining of the present paper, thermocouple 2 will be use when referring to thermal effect. The main reasons are as follow: This thermocouple was more stable in the data provided (less variability between tests) and according to Schmidt, it is a point on the sample were thermal effect are more sensible.



Figure 2.4 (a) Stress-strain and surface temperature variations when a discontinuity occurs for the 1st cycle. (b) Surface temperature variations as a function of time for the 10th cycle.

Figure 2.5 presents the residual strain as a function of the number of cycles for the first DOE experiments, without any pause. It is clear that the number of cycles is not the only factor

influencing the residual strain. As a matter of fact, the strain amplitude and the elongation rate have a significant impact on the residual strain outcome, and the larger the strain amplitude, the greater the influence of the elongation rate on the residual strain.



Figure 2.5 Residual strain as a function of number of cycles for the first DOE: (a) 2%, (b) 5% and (c) 8% strain amplitude.

The most original aspect of the present work is the interruption in cycling (a pause of 0, 600, or 3600 s). It has been noted that a pause between two cycles causes a partial recovery of the residual strain that was believed to be irreversible. The amount of recovered strain is a function of strain amplitude, elongation rate and time duration of the interruption. For example, figure 2.6 shows the relative residual strain as a function of the number of cycles

for a selected number of experiments. The relative residual strain is defined here as a ratio of the residual strain at a given cycle divided by the residual strain after the first cycle, and thus, the same basis for comparison is used for all of the conditions. From figure 2.6, it is obvious that the partial recovery of the residual strain is affected by each of the above-mentioned parameters. The only drawback of the experimental plan used here is the time duration of the pause, which is too long to obtain a complete characterization in respect to this parameter. The second DOE, which will be discussed later, was designed to address this issue.

Another interesting feature can be observed by comparing figure 2.5 and figure 2.6. For both 5 and 8% strain amplitude, even thought the residual strain is larger for higher elongation rate, the relative residual strain (compared with the residual strain of the first cycle) is higher for lower elongation rates. This seems to indicate that the residual strain appears a lot faster in the cycling history for high elongation rate than for low elongation rate. The effect is more striking in figure 2.6 b).



Figure 2.6 Residual strain as a function of cycle number, with a pause after the 50th cycle for selected experiment: (a) 5% strain amplitude (3600 s pause) and (b) 8% strain amplitude (600 s pause).

Another aspect related to the pause is its temporality. Indeed, the differences induced by the pause vanish during the subsequent cycles. Both the residual strain and the area of the hysteresis (expressed in mJ/mm³) are shown in figures 2.7a and 2.7b, respectively, for a strain amplitude of 5% and an elongation rate of 1.05 mm/s with and without a 3600s pause. Immediately after the pause (cycle 50) there is a discontinuity due to the pause, but there is practically no difference at cycle 100. This fact will be important for the thermal explanation proposed in the next section. Figure 2.7c show similar result for the hysteresis for a sample cycled with elongation rate of 0.105 mm/s at a strain amplitude of 8%.



Figure 2.7 Comparison of the influence of the pause on the a) residual strain and b) and c) mechanical hysteresis as a function of the number of cycles.

2.3.2 Second Experimental Design (DOE 2)

The second DOE was designed to overcome the limitation of the first DOE regarding the duration of the pause. Indeed, this DOE focuses on shorter pause durations and on the surface temperature evolution during the pause. The results show that the residual strain recovery (defined as the percentage of the residual strain recovered during the pause) is clearly dependent on the elongation rate (table 1). Statistical analysis of both DOEs has revealed a dependence on elongation rate (first DOE: p-value of 0.0864 and second DOE: p-value of 0.1257) and on the combination of strain amplitude and elongation rate (first DOE: p-value of 0.0259).

Table 2.1 also presents the thermal stabilization effect during the pause. For example, 100% stabilization means that the sample has completely returned to the ambient temperature, and a 50% stabilization means that the temperature differential between the sample's temperature and the ambient temperature has been reduced by half. Stabilization takes approximately 60 to 80 seconds to complete.

Elongation	Pause duration	Cycle before	Strain	Thermal
rate(mm/s)	(s)	the pause	Recovery (%)	Stabilization
				(%)
0.015	5	11	0.33	25
0.015	50	2	1.95	81
0.015	50	20	0.62	80
0.015	95	11	1.89	100
0.15	5	2	5.72	20
0.15	5	20	3.86	21.18
0.15	50	11	5.34	90
0.15	95	2	10.07	100
0.15	95	20	13.73	100
1.5	5	11	11.05	28.6
1.5	50	2	14.5	75
1.5	50	20	12.2	88.7
1.5	95	11	16	100

Table 2.1 Strain Recovery and Thermal Stabilization

Figure 2.8 shows a series of curves corresponding to an elongation rate of 1.5 mm/s interrupted after the 11th cycle for different pause times. From top to bottom, the duration of the pause is 5, 20, 50, 70 and 95 seconds. The 20 and 70 seconds pause were taken to give a better view of the temperature evolution. It can be seen that with a longer interruption, the stress increase is higher and surface temperature is closer to the ambient temperature. A

detailed graphic representation of the stress increase is schematically represented in figure 2.8, for the 20-second pause case (the stress used is the one corresponding to the onset of direct transformation). For the 5-second interruption case, there is a stress increase of about 17%. Similarly, there is a stress increase of 25% for 20, 27.5% for 50, and 34% for the70 and 95-seconds interruptions. All percentages are calculated by dividing the stress variation during the pause by the stress prior to the pause.



Figure 2.8 From top to bottom: pause times of 5, 20, 50, 70 and 95 seconds. The left graphs show stress-strain curves and the right graphs give the evolution of the surface temperature during the pause.

For this particular strain rate, the sample temperature is lower than the ambient temperature at the end of each cycle. Therefore, a temperature increase is measured during the pause. Note that for much faster strain rates, a situation were the sample temperature is higher than the ambient temperature could be observed. The surface temperature of the sample while cycling is dependent on both elongation rate and strain amplitude. Therefore, a more detailed discussion on the thermal evolution will be given in the following subsection.

Compared to the stress increase, the residual strain recovery is not as correlated with temperature stabilization. As calculated from the data, for a 5-second interruption, there is a recovery of about 11%. For a 20-second pause, the recovery is up to 14%. The strain recovery is 13% for 50, 17.5% for 70 and about 20% for 95 seconds. Strain recovery appears to act in a manner similar to but less pronounced than stress increase. However, the longer the interruption time, the higher the residual strain recovery and stress increase.

2.3.3 Temperature Variations

As noted above, thermocouples were used to monitor the surface temperature during cycling. It is interesting to observe the influence of the elongation rate on the surface temperature of the specimen measured by the thermocouple installed in the center of the sample. In fact, four stages can be identified during a cycle, as presented in Figure 2.9.



Figure 2.9 General diagram for surface temperature variation of NiTi sample under cyclic loading.

The first stage (1) is the elastic elongation of the austenite phase. There is a slight temperature increase caused by the dissipated mechanical work of reversible deformation. The slope is more or less abrupt depending mainly on the elongation rate. Since the temperature variation is very small during this stage, it seems to be non-restrictive to neglect heat exchange between the sample and the environment when studying single traction-relaxation. However, this heat exchange cannot be neglected when studying more than one cycle, mainly due to self-heating of the sample [39, 40]

The second stage (2) is the austenite-to-martensite exothermic transformation. The general behaviour of this stage is non-linear. The large temperature increase comes from phase transformation, but this transformation is not realized in a continuous and uniform manner over the sample. Some transformation might happen at the center of the sample or at a certain distance from the monitoring thermocouple. There is also thermal inertia from the thermocouple that will take some time to adjust to the temperature changes. Therefore, it is not rare to observe a delay between the end of stage 1 and the temperature increase due to phase transformation. Furthermore, there are two types of transformations: band transformation (Lüders-like bands, see Sittner et al. [41]) and isolated transformation

(Brinson et al. [38]). The latter gives less sharp peaks because it is far less energetic (smaller transformation volume). Finally, as for stage one, there is still heat exchange during this stage. The influence will be smaller for high cycle rates and larger for low elongation rates.

During the third stage (3), the temperature decrease is not entirely due to endothermic martensite-to-austenite phase transformation. Because the ambient temperature is lower than the sample temperature, there is a small decrease in temperature due to the convective heat exchange.

Finally, the fourth stage (4) is a combination of two factors: residual temperature at the end of third stage (3) and heat exchange towards ambient temperature. Here again, depending on the elongation rate used while cycling, different outputs can be observed.

For an elongation rate of 1.05 mm/s (figure 2.10a), the 1st stage lasts approximately 1s. Afterwards, there is phase transformation producing a clear temperature rise (after a slight delay). Then, the sample starts to cool down at about 5.8 seconds. At the end of the cycle (at 10 seconds), the temperature is below the ambient temperature and convective heat exchange does not have time to occur. Similar remarks can be made for the 0.105 mm/s elongation rate (figure 2.10b), but there is a small temperature increase at the end of the cycle. This indicates that the sample is close to regaining ambient temperature through convective heat exchange with the surroundings of the sample due to a lower elongation rate.

For the slowest elongation rate of 0.0105 mm/s (figure 2.10c), the temperature variations are much smaller than in the two previous cases. Also, since the elongation rate is very slow, the surface temperature decreases noticeably before any transformation occurs. This results in a relatively strong negative temperature (below ambient) when reverse transformation occurs, since it starts its endothermic process at ambient temperature. Finally, the temperature stabilizes at ambient temperature before the end of the cycle, as was also observed by Auguet et al. [39].



Figure 2.10 Surface temperature (thermocouple 2) at different elongation rates: a) 1.05 mm/s, b) 0.105 mm/s, and c) 0.0105 mm/s.

2.4 Discussion

2.4.1 Stress Increase

It has been noted that a partial recovery of the residual strain and a stress increase occur with an interruption of the cyclic loading. The experimental evidence shown above appears to be mainly related to the thermal exchange phenomenon. One way to verify the validity of this hypothesis is to use the Clausius-Clapeyron relation, equation (2.1), which relates the critical stress of phase transformation and the temperature. With the experimental data collected here, a stress-temperature state diagram was built (figure 2.11). From this state diagram, equation (2.1) can be applied to estimate the variation of the critical stress ($\Delta\sigma$) for a given temperature variation (ΔT).

 $\Delta \sigma = \left(\frac{d\sigma}{dT}\right) \Delta T = C_X \Delta T$

Set
$$C_{Mf}$$
 C_{Ms} $C_{Mf} = 7.0 \text{ MPa/}^{\circ}\text{C}$
 $C_{Ms} = 8.1 \text{ MPa/}^{\circ}\text{C}$
 $C_{As} = 5.7 \text{ MPa/}^{\circ}\text{C}$
 $C_{As} = 5.7 \text{ MPa/}^{\circ}\text{C}$
 $C_{Af} = 9.6 \text{ MPa/}^{\circ}\text{C}$

Figure 2.11 Stress-temperature state diagram.

Figure 2.12 gives an overview of the procedure applied to estimate the stress increase caused by temperature variations before and after the pause. First, in figure 2.12a, the experimental curve just before the pause is drawn (11th cycle, strain amplitude of 8%, elongation rate of 1.5 mm/s). In figure 2.12b, a bilinear fit of the data was applied to find the four characteristic stresses. From the experiment, it is known that a pause of 95s will produce a 6°C temperature increase (see figure 2.8). Figure 2.12c shows the 12th cycle immediately after the pause, superimposed on the bilinear calculation from equation (2.1). Note that for the calculated data, no residual strain recovery was considered. There is a fairly good agreement between experimental data and calculated points.

(2.1)



Figure 2.12 Procedure for the validation of the thermal-effect hypothesis: (a) 11th cycle (measured), (b) 11th cycle (measured and fitted points) and (c) 12th cycle (calculated and measured).

Figure 2.13 shows the same procedure applied to another case (pause of 50s, with a strain amplitude of 8% and an elongation rate of 1.5 mm/s: $\Delta T = 7^{\circ}$ C). Figure 2.13a is for cycle 20, prior to the pause, and figure 2.13b is for cycle 21, after the pause, with the calculated points superimposed.



Figure 2.13 Thermal-effect hypothesis applied to a sample with a different loading history: (a) cycle 20, with modeled data, and (b) cycle 21, with calculated data (equation (1)).

2.4.2 Residual Strain Recovery

For the partial residual strain recovery phenomenon, a similar thermal effects-based explanation can be suggested. If a cycle is initiated at a temperature close to A_f , the four stages presented earlier indicate that it is possible that the cycle would finish at a temperature below A_f (see figure 2.14). Therefore, some martensite sites can still exist at the end of the superelastic cycle and they disappear with a pause simply because the sample naturally regains the ambient temperature, which is higher than the A_f temperature of the alloy. However, even if this hypothesis explains the partial residual strain recovery quite well, it does not account for the global residual strain accumulation observed at every elongation rate and generally attributed to plastic deformation.



Figure 2.14 Typical first cycle illustrating the thermal effect.

2.5 Conclusions

In this paper, the physical phenomena involved in the partial recovery of residual strain and stress increase of SMA during interrupted cyclic loading was presented. Firstly, these behaviours were shown to be functions of strain amplitude, elongation rate, and interruption time. Secondly, it was shown from the first DOE that the time duration of the pause will become an irrelevant factor if it is greater than a certain value. For the present study, if the pause was longer than 95 s (second DOE), the global effect was the same, regardless of the pause duration (600 or 3600s).

An explanation for the partial strain recovery and stress increase caused by a pause was presented, based on the Clausius-Clapeyron relation. Theses observations should now be introduced in SMA models in order to quantify how well this thermal explanation can correlate with experimental observations.

2.6 References

- L. C. Brinson, "One-dimensional constitutive behavior of shape memory alloys: Thermomechanical derivation with non-constant material functions and redefined martensite internal variable," *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, vol. 4, pp. 229-242, 1993.
- [2] E. Patoor, D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part I: General properties and modeling of single crystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 391-429, 2006.
- [3] D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, P. Popov, E. Patoor, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part II: Modeling of polycrystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 430-462, 2006.
- [4] S. Kim, H. Choi, M. Yoon, and M. Cho, "Experimental test for numerical simulation of SMA characteristics and its simulation," presented at Smart Structures and Materials 2006 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Feb 27-Mar 2 2006, San Diego, CA, United States, 2006.
- [5] V. A. Likhachev, "Structure-analitycal theory of martensitic unelasticity," Proceedings of the 1995 International Conference on Martensitic Transformations, ICOMAT-95. Part 1 (of 2), Aug 20-25 1995 Journal De Physique. IV : JP, vol. 5, pp. 137-142, 1995.
- [6] V. A. Likhachev, "Theory of martensitic unelasticity of crystals," *Proceedings of the* 1995 International Seminar on Mechanics and Mechanisms of Solid-Solid Phase Transformations, MECAMAT'95, May 16-19 1995 Journal De Physique. IV : JP, vol. 6, pp. 1-321, 1996.

- [7] M. E. Evard and A. E. Volkov, "Modelling of strain accumulation and recovery due to fcc-hcp transformation at thermocycles," *Proceedings of the 1998 Internal Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering, NDTCS-98, Jun 8-Jun 12 1998 Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, vol. 3687, pp. 330-334, 1999.
- [8] M. E. Evard and A. E. Volkov, "Modeling of martensite accommodation effect on mechanical behavior of shape memory alloys," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 121, pp. 102-104, 1999.
- [9] A. E. Volkov, M. E. Evard, L. N. Kurzeneva, and V. A. Likhachev, "Mathematical modeling of martensitic inelasticity and shape memory effects," *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, vol. 41, pp. 1084, 1996.
- [10] F. C. Wong, O. Boissonneault, and P. Terriault, "Hybrid micro-macro-mechanical constitutive model for shape-memory alloys," presented at Smart Structures and Materials 2005 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 7-10 2005, San Diego, CA, United States, 2005.
- [11] O. Pushtshaenko, E. R. Oberaigner, T. Antretter, F. D. Fischer, and K. Tanaka, "Simulation of the damping of a shape memory alloy rod by using the Likhachev model," *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, vol. 13, pp. 817-823, 2002.
- [12] K. Tanaka, S. Kobayashi, and Y. Sato, "THERMOMECHANICS OF TRANSFORMATION PSEUDOELASTICITY AND SHAPE MEMORY EFFECT IN ALLOYS.," *International Journal of Plasticity*, vol. 2, pp. 59-72, 1986.

- [13] K. Tanaka, "THERMOMECHANICAL SKETCH OF SHAPE MEMORY EFFECT: ONE-DIMENSIONAL TENSILE BEHAVIOR.," *Res Mechanica: International Journal of Structural Mechanics and Materials Science*, vol. 18, pp. 251-263, 1986.
- [14] F. Auricchio, S. Marfia, and E. Sacco, "Modelling of SMA materials: Training and two way memory effects," *Computers and Structures*, vol. 81, pp. 2301-2317, 2003.
- [15] W. Ren, H. Li, and G. Song, "Phenomenological modeling of the cyclic behavior of superelastic shape memory alloys," *Smart Materials and Structures*, vol. 16, pp. 1083-1089, 2007.
- [16] H.-N. Li, D. Cui, and G.-B. Song, "Hysteresis model for superelasticity of shape memory alloy based on ANN," *Key Engineering Materials*, vol. 340-341 II, pp. 1175-1180, 2007.
- [17] P. Malecot, C. Lexcellent, E. Foltete, and M. Collet, "Shape memory alloys cyclic behavior: Experimental study and modeling," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 128, pp. 335-345, 2006.
- [18] P. Terriault, A. Volkov, and Trochu, "chapter 16: Constitutive relations," in *Shape memory alloys : fundamentals, modeling and applications*, V. B. e. al.], Ed. Montréal: École de technologie supérieure, 2003, pp. 844.
- [19] J. Van Humbeeck, "Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys," *Journal of Alloys and Compounds International Symposium on High Damping Materials, 22-24 Aug. 2002*, vol. 355, pp. 58-64, 2003.
- [20] K. Gall, H. Sehitoglu, R. Anderson, I. Karaman, Y. I. Chumlyakov, and I. R. Kireeva,"On the mechanical behavior of single crystal NiTi shape memory alloys and related
polycrystalline phenomenon," *Materials Science and Engineering A*, vol. 317, pp. 85-92, 2001.

- [21] K. Gall and H. J. Maier, "Cyclic deformation mechanisms in precipitated NiTi shape memory alloys," *Acta Materialia*, vol. 50, pp. 4643-4657, 2002.
- [22] M. Dolce and D. Cardone, "Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications 2. Austenite NiTi wires subjected to tension," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 43, pp. 2657-2677, 2001.
- [23] A. L. McKelvey and R. O. Ritchie, "Fatigue-crack propagation in Nitinol, a shapememory and superelastic endovascular stent material," *Journal of Biomedical Materials Research*, vol. 47, pp. 301-308, 1999.
- [24] S. Nemat-Nasser and W.-G. Guo, "Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates and temperatures," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 463-474, 2006.
- [25] J. McCormick and R. Desroches, "The effect of training, pre-straining, and loading history on the properties of NiTi shape memory alloys for protective systems in civil structures," presented at Structures Congress 2006, May 18-21 2006, St. Louis, MO, United States, 2006.
- [26] G. Eggeler, E. Hornbogen, A. Yawny, A. Heckmann, and M. Wagner, "Structural and functional fatigue of NiTi shape memory alloys," *Materials Science and Engineering A*, vol. 378, pp. 24-33, 2004.
- [27] K. N. Melton and O. Mercier, "FATIGUE OF NITI THERMOELASTIC MARTENSITES.," Acta Metallurgica, vol. 27, pp. 137-144, 1979.

- [28] K. Otsuka and X. Ren, "Recent developments in the research of shape memory alloys," *Intermetallics*, vol. 7, pp. 511-528, 1999.
- [29] K. Otsuka and X. Ren, "Martensitic transformations in nonferrous shape memory alloys," Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic Transformations (ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998 Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, vol. A273-275, pp. 89-105, 1999.
- [30] Y. S. Roh, Y. Xi, and J. Summers, "Image analysis of high cycle fatigue strains of SMAs," presented at Smart Structures and Materials 2000 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 6-Mar 9 2000, Newport Beach, CA, USA, 2000.
- [31] I. Schmidt, "A phenomenological model for superelastic NiTi wires based on plasticity with focus on strain-rate dependency caused by temperature," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 128, pp. 279-284, 2006.
- [32] E. Hornbogen and G. Eggeler, "Surface aspects in fatigue of Shape Memory Alloys (SMA)," *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, vol. 35, pp. 255-259, 2004.
- [33] S. P. Belyaev, N. N. Resnina, and A. E. Volkov, "Influence of irreversible plastic deformation on the martensitic transformation and shape memory effect in TiNi alloy," *Materials Science and Engineering A*, vol. 438-440, pp. 627-629, 2006.
- [34] H. Tamai and Y. Kitagawa, "Pseudoelastic behavior of shape memory alloy wire and its application to seismic resistance member for building," *Computational Materials Science*, vol. 25, pp. 218-227, 2002.

- [35] G. B. Rao, J. Q. Wang, E. H. Han, and W. Ke, "Study of residual stress accumulation in TiNi shape memory alloy during fatigue using EBSD technique," *Materials Letters*, vol. 60, pp. 779-782, 2006.
- [36] R. M. Tabanli, N. K. Simha, and B. T. Berg, "Mean strain effects on the fatigue properties of superelastic NiTi," *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 32, pp. 1866-1869, 2001.
- [37] M. C. Piedboeuf, R. Gauvin, and M. Thomas, "Damping behavior of shape memory alloys: strain amplitude, frequency and temperature effects," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 214, pp. 885-901, 1998.
- [38] L. C. Brinson, I. Schmidt, and R. Lammering, "Stress-induced transformation behavior of a polycrystalline NiTi shape memory alloy: Micro and macromechanical investigations via in situ optical microscopy," *Journal of the Mechanics and Physics* of Solids, vol. 52, pp. 1549-1571, 2004.
- [39] C. Auguet, A. Isalgue, F. C. Lovey, F. Martorell, and V. Torra, "Metastable effects onmartensitic transformation in SMA: Part 4. Thermomechanical properties of CuAlBe and NiTi observations for dampers in family houses," *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 88, pp. 537-548, 2007.
- [40] V. Torra and F. Trochu, "chapter 2: thermodynamics of the martensitic transformation," in *Shape memory alloys : fundamentals, modeling and applications*, A. V. P. Terriault, and Trochu,, Ed. Montréal: École de technologie supérieure,, 2003, pp. 844.
- [41] P. Sittner, Y. Liu, and V. Novak, "On the origin of Luders-like deformation of NiTi shape memory alloys," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 53, pp. 1719-1746, 2005.

CHAPITRE 3

ARTICLE 2: MODELING OF RESIDUAL STRAIN ACCUMULATION OF NITI SHAPE MEMORY ALLOYS UNDER UNIAXIAL CYCLIC LOADING

Paradis, A., Terriault, P. (corresponding author[†]), Brailovski, V.

Département de Génie Mécanique, École de Technologie Supérieure, 1100, Notre-Dame Street West, Montréal, Qc, Canada, H3C 1K3

[†] E-mail: <u>patrick.terriault@etsmtl.ca</u>, phone :1-514-396-8518, fax :1-514-396-8530 Le présent article a été publié dans la revue <u>Computational Materials Science</u>, doi:10.1016/j.commatsci.2009.08.013

Résumé

Pour que les AMF soit utilisables dans des applications courantes d'ingénierie, il est important de pouvoir simuler correctement l'évolution de l'alliage lorsqu'il est sous l'influence d'un chargement cyclique. Cet article présente une adaptation du modèle micromécanique de Likhachev capable de tenir compte de l'accumulation de la déformation résiduelle lors de sollicitation cyclique. Le modèle proposé, basé en partie sur les automates cellulaires et sur la relation phénoménologique de Ramberg-Osgood, est simple à caractériser, ayant un nombre réduit de constante. De plus, un modèle thermique est couplé au modèle résultant pour tenir compte des échanges avec l'environnement immédiat de l'alliage. Des validations numériques sont présentées montrant la capacité du modèle à reproduire différents aspects reliés à la sollicitation des AMF : effet mémoire, superélasticité et cycle thermique. Une validation expérimentale montre une bonne concordance entre les simulations et les courbes expérimentales.

Abstract

For Shape Memory Alloys (SMA) to be usable in engineering applications, it must be possible to simulate the degradation of the material when subjected to cyclic loading. This paper presents an adaptation of Likhachev's micromechanical model capable of such a degradation, concentrating on strain accumulation. The proposed model, based on a cellular automata algorithm and on the Ramberg-Osgood theory of plasticity, is easy to characterize, with the material constants reduced to a minimum. Further, a thermal model is coupled to the micromechanical formulation in order to allow the thermal exchanges with the surroundings to be taken into account. A series of numerical validations demonstrate the potential of the model to reproduce SMA-related effects: superelasticity, thermal cycling and shape memory effect. An experimental validation is carried out using a superelastic NiTi wire and a good agreement with experimental data is found.

3.1 Introduction

Shape memory alloys (SMA) exhibit many remarkable properties which have been largely experimentally studied, including shape memory effect [1, 2], superelasticity [3-6], two-way shape memory effect [1, 2] and damping [7-10]. Some engineering applications have been developed using these properties, but one of the major limitations facing the industrial use of SMA is the degradation of the alloy when subjected to cyclic loading. In that respect, many experimental works describing the degradation behaviour of the alloy under specific conditions have been carried out. Some authors apply the conventional fatigue approach [11-16], while others apply the fracture mechanics crack-propagation approach [17-20], the two main approaches used to study material damage accumulation and failure.

While experimentally determined information concerning SMA is indeed available, the fact remains however that only a few models exist which consider the evolution of their properties under cyclic loading. There is the algorithm proposed by Auricchio [21-23], which takes the degradation of the alloy properties into account, but which is limited to the superelastic regime of the alloy behaviour. The model proposed by Patoor et al. [24] and Lagoudas et al. [25] is a micromechanical model that is able to simulate the whole complex of SMA behaviour, including superelasticity and shape memory effect, but unfortunately, it needs a lot of ad-hoc constants which are sometimes hard to obtain. It is however one of the most advanced physically-based models available. Finally, there is a less known

micromechanical model proposed by Likhachev [26], which is extensively described by Volkov and Evard [27-30] and used by Wong et al. [31]., and which in the author's opinion, is the simplest micromechanical model capable of simulating every regime of the alloy behaviour, while using the smallest number of material constants.

The work by Evard and Volkov [28, 29] on Likhachev's model aimed to include degradation features by introducing some thermodynamic driving forces (difference in Gibbs energy between martensite and austenite) during the phase transformation. Although the model gives good theoretical results, the value of the forces governing the degradation are deduced from an equilibrium state. Furthermore, some constants based on micro-plasticity behaviour must be found before the phase transformation kinetics can be correctly determined. A more characterizable model is therefore desirable for industrial applications.

The aim of the paper is to develop a SMA model capable of considering the degradation of the material by plastic deformations. For practical purposes, the paper will present a model where the determinability of the material constants is relatively easy to achieve. It is important here to consider such aspect because degradation has a profound impact on the working life of various engineering applications. In the present work, a presentation of Likhachev's micromechanical model in a discrete form will be given in section 3.2, followed by the introduction of the degradation components, in sections 3.3, 3.4 and 3.5. Details concerning the calculation algorithm are presented in section 3.6. Section 3.7 is a summary of the characterization of the model while sections 3.8 and 3.9 present its validation which is limited to the uniaxial 1D loading case due to experimental data accessibility.

3.2 Likhachev's Micromechanical Model: Basic Description

The goal of the model is to predict the macroscopic strain rate tensor under a stress controlled loading. The macroscopic strain rate $\dot{\varepsilon}_{ij}$ is the sum of different strain rate contributions:

$$\dot{\mathcal{E}}_{ij} = \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{e} + \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{th} + \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{tr} + \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{p} \tag{3.1}$$

where the superscripts *e*, *th*, *tr* and *p* stand for elastic, thermal, transformation and plastic rates, respectively. The descriptions of the elastic and thermal terms are straightforward when using a mixing rule where the weighting parameter is the global volume fraction of the mattensite in the entire volume of the material, $\Phi_M (0 \le \Phi_M \le 1)$:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{e} = \frac{(1-\Phi_{M})}{E_{A}} \{(1+\nu_{A})\dot{\sigma}_{ij} - \nu_{A}\dot{\sigma}_{kk}\delta_{ij}\} + \frac{(\Phi_{M})}{E_{M}} \{(1+\nu_{M})\dot{\sigma}_{ij} - \nu_{M}\dot{\sigma}_{kk}\delta_{ij}\}$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{th} = [(1-\Phi_{M})\gamma_{A} + \Phi_{M}\gamma_{M}]\dot{T}\delta_{ij}$$
(3.2)

where E_A and E_M are the Young's modulus of austenite and martensite, v_A and v_M are the Poisson's ratios, γ_A and γ_M are the thermal dilatation coefficients, \dot{T} is the temperature variation rate, $\dot{\sigma}_{ij}$ the stress rate and δ_{ij} is the Kronecker tensor ($\delta_{ij} = 1$ if i = j and $\delta_{ij} = 0$ if $i \neq j$). For the Φ_M calculation, the SMA volume is divided into a series of smaller volumes called "regions". The number of regions is defined as N throughout this paper. If each region occupies the same volume, equation (3.3), in which ϕ_i is the volume fraction of the martensite

in the *i*th region, as compare to the entire specimen $\begin{pmatrix} \phi_i = \frac{volume \ martensite \ region \ i}{total \ volume \ of \ specimen} \end{pmatrix}$, is then obtained $(0 \le \phi_i \le 1.0)$:

$$\Phi_M = \sum_{i=1}^N \phi_i \tag{3.3}$$

The calculation of the transformation strain rate in equation (3.1) is based on the distortion tensor between the austenite and martensite crystalline unit cells D_{pq} , according to equation (3.4):

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^{tr} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_{pi}^{j} \alpha_{qk}^{j} D_{pq} \dot{\phi}^{j}$$
(3.4)

For NiTi alloys, Knowles and Smith [32] defined the distortion tensor from a crystallographic analysis as follows:

$$D_{pq} = \begin{bmatrix} -0.0337 & 0 & 0\\ 0 & 0.0763 & -0.0642\\ 0 & -0.0642 & -0.0418 \end{bmatrix}$$
(3.5)

In equation (3.4), $\dot{\phi}^{j}$ is the variation of the proportion of martensite in the jth region and α_{ij} is the transformation tensor that rotates the sample's coordinate system to that of the region. This transformation tensor is obtained by three sequential rotations defined by the Euler angles. It is assumed that the phase transformation of a given region is oriented in a single direction defined by the distortion tensor expressed in the region's coordinate system. Since each region has its own orientation with respect to the sample's coordinate system, each transformation strain rate must then be transformed into the sample's coordinate system. In equation (3.4), the distortion tensor D_{pq} (identical for each region) and the transformation tensor α_{ij} (different for each region) are known material constants. Generally, the user does not have to explicitly specify the transformation tensor of each region as they are automatically generated in order to obtain a uniform distribution within the entire volume. Therefore, the only unknown is the evolution of the martensite volume fraction in the region, given by the following transformation kinetics rule (as graphically illustrated in Figure 3.1):

$$\dot{\phi} = \frac{\dot{T}^{*}}{M_{f} - M_{S}} H\left[-\dot{T}^{*}\right] H\left[1 - \Phi_{M}\right] H\left[1 - \phi\right] H\left[M_{S} - \phi\left(M_{S} - M_{f}\right) - T^{*}\right] + \frac{\dot{T}^{*}}{A_{S} - A_{f}} H\left[\dot{T}^{*}\right] H\left[\Phi_{M}\right] H\left[\phi - \phi_{\min}\right] H\left[T^{*} - A_{f} + \phi\left(A_{f} - A_{S}\right)\right]$$
(3.6)

where A_S , A_f , M_s , M_f , are the characteristic temperatures of the alloy, H[x] is the Heaviside function (H = 1 if $x \ge 0$ and H = 0 if x < 0), ϕ and ϕ_{min} are the current and minimum

fractions of the martensite in the single region, respectively and, finally, T^* is the effective temperature of the region.



Figure 3.1 Graphical representation of the kinetic transformation rule equation (3.6).

Equation (3.6) is the sum of two terms, and each of them is the product of an amplitude $(\frac{\dot{T}^*}{M_f - M_s} \text{ and } \frac{\dot{T}^*}{A_s - A_f})$ and four Heaviside functions. The first two Heaviside functions $(H[-\dot{T}^*] \text{ and } H[\dot{T}^*])$ dictate which term is used, depending on whether the material is heated or cooled, according to the effective temperature. The next functions $(H[1-\Phi_M] \text{ and } H[\Phi_M])$ limit the total amount of the volume fraction of the martensite present in the sample between 0 and 1. The following Heaviside functions are introduced in order to limit the volume fraction of the martensite within each region, which cannot be higher than $1(H[1-\phi])$ or lower than a minimum value $\phi_{\min} (H[\phi - \phi_{\min}])$. The remaining Heaviside functions $(H[M_s - \phi(M_s - M_f) - T^*]$ and $H[T^* - A_f + \phi(A_f - A_s)])$ specify the temperature at which the onset of the direct and inverse phase transformations occur, depending on the martensite fraction in the region.

The effective temperature T^* is one of the key features of the Likhachev model indicating whether the phase transformation is initiated by mechanical or thermal loading. Based on the

Clausius-Clapeyron relation, the variation of the effective temperature in a region is a scalar value calculated from the temperature and the tensorial stress variations:

$$\dot{T}^* = \dot{T} - \frac{T_0}{q_0} \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \dot{\sigma}_{ij}$$
(3.7)

where T_0 is the thermodynamic equilibrium temperature given by the average of the transformation temperatures $T_0 = \frac{1}{4} (A_s + A_f + M_s + M_f)$ and q_0 is the latent heat of the phase transformation.

In previous published works involving Likhachev's model, the minimum fraction of martensite ϕ_{\min} was set at 0. The next section will discuss how this parameter can be adjusted during a simulation of a cyclic loading in order to represent the generation of irrecoverable residual strains.

3.3 Minimum Volume Fraction of Martensite

When a sample is subjected to either superelastic or shape memory cycling, an increasing residual strain, also called here "degradation", is experimentally observed [4, 6, 10, 15, 19, 33, 34]. Most of this degradation is caused by the accumulation of irrecoverable strains that can result from two contributing phenomena: conventional plasticity and untransformed martensite trapped into austenite (also called "blocked martensite" in the sequel). The first contribution shall be discussed further in section 3.4, while the second can be simulated by adjusting the minimum volume fraction of martensite, using a one-dimensional cellular automata algorithm. Such an algorithm is used iteratively, where the state conditions at time step "t" depends exclusively on the state conditions at time step "t-1" which allows a reflection of the thermomechanical history of the material.

A simple way to describe the evolution of ϕ_{\min} using the cellular automata approach is to consider a virtual one-dimensional discrete and closed space as used by Wolfram [35].

Essentially, a virtual ribbon of Π +1 sites is built and wrapped in a 2-dimensional circle, considering site 0 overlapping site Π +1 (Figure 2). In this work, a virtual ribbon made of 1000 sites is used in order to have a good compromise between calculation time and accuracy. To many sites (more than 5000) do not improve the quality of the randomness and increase the calculation time by at least a factor of 5. Not enough sites (under 500) reduce the random effect and introduces some odd jumping behaviour. Any site "q" has two neighbours "p" and "r" and a subscript is added to specify the time step to which the site value corresponds. A site can only take two discrete values: "0", representing virtual austenite, and "1", representing virtual martensite. Assuming that the entire volume of the material cannot evolve into untransformed martensite, the one-dimensional virtual ribbon is divided into two distinct sections, one "static", and the other, "dynamic". The dynamic section is considered as the portion of the material in which blocked martensite can be generated. In a real material, this blocked martensite is distributed randomly throughout the entire volume, but in our model, all the blocked martensite sites are grouped together in the first 10% of the total volume (the wrapped virtual ribbon of 100 sites is the dynamic part, and so the static part is thus a ribbon comprised of 900 sites). This chosen limit of 10% is approximated following the work of Brinson et al. [6], in which the total amount of trapped martensite observed does not exceed 0.1% for 9 cycles, at a cycling amplitude of 2%.



Figure 3.2 Visual representation of the one-dimensional virtual space.

Cellular automata aim primarily to represent the large scale behaviour of complex systems by studying a large number of microscopic entities obeying simple rules. The simplest rules relate to one-dimensional systems. They were brought up in a concise manner by Wolfram [35] in 1983. Essentially, the value of site q_{t+1} , which is either "0" or "1", depends only on the values of the sites p_t , q_t and r_t of the previous time step. Each of the eight possible

combinations of p, q and r can lead to either "0" or "1" for q_{t+1} , meaning that there are a maximum of $2^8 = 256$ possible rules for one-dimensional first-neighbour automata. For this study, rule 30, as described by Wolfram [35], is used. This choice is justified by the fact that a rule showing some randomness was sought in order to take account of some experimental observations [6], and rule 30 had already been shown to be a good candidate for such a feature (Wolfram [36]). Other rules could have been used, but they were less suitable for the present application due to their non-physical response. For example, with rule 45, almost all the sites of the ribbon alternate simultaneously from 0 to 1 (and vice-versa) between two successive iterations and with rule 110, a portion of the ribbon can be frozen in a given state for multiples iterations, thus disabeling a possible evolution in time. Figure 3.3 is a visual representation of the rule. Note that the number given to a rule is simply a translation from binary to decimal.



Figure 3.3 Determination of rule 30, according to Wolfram [35].

To be implemented into a model, a rule must be written in a more mathematical manner. Using the modulo 2 function, which gives either "0" or "1" as a result, rule 30 can be represented by equation (3.8) as:

$$q_{t+1} = \text{mod}[p_t + q_t + r_t + q_t r_t, 2]$$
(3.8)

The minimum volume fraction of the martensite in the closed space is obtained simply by adding the value of every site $(q^{(i)} \text{ with } 1 \le i \le \Pi + 1)$ divided by the total number of sites

(see equation (3.9)). The evolution of each site of the ribbon from time step "t" to time step "t+1" is described in the next paragraphs.

$$\phi_{\min} = \frac{1}{(\Pi + 1)} \sum_{i=0}^{\Pi} q^{(i)}$$
(3.9)

The automaton is used here as follows. Firstly, an initial value of each of the 1000 sites must be set either to "0" or "1". Each of the 900 sites in the static section of the virtual ribbon is set and always kept at "0". In the dynamic section of the virtual ribbon, only six sites (0, 20, 40, 60, 80 and 100) are randomly set to "0" or "1" while all the others are set to "0". There are therefore $2^6 = 64$ possible starting conditions, which can be altered, depending on the alloy used. Secondly, the evaluation of the automaton is calculated in an iterative sequence.

To illustrate the behaviour of the cellular automaton, the top graph of Figure 3.4 shows a two-dimensional representation of the evolution of the 100 sites of the dynamic section of the virtual ribbon for 100 time steps. This evolution corresponds to the case where the sites 0, 40, 80 and 100 were initially set to 1. A black dot represents a site set to "1" while a blank is used for "0". The bottom graph shows the evolution of the minimum volume fraction of martensite with the discrete time step calculated according to equation (3.8), for five different evolutions, corresponding to five of the 64 possible starting conditions. It can be seen that for different starting conditions, the same overall behaviour is observed: the minimum fraction of martensite stabilizes near 0.05.



Figure 3.4 (a) Cellular automata evolution and (b) minimum volume fraction of martensite as a function of time.

That some fluctuations are seen in the result was indeed part of the objective of this part of the model. It is known that macroscopic materials with the same thermomechanical history should behave in a similar manner, but not in a perfectly reproducible form. This randomness is normal, and comes from the microscopic interaction inside a material. It is impossible for a constitutive model to be able to predict all known behaviours of all material samples exactly. Therefore, to simulate this effect, the proposed algorithm is well indicated.

Since an iteration of the cellular automata automatically implies a possible increase in the blocked martensite, and since in the real material, such an increase only occurs when the proportion of martensite increases, the next iteration of the automata is calculated when the global martensite volume fraction increases by 0.1. This value was chosen in order to ensure general stability in the evolution process. Therefore, time increments for the cellular automata must only be related to the positive variation of the martensite volume fraction in a

region. In order to consider such an evolution, the proposed algorithm is triggered following the output from the Likhachev kinetic transformation rule. More details are given in section 3.6.

3.4 Plastic Strain

Plasticity is treated as a sum of two contributing phenomena: a plastic deformation as a function of stress $\varepsilon_{ij}^{p\sigma}$ and a plastic deformation generated by the phase transformation $\varepsilon_{ij}^{p\Phi}$. The superscripts σ and Φ are added to ε_{ij}^{p} to emphasize the fact that the plastic strain is created by stress or phase transformation. This distinction is brought up in order to consider that for different regimes, such as thermal cycling under constant stress for instance, the degradation that is experimentally observed [37] cannot be simulated only according to a stress-dependent plastic deformation.

The phase transformation is therefore believed to be responsible for the main residual strain accumulation observed during thermal cycling, as suggested by Evard and Volkov [28, 29], as well as for superelastic cycling under the plasticity threshold. Equation (3.10) presents global plasticity as the sum of the two terms:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{p} = \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{p\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^{p\Phi} \tag{3.10}$$

In order to use equation (3.10) in equation (3.1), the plastic strain rate is calculated as a variation of plastic strain during a small time increment Δt between times $t - \Delta t$ and t:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \frac{{}_{t}\varepsilon_{ij}^{p} - {}_{t-\Delta t}\varepsilon_{ij}^{p}}{\Delta t}$$
(3.11)

For the sake of simplicity, and since the model is exclusively used in uniaxial tension, the calculation of the plastic strain is carried out with a scalar formulation. Therefore, in the sequel, ε^p should be interpreted as ε_{11}^p .

This section introduces the global plasticity calculation with the empirical relation developed by Ramberg and Osgood in 1943 [38], and presents an easy method to calculate the plasticity produced during an uniaxial loading:

$$\mathcal{E}^{p} = \left(\frac{\overline{\sigma}_{M}}{B}\right)^{\frac{1}{n}}$$
(3.12)

The value of $\overline{\sigma}_{M}$ is the von Mises stress $\overline{\sigma}_{M} = \sqrt{\frac{3}{2}} \sigma_{ij}^{s} \sigma_{ij}^{s}$, σ_{ij}^{s} being the stress deviator. In the case of uniaxial tension, $\overline{\sigma}_{M} = \sigma_{\text{where}} \sigma_{11} = \sigma_{\text{and}} \sigma_{ij} = 0$ for all other component. B and n are the Ramberg-Osgood constants obtained from a stress-strain curve, n being the slope of the plastic part of the curve in a log/log plot and B being the upper limit for the plastic stress. Figure 3.5 schematically illustrates how to determine such constants.



Figure 3.5 Determination of the Ramberg-Osgood constants.

The adaptation of the Ramberg-Osgood theory for the plastic behaviour of SMA begins with an investigation of stress plasticity. The value of the constant B must depend on the temperature. This is related to well documented experimental fact [27] that the plastic stress threshold σ_y decreases as the temperature increases. A schematic of the phenomenon is presented in Figure 3.6.



Figure 3.6 Plasticity threshold σ_y as a function of temperature superimposed on SMA state diagram.

A modified Ramberg-Osgood relation can then be stated as follows:

$$\varepsilon^{p\sigma} = \left(\frac{\overline{\sigma}_M}{B(T)}\right)^{\binom{1}{n}} H[\Delta \overline{\sigma}_M]$$
(3.13)

where H[] is a Heavyside function (there is plasticity only if the stress is increasing) and B(T) is the temperature-dependent constant. The value of $\Delta \overline{\sigma}_M$ is the von Mises stress variation occurring during a time step Δt .

For the evaluation of the transformation plasticity, the use of a modified Ramberg-Osgood equation (3.12) is presented. Since the Ramberg-Osgood relation is based mainly on an adimensional parameter (a stress ratio σ_B), a similar approach is used, but this time, with the global martensite volume fraction Φ_M , which is also an adimensional parameter. However, since the ratio from the original Ramberg-Osgood formulation must always be lower than 1, a constant K larger than 1 is introduced to ensure that this condition is respected. If we look

at a standard superelastic cycling (Figure 3.7), we can notice some residual strain accumulation which drops as the cycle number (denoted in the sequel by $C^{\#}$) increases. Such residual strain accumulation is the result of multiple factors (transformation residual strain, locally-induced stress, etc.). It is supposed that for stresses that remain lower than the general plasticity yield stress (which is the case in figure 3.7), the main factor influencing the residual strain is then the phase transformation.



Figure 3.7 Residual strain accumulation.

In order to simulate this type of accumulation from one cycle to the next even after the volume fraction of martensite has reached the same maximum value, the value of the constant n is varied with each cycle. As shown in Figure 3.8, where different values for n are represented with a constant value for K of 1.007, it can be seen that a decrease in the value of n produces a decrease in the plastic strain. Therefore, in order to simulate the effect of cycling on SMA plasticity, the constant n is defined as a function of the number of cycles, $n(C^{\#})$.



Figure 3.8 Different residual strains corresponding to different values of n for the same volume fraction ratio of 0.995.

Further, it is assumed that plasticity increases only if there is an increase in the global martensite volume fraction (that is why the Heavyside function $H[\Delta \Phi_M]$ is introduced where $\Delta \Phi_M$ is the variation of the volume fraction of martensite during the time increment Δt). Finally, the transformation plasticity produced by the phase transformation becomes:

$$\varepsilon^{p\Phi} = \left(\frac{\Phi_M}{K}\right)^{\binom{1}{n(C^{\#})}} H[\Delta\Phi_M]$$
(3.14)

3.5 Macroscopic Thermal Model

To calculate the effective temperature of equation (3.7), the temperature of the material must be evaluated. In this work, the temperature is affected by the evolution of the phase transformation (due to latent heat and internal friction), by the heat exchange, by convection with the surroundings, and by the specific heat of the material.

The model, which is inspired by Wong et al. [31], is a macroscopic model based on the equilibrium between the energy generated and the sum of the energy dissipated and stored in the material during a time step Δt (from time t - Δt to time t). Using the subscripts LH for the energy generated by latent heat, IF for that generated by internal friction, D for the dissipated energy, and S for the stored energy, the energy equilibrium becomes:

$$E_{LH} + E_{IF} = E_D + E_S (3.15)$$

The first term depends on the total volume fraction of martensite in the material since it is the latent heat energy. Considering q_0 as the latent heat per unit volume of phase transformation, V as the volume and $\Delta \Phi_M$ as the variation of the total volume fraction of martensite during Δt (a positive value appears for exothermic austenite-to-martensite transformation and a negative value for endothermic martensite-to-austenite transformation), we can write:

$$E_{LH} = q_0 V \Delta \Phi_M \tag{3.16}$$

The second term is associated with the internal friction energy between the different phases of the material. For this term, the volume fraction of martensite within each region is used since a temperature increase can be present even if the sample has a constant amount of martensite. Therefore, it is not the global variation of the volume fraction of martensite as such which is important, but rather, the variation within each region ($\Delta \phi_i$). If q_{if} is the latent heat per unit volume generated by internal friction, this contribution is given by:

$$E_{IF} = q_{if} V \sum_{i=1}^{N} \left| \Delta \phi_i \right|$$
(3.17)

The first term of the right-hand side of equation (3.15) is the energy dissipated by heat convection with the surrounding area. This energy can be either positive or negative, irrespective of whether the ambient temperature (T_{amb}) is lower or higher than the specimen temperature (T). Since heat dissipation depends on the surface of contact between the specimen and the environment, A_E is the specimen surface and h, the heat convection coefficient, it can be written that:

$$E_D = hA_E(\overline{T} - T_{amb})\Delta t \tag{3.18}$$

where \overline{T} is the average temperature of the specimen during Δt , given by equation (3.19):

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \left[T_t + T_{t-\Delta t} \right] \tag{3.19}$$

Finally, the stored energy is associated with the specific heat per unit volume c_p , the mass m and the temperature variation ΔT :

$$E_s = mc_p \Delta T \tag{3.20}$$

Hence, the energy balance which will be used in the model is fully defined as follows:

$$q_0 V \Delta \Phi_M + q_{if} V \sum_{i=1}^N \left| \Delta \phi_i \right| = h A_E (\overline{T} - T_{amb}) \Delta t + m c_p \Delta T$$
(3.21)

Substituting \overline{T} by the definition given in equation (3.19) and ΔT by $(T_t - T_{t-\Delta t})$, equation (3.22) can be easily obtained:

$$T_{t} = \frac{\left\{q_{0}V\Delta\Phi_{M} + q_{if}V\sum\left|\Delta\phi_{i}\right| + \frac{1}{2}hA_{E}\Delta t[T_{amb} - T_{t-\Delta t}] + mc_{p}T_{t-\Delta t}\right\}}{\left[mc_{p} + \frac{1}{2}hA_{E}\Delta t\right]}$$
(3.22)

Finally, the value of the temperature variation of equation (3.7) can be approximated by a temperature difference calculated during two successive iterations:

$$\dot{T} \cong \frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{T_t - T_{t-\Delta t}}{\Delta t}$$
(3.23)

3.6 Complete Model Description

Sections 3.2 to 3.5 describe all the different modules needed to build the SMA model. This section for its part briefly presents the manner in which they are implemented. Figure 3.9 gives an overview of the global interaction between the different modules of the model, and using a series of arrows, shows how each parameter calculated by a module (output) is used by another module (input).

In order to correctly use the model, the following steps must be followed:

- 1- Input: state at time $t \Delta t$
- 2- Loading definition: T_{amb} , Δt , $\Delta \sigma$
- 3- Thermal module: calculation of the wire temperature at time t, using equation (3.22)
- 4- Likhachev module:

Calculation of the effective temperature, equation (3.7)

Calculation of martensite volume fraction, equations (3.6) and (3.3)

- 5- Cellular automata algorithm: calculation of ϕ_{\min} , equation (3.8)
- 6- Modified Ramberg-Osgood plasticity, equations (3.13) and (3.14)
- 7- Elastic and thermal contribution calculation, equation (3.2)
- 8- Total strain calculation at time t: equation (3.1)
- 9- Output: state at time t

10- Restart at step 1 if needed, with the newly calculated state becoming the known previous state for the next iteration.



In the remainder of this paper, all simulations are executed according to this algorithm.

Figure 3.9 Model construction diagram for the calculation of the next state considering the material constants, the loading and the previous state.

3.7 Characterization of the Model: Material Constant Determination

To characterize the material, a 2 mm-diameter Ti-50.6at%Ni wire received as-drawn from Special Metals (NY, USA) was used. Annealing was performed at 450°C for 3600 seconds, followed by water quenching at room temperature. The procedure gave the following transformation temperatures, as measured by a differential scanning calorimeter (DSC Perkin-Elmer Pyris 1) according to the ASTM F2004 standard: $A_f = 306$ K, $A_s = 300$ K, $M_f = 240$ K, and $M_s = 245$ K. With the same DSC measurements, the transformation latent heat and specific heat were calculated.

With a 70 mm long sample, a tensile test was carried out with a MTS-851 Mini-Bionix tension/torsion machine at a very low elongation rate (0.01 mm/s), and at a temperature of 328 K to ensure that the sample was in its superelastic state. From the resulting stress-strain curve, the Young's modulus for both austenite and stress-induced martensite can be found ($E_A = 50$ GPa, $E_M = 30$ GPa), and focusing on higher strains, the Ramberg-Osgood constant can be estimated as well, n = 0.001.



Figure 3.10 Characterization of the Ramberg-Osgood constant from an experimental stress-strain curve.

Finally, the following constants were taken directly from the literature [27]: density ($\rho = 6450 \text{ kg/m}^3$), thermal dilatation coefficient ($\gamma_A = 12 \times 10^{-6} \text{ m/mK}$; $\gamma_M = 8 \times 10^{-6} \text{ m/mK}$) and deformation tensor (equation (3.5)). The value for the internal friction latent heat can be measured in several different ways (see chapter 10 of Brailovski et al. [27]). In our case here, the value was set at $10 \times 10^6 \text{ J/m}^3$ for all cycles. Note that the Poisson's ratio of austenite and martensite (v_A and v_M) must be specified for 2D and 3D simulations only.

The convection coefficient ($h = 80W/m^2K$) corresponds to a value well inside the accepted range for our environmental chamber, in which the convection is forced with a fan. All the parameters for the model are listed in Table 3.1.

$M_{\rm f}\!=\!240~K$	Martensite finish temperature			
$M_{s} = 245 \text{ K}$	Martensite start temperature			
$A_{s} = 300 \text{ K}$	Austenite start temperature			
$A_{\rm f} = 306 \; {\rm K}$	Austenite finish temperature			
$q_0 = 140 x 10^6 \text{ J/m}^3$	Transformation latent heat			
$q_{if} = 10 x 10^6 \text{ J/m}^3$	Internal friction latent heat			
$h = 80 \text{ W/m}^2\text{K}$	Convection coefficient			
$A_E = 3.141 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ Surface of the sample				
$c_p = 820 \text{ J/kgK}$	Specific heat			
$ ho = 6450 \text{ kg/m}^3$	Density			
$E_A = 50 \times 10^9 \text{ Pa}$	Austenite Young's modulus			
$E_{\rm M} = 30 \times 10^9 \ \rm Pa$	Martensite Young's modulus			
$\gamma_A = 12 \times 10^{-6}$ m/mK Thermal dilatation coefficient, austenite				
$\gamma_M = 8 \times 10^{-6} \text{ m/mK}$	Thermal dilatation coefficient, martensite			

Table 3.1: Model parameters used for the 1D simulations

(-0.0337	0	0)	Deformatio	m	tensor
$D = \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix}$	0.0763	-0.0642			
0	-0.0642	-0.0418			
			according	to	Knowles
			and Smith[3	32]	
$n = 0.001 (C^{\#})^{0.07}$ Ramberg-Osgood constants					
B(T) = 3796 - 7*T MPa					
K = 1.007		Pl	asticity constant		

3.8 Theoretical Capability

One of the major advantages of the model examined is its ability to simulate all the main regimes of an SMA material (superelasticity, shape-memory effect, thermal cycling, etc...). All the simulations presented in this section use the constants given in Table 3.1.

As a first example, five superelastic cycles were simulated at a rate of 250 N/s and at an ambient temperature of 328 K. The result is presented in Figure 3.11. Clearly, there is some strain accumulation as the number of cycles is increased.



Figure 3.11 Typical superelastic cycle exhibiting strain accumulation.

Another simulation, referred to as Assisted Shape Memory Effect (ASME), is performed, this time using five thermal cycles, at a constant stress of 64 MPa (force of 200 N). Starting at temperature A_f (point 0 on Figure 3.12), the sample is cooled to a temperature below M_f (240 K: 0-1). The force is then applied (1-2). Finally, the ambient temperature is raised to 340 K (in 100 s: 2-3-4-5) and cooled to 220 K (in 200 s: 5-4-6-7-8). The simulated sample temperature therefore varies between 235 K and 335 K, due to the thermal inertia of the material. Here again, the strain accumulation can be seen evolving with cycling.



Figure 3.12 Example of thermal cycling with strain accumulation, 5 cycles shown.

The next simulation is for the one-way shape-memory effect. Starting at 260 K, a 2500 N force is applied (in 10 s: 0-1 from Figure 3.13), and then released (in 10 s: 1-2). The ambient temperature is then raised up to 360 K (in 100 s: 2-3-4) and lowered to 260 K (in 200 s: 4-5). Due to the thermal inertia of the sample, the next cycle starts at a temperature of 275 K. The same sequence is repeated five times. Figure 3.13 presents the result in three different manners: there is a three-dimensional view of the phenomenon, a representation in a stress-strain graph and a representation in a strain-temperature graph. Here again, strain accumulation can be seen.



Figure 3.13 Shape-memory effect with strain accumulation.

Finally, in the simulations presented in Figures 3.11 to 3.13, the stress plasticity threshold σ_y was never reached. In order to validate the use of the stress plasticity, a tensile loading was simulated at a temperature of 328 K with a total force of 5100 N reached in 200 s. The result presented in Figure 3.14 shows the same response as the experimental curve of Figure 3.10.



Figure 3.14 Tensile test to illustrate the stress plasticity.

3.9 Validation

3.9.1 Validation based on residual strain approach

To validate the model, a series of tests were performed on an MTS-851 Mini-Bionix tensile testing machine under controlled temperature conditions. For the first one, the force was controlled according to a triangular wave of 2500 N, with a 100 s period (see Figure 3.15 for a detailed picture of the wave). The ambient temperature was set at 55°C and considered constant throughout the cycling. The experimental result is shown in Figure 3.16a for the first 10 cycles. The effect of degradation by the residual strain accumulation can be seen clearly. Figure 3.16b presents the simulation results for the same test.

Although the residual strain accumulation is very well captured by the model, the lowering of the transformation plateau is not as accurate. The poor agreement presented is due in part to thermal factor. In the experimental data, the temperature variations are violent one, mainly due to the fact that the cycling rate is fast. This behaviour would have been best described with some different thermal constant. Unfortunately, such constant would have given poorer results for purely thermal behaviour such as the thermal cycling and the strain recovery after a pause (see figure 3.18). However, since the present model is ultimately built for product development, which include introducing security factor, such deviation is not an important one.



Figure 3.15 Schematics of the applied load on the sample (cycling rate of 50 N/s).



Figure 3.16 a) Stress-strain curves for the experimental and b) for the simulated procedures.

As discussed previously, the residual strain can result from two different contributing phenomena: conventional plasticity (described by the Ramberg-Osgood formulation) created either by increased stress or phase transformation, and trapped martensite inside austenite (described by ϕ_{min} set to a value different from zero according to a cellular automata algorithm). To separate the effect of each contribution, 10 cycles are simulated from the same cycling testing as in Figure 3.16 by activating only one of the three contributions. As

mentioned earlier, the stress plasticity produced no contribution for all cycles since the plasticity threshold was not reached. The results are presented in Figure 3.17, in which the curve called "Total Simulation" is the sum of the two other contributions. A good correlation is found when comparing the total residual strain and the experimental residual strain.



Figure 3.17 Different contributions of the algorithm to the residual strain.

3.9.2 Other qualitative validations

Recently, a phenomenon called "strain recovery" has been reported by Paradis et al.[39], and occurs when the cyclic loading is paused. For example, in Figure 3.18a, when the 15th cycle of a loading is completed at the same temperature, with same force amplitude, but over a shorter time period (12s instead of 100s), no loading (0 N force) is applied for 60 s, and during this pause, the residual strain that was believed to be permanent is partially recovered (from 2.5% to 1.75% in this case), and then the 16th cycle is obtained, presenting a behaviour very similar to that of the previous cycle. Since such behaviour can be attributable to thermal considerations (see Paradis et al. [39] for details), the implementation of a thermal model capable of simulating the accumulation of a plastic strain is, to the knowledge of the authors,

a unique and original feature. In Figure 3.18b, the simulation produces a similar response. It is to note that the exact forms of the curves are not the same. This fact can be related to what was discussed above figure 3.15. However, the purpose of figure 3.18 is to present the capability of the model to include strain recovery.



Figure 3.18 Effect of a 60 s pause at 0 N during cycling for a) experimental and b) simulated data.

Finally, some experiments were performed at a lower temperature (310 K in this case), with the goal of seeing whether a cycling near temperature A_f increases the degradation rate. The loading sequence was identical to the very first simulation (maximum force of 2500 N with a

100 s period). As experimentally expected, a strong residual strain was observed (Figure 3.19a), even after only 5 cycles. A simulation of this behaviour again showed good agreement with experimental data (Figure 3.19b).



Figure 3.19 5 cycles at 4 K higher than A_f for a) experimental and b) simulated data.

3.10 Conclusion

In this paper, some adaptations of the Likhachev micromechanical model are introduced to simulate the degradation behaviour of NiTi observed during uniaxial cyclic loading. These include the use of cellular automata in a virtual space in order to change the minimum volume fraction of martensite, the use of a Ramberg-Osgood type plastic formulation at a macroscopic scale, and the use of a thermal model in order to consider the effect of phase transformation on strain accumulation, heat exchange with the surrounding areas, and stress recovery. A good agreement is seen between experimental and simulated data during different loading patterns, meaning that this model is therefore capable of more accurately describing the residual strain accumulation phenomenon observed during experimental uniaxial loading, for different SMA regimes. Some limitations were however seen in the lowering of the transformation plateau. Also, even if the parameters used are kept to a minimum, some adjustment must still be made in a minimal way. But one has to remember that the present model is built to describe in a general sense the behaviour of the alloy, not to perform some "curve fitting" of a particular behaviour of a particular alloy.

Even if a limited number of qualitative and quantitative validations are given, the main goal of this paper was to describe in a complete manner the theoretical background of the model. Of course, the model should be extensively validated in the future in order to include 3D loadings that are much more difficult to obtain experimentally.

Also, the introduction of an asymmetry could be considered since the onset of the phase transformation is different in tension and in compression for instance. A Prager-type yield criterion could be used instead of the von Mises one. Finally, an adaptation of the present model should be executed for its implementation in a finite element software. Indeed, the present formulation is controlled by stress and temperature, but with the finite elements, the controlling parameters are instead the strain and temperature.

3.11 Acknowledgement

This work was financially supported by the National Science and Engineering Research Council of Canada through the discovery grant of Prof. Terriault.

3.12 References

- [1] K. Otsuka and X. Ren, "Recent developments in the research of shape memory alloys," *Intermetallics*, vol. 7, pp. 511-528, 1999.
- [2] K. Otsuka and X. Ren, "Martensitic transformations in nonferrous shape memory alloys," Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic Transformations (ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998, Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, vol. A273-275, pp. 89-105, 1999.
- [3] R. Desroches, J. McCormick, and M. Delemont, "Cyclic properties of superelastic shape memory alloy wires and bars," *Journal of Structural Engineering*, vol. 130, pp. 38-46, 2004.
- [4] S. Nemat-Nasser and W.-G. Guo, "Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates and temperatures," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 463-474, 2006.
- Y. S. Roh, Y. Xi, and J. Summers, "Image analysis of high cycle fatigue strains of SMAs," presented at Smart Structures and Materials 2000 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 6-Mar 9 2000, Newport Beach, CA, USA, 2000.
- [6] L. C. Brinson, I. Schmidt, and R. Lammering, "Stress-induced transformation behavior of a polycrystalline NiTi shape memory alloy: Micro and macromechanical
investigations via in situ optical microscopy," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 52, pp. 1549-1571, 2004.

- [7] H. Tamai and Y. Kitagawa, "Pseudoelastic behavior of shape memory alloy wire and its application to seismic resistance member for building," *Computational Materials Science*, vol. 25, pp. 218-227, 2002.
- [8] J. McCormick, R. DesRoches, D. Fugazza, and F. Auricchio, "Seismic vibration control using superelastic shape memory alloys," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 128, pp. 294-301, 2006.
- [9] J. McCormick and R. Desroches, "The effect of training, pre-straining, and loading history on the properties of NiTi shape memory alloys for protective systems in civil structures," presented at Structures Congress 2006, May 18-21 2006, St. Louis, MO, United States, 2006.
- [10] M. C. Piedboeuf, R. Gauvin, and M. Thomas, "Damping behavior of shape memory alloys: strain amplitude, frequency and temperature effects," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 214, pp. 885-901, 1998.
- [11] K. N. Melton and O. Mercier, "FATIGUE OF NITI THERMOELASTIC MARTENSITES.," Acta Metallurgica, vol. 27, pp. 137-144, 1979.
- [12] G. B. Rao, J. Q. Wang, E. H. Han, and W. Ke, "Study of residual stress accumulation in TiNi shape memory alloy during fatigue using EBSD technique," *Materials Letters*, vol. 60, pp. 779-782, 2006.
- [13] R. M. Tabanli, N. K. Simha, and B. T. Berg, "Mean strain effects on the fatigue properties of superelastic NiTi," *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 32, pp. 1866-1869, 2001.

- [14] R. M. Tabanli, N. K. Simha, and T. Berg, "Mean stress effects on fatigue of NiTi," *Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic Transformations* (ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998 Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, vol. A273-275, pp. 644-648, 1999.
- [15] G. Eggeler, E. Hornbogen, A. Yawny, A. Heckmann, and M. Wagner, "Structural and functional fatigue of NiTi shape memory alloys," *Materials Science and Engineering A*, vol. 378, pp. 24-33, 2004.
- [16] E. Hornbogen, "Review Thermo-mechanical fatigue of shape memory alloys," *Journal of Materials Science*, vol. 39, pp. 385-399, 2004.
- [17] M. Dolce and D. Cardone, "Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications 2. Austenite NiTi wires subjected to tension," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 43, pp. 2657-2677, 2001.
- [18] R. Vaidyanathan, D. C. Dunand, and U. Ramamurty, "Fatigue crack-growth in shapememory NiTi and NiTi-TiC composites," *Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing*, vol. 289, pp. 208-216, 2000.
- [19] A. L. McKelvey and R. O. Ritchie, "Fatigue-crack propagation in Nitinol, a shapememory and superelastic endovascular stent material," *Journal of Biomedical Materials Research*, vol. 47, pp. 301-308, 1999.
- [20] Y. Kishi, Z. Yajima, K. i. Shimizu, and K. Morii, "Effects of microstructure on mechanical fatigue crack growth characteristics of a Ti-Ni-Co shape memory alloy," *Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic Transformations*

(ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998 Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, vol. A273-275, pp. 654-657, 1999.

- [21] F. Auricchio, "A robust integration-algorithm for a finite-strain shape-memory-alloy superelastic model," *International Journal of Plasticity*, vol. 17, pp. 971-990, 2001.
- [22] F. Auricchio and A. Reali, "A phenomenological one-dimensional model describing stress-induced solid phase transformation with permanent inelasticity," *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, vol. 14, pp. 43-55, 2007.
- [23] F. Auricchio, S. Marfia, and E. Sacco, "Modelling of SMA materials: Training and two way memory effects," *Computers and Structures*, vol. 81, pp. 2301-2317, 2003.
- [24] E. Patoor, D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part I: General properties and modeling of single crystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 391-429, 2006.
- [25] D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, P. Popov, E. Patoor, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part II: Modeling of polycrystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 430-462, 2006.
- [26] V. A. Likhachev, ""Structure-analytical theory of martensitic unelasticity," Proceedings of the 1995 International Conference on Martensitic Transformations, ICOMAT-95. Part 1 (of 2), Aug 20-25 1995 Journal De Physique. IV: JP, vol. 5, pp. 137-142, 1995.
- [27] Brailovski, Prokoshkin, Terriault, and Trochu, *Shape memory alloys: fundamentals, modeling and applications,*. Montréal: École de technologie supérieure, 2003.

- [28] M. E. Evard and A. E. Volkov, "Modelling of strain accumulation and recovery due to fcc-hcp transformation at thermocycles," *Proceedings of the 1998 Internal Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering, NDTCS-98, Jun 8-Jun 12 1998 Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, vol. 3687, pp. 330-334, 1999.
- [29] M. E. Evard and A. E. Volkov, "Modeling of martensite accommodation effect on mechanical behavior of shape memory alloys," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 121, pp. 102-104, 1999.
- [30] A. E. Volkov, M. E. Evard, L. N. Kurzeneva, and V. A. Likhachev, "Mathematical modeling of martensitic inelasticity and shape memory effects," *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, vol. 41, pp. 1084, 1996.
- [31] F. C. Wong, O. Boissonneault, and P. Terriault, "Hybrid micro-macro-mechanical constitutive model for shape-memory alloys," presented at Smart Structures and Materials 2005 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 7-10 2005, San Diego, CA, United States, 2005.
- [32] K. M. Knowles and D. A. Smith, "CRYSTALLOGRAPHY OF THE MARTENSITIC TRANSFORMATION IN EQUIATOMIC NICKEL-TITANIUM.," *Acta Metallurgica*, vol. 29, pp. 101-110, 1981.
- [33] Z. Moumni, A. Van Herpen, and P. Riberty, "Fatigue analysis of shape memory alloys: Energy approach," *Smart Materials and Structures*, vol. 14, pp. 287-292, 2005.
- [34] J. Van Humbeeck, "Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys," Journal of Alloys and Compounds International Symposium on High Damping Materials, 22-24 Aug. 2002, vol. 355, pp. 58-64, 2003.

- [35] S. Wolfram, *Cellular automata and complexity: collected papers*, 1 ed: Westview press, 1994.
- [36] S. Wolfram, "Random Sequence Generation by Cellular Automata," Advances in Applied Mathematics, vol. 7, pp. 123-169, 1986.
- [37] T. Georges, V. Brailovski, D. Coutu, and P. Terriault, "Design Diagram for Linear SMA Actuators integrated in a morphing wing structure," presented at SMST 2007, 2007.
- [38] W. Ramberg and W. R. Osgood, "Description of stress-strain curves by three parameters, Technical Note No. 902," National Advisory Committee for Aeronautics (United States Advisory Committee for Aeronautics), Washington, DC, United States, Technical Note, 1943.
- [39] A. Paradis, P. Terriault, V. Brailovski, and V. Torra, "On the partial Recovery of Residual Strain Accumulated During an Interrupted Cyclic Loading of NiTi Shape Memory Alloys," *Smart Materials and Structures*, 2008.

CHAPITRE 4

ARTICLE 3: GENERAL 3D STRAIN-CONTROLLED FORMULATION OF LIKHACHEV'S MODEL FOR SHAPE MEMORY ALLOYS

Paradis, A., Terriault, P. (corresponding author[†]), Brailovski, V.

Département de Génie Mécanique, École de Technologie Supérieure, 1100, Notre-Dame Street West, Montréal, Qc, Canada, H3C 1K3

[†] E-mail: <u>patrick.terriault@etsmtl.ca</u>, phone :1-514-396-8518, fax :1-514-396-8530 Le présent article a été envoyé pour publication dans la revue <u>Computer Methods in Applied</u> <u>Mechanics and Engineering</u> (Numéro de manuscrit :CMAME-D-09-00855)

Résumé

De nos jours, le développement de nouveaux produits se fait majoritairement à l'aide du calcul par éléments finis. Cette technique mathématique repose sur un aspect du contrôle des matériaux en déformation. Malheureusement, le modèle micromécanique de Likhachev est un modèle se contrôlant en contrainte. Dans le prochain article, une formulation contrôlée en déformation du modèle micromécanique de Likhachev, ayant la capacité d'inclure la dégradation de l'alliage, sera présentée. Après avoir présenté le modèle initial de Likhachev en trois dimensions, une inversion du modèle sera effectuée. Cette inversion permet l'utilisation du modèle avec la déformation et la température comme paramètre de contrôle. Une nouvelle définition de la température effective sera présentée. La simulation de la phase superélastique du matériau effectuée à l'aide du présent modèle est conforme aux données expérimentales.

Abstract

Finite elements today play an important role in the development of new products, through a displacement-based mathematical approach using material laws. For shape memory alloys (SMA), Likhachev's micromechanical model is a simple and accurate one which describes most SMA properties. Unfortunately, the original formulation of this model is stress-controlled, which drastically complicates its implementation with finite elements, especially

in a 3D context. In this work, a strain-controlled formulation of Likhachev's micromechanical model capable of simulating the alloy's degradation under cyclic loading is developed. First, the discrete 3D stress-controlled adaptation of the original Likhachev model is presented, after which a strain-controlled formulation is obtained from the model. A new definition for the effective temperature, the key concept of the Likhachev model, is proposed, which results in a direct formulation and non-iterative calculation algorithm. The superelastic behaviour of SMA, including the accumulation of irreversible strains with cycling, is simulated, and a good agreement with experiment is reached.

4.1 Introduction

Shape memory alloys (SMA) exhibit many remarkable properties, which have been extensively studied both experimentally and numerically over the past few years, such as one-way and two-way shape-memory effects [1, 2], superelasticity [3-6] and damping [7-12]. The development of technological devices using such remarkable properties is an emerging discipline with great potential.

Product development today is based mainly on computational techniques, such as the finite elements method (FEM), which enable the simulation of product behaviour, and hence a minimization of expenses associated with the manufacturing and testing of prototypes. Many medical applications using the superelastic properties of SMA have been proposed and tested, including for FEM (cardiovascular stents [13, 14], orthodontic arch wire [15], etc.). However, in some cases, where not only the first cycles of the device's service life are analysed, degradation phenomena should be taken into account in order to obtain a realistic assessment of the device performance. Furthermore, when an application requires the use of other SMA-related features (shape memory effect, assisted two-way shape memory effect, etc.), such as for actuator applications [16-18], for instance, superelastic material models are no longer enough, and so more general models need to be employed.

The present paper focuses on general 3D strain-controlled formulations suitable for use in FEM software. However, most of the validations involve 1D superelasticity cases, including the accumulation of the residual strain during cycling as the main degradation feature.

Although many models have been developed to describe general SMA behaviour (see Patoor et al. [19, 20], Tanaka et al. [21, 22], Aurrichio et al. [23], Thamburaja and Nikabdullah [24], etc.), Likhachev's micromechanical model [25] however remains the model best-suited for FEM implementation. The model is simple, physically-based, easy to characterize and numerically efficient. Further, it can describe the primary SMA features, such as shape-memory effect and superelasticity. To simulate the degradation of mechanical properties during superelastic cycling, an adaptation of this model was proposed and successfully validated by Paradis et al. [26]. The classical formulation of the Likhachev model is however constraining due to the fact that its stress and temperature are its control parameters. Since the finite elements method applied to solid mechanics uses a displacement-based algorithm (the degrees of freedom of the problem are the model's displacements, from which strains and stresses are calculated), it would be preferable, for the sake of numerical efficiency, to have a formulation with strain and temperature as the control parameters, rather than stress and temperature. This consideration is clearly outlined in classic textbooks such as Bathe [27], Zienkiewicz and Morgan [28], etc.

This article aims to present a strain-controlled formulation of the Likhachev model which can be applied to 3D problems, while being able to simulate the degradation of the alloy's superelastic properties, mainly by introducing strain accumulation with cycling. The particularity of this model lies in the fact that it can be characterized by a series of simple experiments. First, the original stress-controlled model will be presented in a discrete threedimensional formulation, after which a strain-controlled formulation will be developed. Some theoretical simulations will be used to demonstrate the validity of the strain-controlled formulation, and finally, a comparison with experimental data will be presented.

4.2 Background of the Likhachev's Model (Stress Controlled 3D Formulation)

This section presents a simplified version of the general 3D formulation as presented by Likhachev [25]. The formulation is characterized as "simplified" for the following two reasons: i) it consists in a discrete – rather than in a continuous – formulation, and ii) it takes only elastic, transformation and degradation (plastic) strains into account (other type of strains, such as microdeformation or creep, are considered in Likhachev [25]). The goal of the model is to predict the macroscopic strain rate tensor under a stress- and temperature-controlled loading.

The total strain rate is calculated using three contributions: the elastic strain rate $\dot{\varepsilon}_{ij}^{e}$, the transformation strain rate $\dot{\varepsilon}_{ij}^{ir}$ corresponding to the reversible austenite-to-martensite phase transformation, and the plasticity strain rate $\dot{\varepsilon}_{ij}^{p}$, associated with the degradation of alloy properties:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} = \dot{\varepsilon}_{ij}^{e} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{tr} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{p} \tag{4.1}$$

4.2.1 Elastic Contribution

The elastic term is determined using a mixing rule with a global martensite volume fraction in the entire material volume as a weighting parameter, $\Phi_M (0 \le \Phi_M \le 1)$:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{e} = \frac{(1 - \Phi_{M})}{E_{A}} \{ (1 + \nu_{A}) \dot{\sigma}_{ij} - \nu_{A} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \} + \frac{(\Phi_{M})}{E_{M}} \{ (1 + \nu_{M}) \dot{\sigma}_{ij} - \nu_{M} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \}$$
(4.2)

where $E_A(E_M)$ and $V_A(V_M)$ are the Young's modulus and the Poisson's ratios of austenite (martensite), $\dot{\sigma}_{ij}$ is the stress rate, and δ_{ij} is the Kronecker tensor ($\delta_{ij} = 1$ when i = j, and 0 when $i \neq j$). By assuming that the entire material volume is divided into N regions of equal volume, Φ_M is calculated as follows, with ϕ^i being the martensite volume fraction in the i^{th} region calculated in regards to the total volume of the sample:

$$\Phi_M = \sum_{i=1}^N \phi^i \tag{4.3}$$

4.2.2 Phase Transformation Contribution

To describe the transformation strain rate of equation (4.1), the distortion tensor D_{pq} between the austenite and martensite crystalline unit cells is used:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\prime\prime} = \sum_{k=1}^{N} \alpha_{pi}^{k} \alpha_{qj}^{k} D_{pq} \dot{\phi}^{k}$$

$$\tag{4.4}$$

For NiTi alloys, the distortion tensor was determined by Knowles and Smith [29] from crystallographic analysis:

$$D_{pq} = \begin{bmatrix} -0.0337 & 0 & 0\\ 0 & 0.0763 & -0.0642\\ 0 & -0.0642 & -0.0418 \end{bmatrix}$$
(4.5)

More recently, Prokoshkin et al. [30] proposed a modified distortion tensor, which is more general in the sense that it takes into account the alloy's concentration and structural state. For the alloy composition used in this work, both distortion tensors (Prokoshkin's and Knowles/Smith's) are very close, and the latter is used for simplicity.

In equation (4.4), $\dot{\phi}^k$ is the variation of the martensite proportion in the kth region and α_{ij}^k is the transformation tensor that rotates the sample's coordinate system to the kth region's coordinate system. This transformation tensor is obtained by three sequential rotations

defined by the Euler angles. It is assumed that the phase transformation of the region is oriented in a single direction defined by the distortion tensor expressed in the region's coordinate system. Since each region has its own orientation with respect to the sample's coordinate system, each transformation strain rate must be transformed into the sample's coordinate system. In equation (4), the distortion tensor D_{pq} (identical for each region) and the transformation tensor α_{ij} (different for each region) are the known material constants. Therefore, the only unknown is the evolution of the martensite volume fraction in the region, and it is calculated by the following transformation kinetics rule:

$$\dot{\phi} = \frac{\dot{T}^{*}}{M_{f} - M_{s}} H\left[-\dot{T}^{*}\right] H\left[1 - \Phi_{M}\right] H\left[1 - \phi\right] H\left[M_{s} - \phi\left(M_{s} - M_{f}\right) - T^{*}\right] + \frac{\dot{T}^{*}}{A_{s} - A_{f}} H\left[\dot{T}^{*}\right] H\left[\Phi_{M}\right] H\left[\phi\right] H\left[T^{*} - A_{f} + \phi\left(A_{f} - A_{s}\right)\right]$$

$$(4.6)$$

where A_S , A_f , M_s and M_f are the characteristic temperatures of the alloy, H[x] is the Heaviside function (H = 1 when $x \ge 0$ and 0, when x < 0), and ϕ is the current volume fractions of martensite. Finally, T^* is the effective temperature of the region. All Heaviside functions are defined to ensure that the evolution of the volume fraction of martensite obeys the kinetic rule graphically represented in Figure 4.1.



Figure 4.1 Graphical representation of the kinetic transformation rule of equation (4.6).

The effective temperature is one of the key features of the Likhachev model, which is introduced in order to consider the fact that the phase transformation can be initiated by either mechanical or thermal loading. Based on the Clausius-Clapeyron relation, the effective temperature variation in a region, a scalar value, is calculated as follows:

$$\dot{T}^* = \dot{T} - \frac{T_0}{q_0} \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \dot{\sigma}_{ij}$$
(4.7)

where T_0 is the thermodynamic equilibrium temperature given by the average of the transformation temperatures,

$$T_0 = \frac{1}{4} \left(A_S + A_f + M_S + M_f \right)$$
(4.8)

, and q_0 is the latent heat of phase transformation.

4.2.3 Degradation Contribution

As introduced by Paradis et al. [26], three contributions of degradation behaviour can be calculated: variation of the minimum martensite volume fraction, classical plasticity and transformation plasticity. Variations of the minimum martensite volume fraction have been shown to be effective only during the first few cycles. Furthermore, classical plasticity is not taken into account in this work because the stress reached never exceeds the yield limit. Hence, in the present formulation, only the contribution of transformation plasticity to degradation is considered.

The transformation plasticity model is based on a modified Ramberg-Osgood formulation. It is assumed that plasticity increases only if there is an increase in the global martensite volume fraction (that is why the Heaviside function $H[\Delta \Phi_M]$ is introduced in equation (4.9)):

$$\varepsilon_{ij}^{p} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} \delta_{pq} \left(\frac{\Phi_{M}}{K}\right)^{\left(\frac{1}{N}n(C)\right)} H[\Delta \Phi_{M}]$$
(4.9)

where K is a constant, n(C) is a scalar value, which is a function of the cycle number, and δ_{pq} is the Kronecker tensor. By increasing the n(C) value with the increasing number of cycles, the transformation plasticity becomes less significant (see Paradis et al. [26], for instance). The plastic strain rate is calculated as a variation of plastic strain during a time increment $\Delta t = t - \Delta t$.

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \frac{{}_{t}\varepsilon_{ij}^{p} - {}_{t-\Delta i}\varepsilon_{ij}^{p}}{\Delta t}$$
(4.10)

4.3 Strain Controlled 3D Formulation

In this section, the Likhachev model is adapted to calculate the stress rate resulting from the total strain rate $(\dot{\epsilon}_{ij}^{tot})$ and the temperature rate (\dot{T}) . Note that the transformation plasticity strain rate $(\dot{\epsilon}_{ij}^{p})$ as described in equations (4.9) and (4.10) does not depend on the stress rate. Therefore, equation (4.1) becomes:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} - \dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \dot{\varepsilon}_{ij}^{e} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{tr}$$
(4.11)

To isolate all the stress-dependent terms of equation (4.11) on the right-hand side, let us combine equations (4.2), (4.4) and (4.9) into equation (4.11):

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} \delta_{pq} \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\Phi_{M}}{K} \right)^{\frac{1}{n(C)}} \right] H \left[\dot{\Phi}_{M} \right] \\ = \frac{(1 - \Phi_{M})}{E_{A}} \left[(1 + \nu_{A}) \dot{\sigma}_{ij} - \nu_{A} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right] + \frac{\Phi_{M}}{E_{M}} \left[(1 + \nu_{M}) \dot{\sigma}_{ij} - \nu_{M} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right]$$

$$+ \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} D_{pq} \dot{\phi}^{n}$$

$$(4.12)$$

The transformation strain rate depends on the variation of the martensite volume fraction, as described in equation (4.4). According to equation (4.6), the variation of the martensite volume fraction is a function of the effective temperature, which, in turn depends on the stress rate. Since the stress rate is unknown, it is obvious that the phase transformation evolution must be determined from other considerations. Let us define the transformation kinetics (variation of the martensite volume fraction) by introducing the effective temperature (4.7) into equation (4.6).

$$\dot{\phi} = \frac{\dot{T}}{\Delta T_{car}} \chi - \frac{T_0}{q_0 \Delta T_{car}} \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \dot{\sigma}_{ij} \chi$$
(4.13)

 ΔT_{car} stands either for (M_s – M_f) or (A_f – A_s), assumed to be equal, and χ is the transformation threshold, a scalar value being either 0 or 1, replacing the Heaviside functions of equation (4.6). The evaluation of the transformation threshold (χ) is based on the calculation of the deviatoric strain tensor since it is assumed that the phase transformation cannot be induced by hydrostatic loading (see Gunter [31]):

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{tot} = \varepsilon_{ij}^{tot} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk}^{tot} \delta_{ij}$$
(4.14)

Since the volume of the simulated sample is divided into N regions, with each oriented differently, an oriented deviatoric strain tensor is calculated for each region n, as expressed in equation (4.15).

$$\overline{\varepsilon}_{ij}^{n} = \alpha_{pi} \alpha_{qj} \overline{\varepsilon}_{pq}^{tot}$$
(4.15)

Using standard continuum mechanic calculus (as described in Bathe [27], for instance), the equivalent strain can thus be calculated (asymmetry between tension and compression in NiTi alloys is neglected):

$$\varepsilon_{eq}^{n} = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\overline{\varepsilon}_{ij}^{n} \right) \left(\overline{\varepsilon}_{ij}^{n} \right)$$
(4.16)

To use the equivalent strain of equation (4.16) in the model, an equivalent strain rate is defined as a difference between the equivalent strains at time $t + \Delta t$ and time t, when $\Delta t \rightarrow 0$.

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{n} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{t + \Delta t}{\Delta t} \frac{\varepsilon_{eq}^{n} - \varepsilon_{eq}^{n}}{\Delta t}$$
(4.17)

With this definition of the equivalent strain rate, a different expression for the effective temperature is given by equation (4.18). In order to distinguish between the two expressions of the effective temperature (the one given by equation (4.7) for the stress-controlled

approach versus the one given by equation (4.18) for the strain-controlled approach), the superscript "+" is used in the latter.

$$\dot{T}^{+} = \frac{T_{0}}{q_{0}} \dot{\varepsilon}_{eq}^{n} E - \dot{T}$$
(4.18)

where E is the Young's modulus, determined according to a simple mixing rule between austenite and martensite phases: $E = \Phi_M E_M + (1 - \Phi_M) E_A$. The definition of the transformation threshold for the strain rate-controlled approach is thus:

$$\chi = H[\dot{T}^{+}]H[1-\Phi_{M}]H[1-\phi]H[_{n}\varepsilon_{eq} - \varepsilon_{ms} - \phi(\varepsilon_{mf} - \varepsilon_{ms})] - H[-\dot{T}^{+}]H[\Phi_{M}]H[\phi]H[\varepsilon_{af} + \phi(\varepsilon_{as} - \varepsilon_{af}) - {}_{n}\varepsilon_{eq}]$$
(4.19)

The ε_{af} , ε_{as} , ε_{ms} and ε_{mf} values are the characteristic transformation strains, as presented in Figure 4.2. It is important to note that such values are temperature-dependent. They can be calculated using basically the same material constants as in the stress-controlled formulation. They are given in equations (4.20), where ε_{as}^{0} , ε_{mf}^{0} and ε_{max} are new material constants. The value of ε_{max} is the maximum transformation strain obtained from a stress-strain diagram while ε_{as}^{0} and ε_{mf}^{0} are measured on the stress-strain diagram at A_s and M_s temperatures, as shown in Figure 4.3.



Figure 4.2 Graphical representation of the kinetic transformation rule of equation (4.19).



Figure 4.3 Graphical determination of the new material constants.

$$\varepsilon_{af}(T) = \frac{1}{E_A} \left\{ \frac{q_0}{T_0 \varepsilon_{\max}} (T - A_f) \right\}$$

$$\varepsilon_{ms}(T) = \frac{1}{E_A} \left\{ \frac{q_0}{T_0 \varepsilon_{\max}} (T - M_s) \right\}$$

$$\varepsilon_{as}(T) = \frac{1}{E_M} \left\{ \frac{q_0}{T_0 \varepsilon_{\max}} (T - A_s) \right\} + \varepsilon_{as}^0$$

$$\varepsilon_{mf}(T) = \frac{1}{E_M} \left\{ \frac{q_0}{T_0 \varepsilon_{\max}} (T - M_f) \right\} + \varepsilon_{mf}^0$$
(4.20)

To model the temperature dependency of the characteristic strains, the transformation kinetics diagram must be shifted horizontally as the temperature varies. Figure 4.4a represents a superelastic cycle at a temperature T_I slightly above A_f . The left part of the figure shows the evolution of the martensite volume fraction, while the right part presents the same cycle in the stress-strain-temperature space. The letters (A to F) are added to establish the correspondence between the two plots. Figures 4.4b and 4.4c respectively illustrate the cases where the temperature is above and below T_I , with the corresponding horizontal shift of the phase transformation kinetics. For the case of Figure 4.4c, the transformation is not completed when the stress reaches zero during unloading.



Figure 4.4 Effect of temperature on the transformation kinetics: a) $T = T_I$, b) $T > T_I$ and c) $T < T_I$.

With the use of the definition presented above for the transformation kinetics, the second term in the right-hand side of equation (4.11) (transformation strain rate) is extended, and will allow some simplifications in the sequel.

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tr} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \left(\frac{\dot{T}}{\Delta T_{car}} \mathcal{X} \right) + \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \left(\frac{-T_0}{q_0 \Delta T_{car}} \alpha_{rl} \alpha_{sm} D_{rs} \dot{\sigma}_{lm} \mathcal{X} \right)$$
(4.21)

The first term in the right hand side of equation (4.21) is stress-independent (temperatureinduced transformation), and can thus be isolated on the other side of the equality. This gives, according to equation (4.11):

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} D_{pq} \frac{\dot{T}}{\Delta T_{car}} \chi - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} \delta_{pq} \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\Phi_{M}}{K} \right)^{\frac{1}{n(C)}} \right] H \left[\dot{\Phi}_{M} \right]$$

$$= \frac{(1 - \Phi_{M})}{E_{A}} \left[(1 + v_{A}) \dot{\sigma}_{ij} - v_{A} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right] + \frac{\Phi_{M}}{E_{M}} \left[(1 + v_{M}) \dot{\sigma}_{ij} - v_{M} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right]$$

$$+ \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} D_{pq} \left(\frac{-T_{0}}{q_{0} \Delta T_{car}} \alpha_{rl}^{n} \alpha_{sm}^{n} D_{rs} \dot{\sigma}_{lm} \chi \right)$$

$$(4.22)$$

In this equation, only 6 components of the stress rate tensor remain unknown, namely $\dot{\sigma}_{11}$, $\dot{\sigma}_{22}$, $\dot{\sigma}_{33}$, $\dot{\sigma}_{12} = \dot{\sigma}_{21}$, $\dot{\sigma}_{23} = \dot{\sigma}_{32}$ and $\dot{\sigma}_{13} = \dot{\sigma}_{31}$. A system of six equations with six unknowns can therefore be built. Such a system, which is tedious to write, represents the complete relation between the stress and strain rates. The first equation of the whole system (in 11 direction) is given as an example below.

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{11}^{tot} &- \sum_{n=1}^{N} \alpha_{p1}^{n} \alpha_{q1}^{n} D_{pq} \frac{\dot{T}}{\Delta T_{car}} \chi - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{p1}^{n} \alpha_{q1}^{n} \delta_{pq} \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\Phi_{M}}{K} \right)^{\frac{1}{n(C)}} \right] H[\dot{\Phi}_{M}] \\ &= \frac{(1 - \Phi_{M})}{E_{A}} \left[(1 + \nu_{A}) \dot{\sigma}_{11} - \nu_{A} (\dot{\sigma}_{11} + \dot{\sigma}_{22} + \dot{\sigma}_{33}) \right] \\ &+ \frac{\Phi_{M}}{E_{M}} \left[(1 + \nu_{M}) \dot{\sigma}_{11} - \nu_{M} (\dot{\sigma}_{11} + \dot{\sigma}_{22} + \dot{\sigma}_{33}) \right] \\ &+ \sum_{n=1}^{N} \alpha_{p1}^{n} \alpha_{q1}^{n} D_{pq} \left(\frac{-T_{0}}{q_{0} \Delta T_{car}} \chi \left\{ \Xi_{1} \dot{\sigma}_{11} + \Xi_{2} \dot{\sigma}_{22} + \Xi_{3} \dot{\sigma}_{33} + \Xi_{4} \dot{\sigma}_{12} + \Xi_{5} \dot{\sigma}_{23} + \Xi_{6} \dot{\sigma}_{31} \right\} \end{aligned}$$

$$(4.23)$$

 Ξ_1 to Ξ_6 are scalars calculated from the expansion of the distortion tensor into each direction. They are only used here to in order to lighten the presentation. The Ξ_1 value is given here as an example, with the other five being calculated in the same manner:

$$\Xi_{1} = \begin{cases} \alpha_{11}\alpha_{11}D_{11} + \alpha_{21}\alpha_{21}D_{22} + \alpha_{31}\alpha_{31}D_{33} \\ + \alpha_{11}\alpha_{21}[D_{12} + D_{21}] + \alpha_{11}\alpha_{31}[D_{13} + D_{31}] + \alpha_{21}\alpha_{31}[D_{23} + D_{32}] \end{cases}$$
(4.24)

To solve such a system, two column six-component vectors are built, namely the stress rate vector $[\dot{\sigma}]$ and the reduced strain rate vector $[\beta]$, as represented in equation (4.25).

$$[\boldsymbol{\beta}] = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta}_{11} \\ \boldsymbol{\beta}_{22} \\ \boldsymbol{\beta}_{33} \\ \boldsymbol{\beta}_{12} \\ \boldsymbol{\beta}_{23} \\ \boldsymbol{\beta}_{31} \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad [\boldsymbol{\sigma}] = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{11} \\ \boldsymbol{\sigma}_{22} \\ \boldsymbol{\sigma}_{33} \\ \boldsymbol{\sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\sigma}_{23} \\ \boldsymbol{\sigma}_{31} \end{pmatrix}$$
 (4.25)

From the components of the total strain vector $[\beta]$, all the stress-independent terms can be retrieved:

$$\beta_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^{tot} - \sum \alpha_{pi} \alpha_{qj} D_{pq} \frac{\dot{T}}{\Delta T_{car}} \chi - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{pi}^{n} \alpha_{qj}^{n} \delta_{pq} \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\Phi_{M}}{K} \right)^{j_{n(C)}} \right] H \left[\dot{\Phi}_{M} \right]$$
(4.26)

The relation between these two-column vectors is defined using linear algebra in order to obtain a 6x6 square matrix L using equations (4.23) and (4.24). Note that equation (4.27) is not a classical stress-strain constitutive relation:

$$[\boldsymbol{\beta}] = \boldsymbol{L}[\boldsymbol{\sigma}] \tag{4.27}$$

Finally, the stress rate vector can be calculated:

$$\left[\dot{\boldsymbol{\sigma}}\right] = \left(L^{-1}\right)\left[\boldsymbol{\beta}\right] \tag{4.28}$$

Resolving such a system analytically is relatively time-consuming because it requires the inversion of an asymmetric 6x6 matrix. Fortunately, the system can be simplified because some values of the distortion tensor given by Knowles and Smith are null: $D_{12} = D_{21} = D_{13} = D_{31} = 0$.

4.4 Algorithm Implementation

This section briefly presents the manner in which the model is implemented. In order to produce all the figures in the present article, the following steps are executed:

- 1- Input: initial state; T, ε , Φ_M
- 2- Thermomechanical loading: ΔT , $\Delta \varepsilon$,
- 3- Calculation of the effective strain-temperature, equation (4.18),
- 4- Calculation of the martensite volume fraction, Figure 4.2,
- 5- Application of the modified Ramberg-Osgood plasticity relation, equations (4.9) and (4.10),
- 6- Construction of the system to be resolved, equation (4.27),
- 7- Stress increment calculation, equation (4.28),
- 8- Output: stress/strain results,

9- Restart at step 1 when required, with the newly calculated state becoming the known previous state.

4.5 Numerical Validation

To obtain data for the model calibration and validation, a 2 mm diameter Ti-50.6%atNi wire (Special Metals, NY, USA) supplied in as-drawn conditions and subjected to a 450°C (1h) annealing followed by water quenching at room temperature was used. The alloy's characterization was performed using standard testing apparatus (DSC Perkin-Elmer Pyris 1, MTS-MiniBionix 851 tensile testing machine, etc.), and the parameters obtained are listed in Table 4.1:

Table 4. 1: Model parameters

Г

$M_{\rm f} = 240 \ {\rm K}$	Martensite finish temperature
$M_{s} = 245 \text{ K}$	Martensite start temperature
$A_{s} = 300 \text{ K}$	Austenite start temperature
$A_{\rm f} = 305 \ {\rm K}$	Austenite finish temperature
$q_0 = 140 x 10^6 J/m^3$	Transformation latent heat
$E_A = 50 \times 10^9 \text{ Pa}$	Austenite Young's modulus
$E_{\rm M} = 30 \times 10^9 \ \rm Pa$	Martensite Young's modulus
<i>v</i> _A =0.33	Austenite Poisson's ratio
$V_M = 0.45$	Martensite Poisson's ratio
$D = \begin{pmatrix} -0.0337 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0763 & -0.0642 \\ 0 & -0.0642 & -0.0418 \end{pmatrix}$	Deformation tensor [29]
n = 0.001	Ramberg-Osgood constants
K = 1.006	Plasticity constant
$\varepsilon_{as}^0 = 0.065$	Offset for As strain
$\varepsilon_{mf}^{0}=0.071$	Offset for Mf strain
s = 0.08	

Initially, a direct comparison is performed between the stress-controlled and strain-controlled formulations for one superelastic cycle at $A_f = 305$ K (no material degradation is considered), as shown in Figure 4.5. The maximum loading reached during one cycle corresponds to 0.1 m/m for the strain-controlled formulation and to 1000 MPa, for the stress-controlled formulation.



Figure 4.5 Comparison between the stress-controlled and strain-controlled formulations of the Likhachev model.

In order to show the effect of temperature on the characteristic strains, three cycles are simulated at three different temperatures: the first at $A_f = 305$ K, the second at T = 295 K, and the third at T = 328 K. The results, without considering degradation, are shown in Figure 4.6.



Figure 4.6 Loading at three different temperatures (without degradation).

In order to validate the degradation feature of the present model, a comparison is performed between experimental and theoretical stress-strain curves over two superelastic cycles. The cycling occurs at a temperature of 328 K. Figure 4.7 presents the experimental results for two consecutive superelastic cycles obtained with a constant maximum strain of 0.08 m/m. Figure 4.8 presents the corresponding simulated curves. Even if a good similarity is observed between the two results (for example, the lowering of the transformation plateau), the match is not perfect. Indeed, the irreversible strain accumulation is less pronounced with the numerical case.



Figure 4.7 Experimental curves: two superelastic cycles at 328 K.



Figure 4.8 Simulated curves: two superelastic cycles at 328 K.

The model presented here can simulate 3D loadings. However, because of a lack of experimental data, no comparison is possible with other types of loadings than uniaxial tension. Nevertheless, Figure 4.9 presents the uniaxial loading at temperature A_f in the three perpendicular directions. It should be noted that such directions are arbitrary since the model

is supposed to be a polycrystalline material. However, since the model is discrete (limited number of regions), a texture is observed because the results are not identical with each direction.



Figure 4.9 Loading in different directions.

As a final simulation of the general capability of the present model, a stress-generation curve is calculated. The curve is obtained as follows. The temperature is lowered below M_f (T = 235 K), and then a strain of 0.004 m/m is applied and kept constant for the remainder of the process. The temperature is then raised up to 335 K, and lowered back to 235 K. The result is shown in Figure 4.10, where an increasing stress (from approximately 90 MPa up to 890 MPa) is simulated during heating.



Figure 4.10 Simulation of stress-generation with temperature.

4.6 Conclusion

In this paper, an adaptation of the Likhachev micromechanical model is suggested in order to improve its implementation with finite elements. First, a 3D formulation of the stress-controlled discrete version of the original model is presented, using only elastic, transformation and plastic strain rates. Afterward, in order to obtain a formulation suitable for finite element implementation, a 3D strain-controlled formulation is developed.

It is shown that the primary SMA behaviours in a superelastic regime are simulated correctly and a good agreement is found with experimental data. The strain-controlled formulation is thus a good candidate for a future implementation in FEM software. The calculation is straincontrolled, and the entire model is easy to characterize, giving it an edge over most theoretical models, for which this is a major limitation.

However, there is still some work to be performed in regard to the present formulation. For example, an extensive 3D validation is needed to completely validate the model. In this work, the validation was limited to 1D experiments. As well, other thermomechanical loadings should be obtained experimentally in order to broaden the model validation. Finally, some complete calculations should be done using commercially available FE software in order to demonstrate the validity and simplicity of the present work.

4.7 Acknowledgment

This work has been financially supported by the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) via the Discovery grant of professor Terriault

4.8 References

- 1 K. Otsuka and X. Ren, "Recent developments in the research of shape memory alloys," *Intermetallics*, vol. 7, pp. 511-528, 1999.
- K. Otsuka and X. Ren, "Martensitic transformations in nonferrous shape memory alloys," *Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic Transformations (ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998 Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing*, vol. A273-275, pp. 89-105, 1999.
- 3 R. Desroches, J. McCormick, and M. Delemont, "Cyclic properties of superelastic shape memory alloy wires and bars," *Journal of Structural Engineering*, vol. 130, pp. 38-46, 2004.

- 4 S. Nemat-Nasser and W.-G. Guo, "Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates and temperatures," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 463-474, 2006.
- 5 Y. S. Roh, Y. Xi, and J. Summers, "Image analysis of high cycle fatigue strains of SMAs," presented at Smart Structures and Materials 2000 Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 6-Mar 9 2000, Newport Beach, CA, USA, 2000.
- 6 L. C. Brinson, I. Schmidt, and R. Lammering, "Stress-induced transformation behavior of a polycrystalline NiTi shape memory alloy: Micro and macromechanical investigations via in situ optical microscopy," *Journal of the Mechanics and Physics* of Solids, vol. 52, pp. 1549-1571, 2004.
- 7 H. Tamai and Y. Kitagawa, "Pseudoelastic behavior of shape memory alloy wire and its application to seismic resistance member for building," *Computational Materials Science*, vol. 25, pp. 218-227, 2002.
- ⁸ J. McCormick, R. DesRoches, D. Fugazza, and F. Auricchio, "Seismic vibration control using superelastic shape memory alloys," *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, vol. 128, pp. 294-301, 2006.
- 9 J. McCormick and R. Desroches, "The effect of training, pre-straining, and loading history on the properties of NiTi shape memory alloys for protective systems in civil structures," presented at Structures Congress 2006, May 18-21 2006, St. Louis, MO, United States, 2006.
- 10 M. C. Piedboeuf, R. Gauvin, and M. Thomas, "Damping behavior of shape memory alloys: strain amplitude, frequency and temperature effects," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 214, pp. 885-901, 1998.
- 11 C. Auguet, A. Isalgue, F. C. Lovey, F. Martorell, and V. Torra, "Metastable effects on martensitic transformation in SMA: Part 4. Thermomechanical properties of CuAlBe and NiTi observations for dampers in family houses," *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 88, pp. 537-548, 2007.
- 12 L. Saint-Sulpice, S. A. Chirani, and S. Calloch, "Super-elastic behavior of shape memory alloys under proportional cyclic loadings," *Materials Science & amp; Engineering: A (Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing)*, vol. 481-482, pp. 174-7, 2008.
- 13 F. Auricchio and L. Petrini, "A three-dimensional model describing stresstemperature induced solid phase transformations: Solution algorithm and boundary value problems," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 61, pp. 807-836, 2004.

- 14 F. Trochu and P. Terriault, "Nonlinear modelling of hysteretic material laws by dual kriging and application," presented at Symposium on Advances in Computational Mechanics, 12-15 Jan. 1997 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Switzerland, 1998.
- 15 K. Otsuka and C. M. Wayman, *Shape memory materials*, 1st ed. England: Cambridge, 1998.
- 16 T. Georges, V. Brailovski, D. Coutu, and P. Terriault, "Design Diagram for Linear SMA Actuators integrated in a morphing wing structure," presented at SMST 2007, Tsukuba, Japan, 2007.
- 17 C. Grossmann, J. Frenzel, V. Sampath, T. Depka, A. Oppenkowski, C. Somsen, K. Neuking, W. Theisen, and G. Eggeler, "Processing and property assessment of NiTi and NiTiCu shape memory actuator springs," *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, vol. 39, pp. 499-510, 2008.
- O. W. Bertacchini, D. C. Lagoudas, F. T. Calkins, and J. H. Mabe,
 "Thermomechanical cyclic loading and fatigue life characterization of nickel rich NiTi shape-memory alloy actuators," presented at Behavior and Mechanics of Multifunctional and Composite Materials 2008, March 10, 2008 - March 13, 2008, San Diego, CA, United states, 2008.
- 19 E. Patoor, D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part I: General properties and modeling of single crystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 391-429, 2006.
- 20 D. C. Lagoudas, P. B. Entchev, P. Popov, E. Patoor, L. C. Brinson, and X. Gao, "Shape memory alloys, Part II: Modeling of polycrystals," *Shape Memory Alloys Mechanics of Materials*, vol. 38, pp. 430-462, 2006.
- 21 K. Tanaka and R. Iwasaki, "Phenomenological Theory Of Transformation Superelasticity," *Plast Today, New Solutions and Trends in Plast, Jun 27-30 1983 Engineering Fracture Mechanics*, vol. 21, pp. 709-720, 1983.
- 22 K. Tanaka, "Thermomechanical Sketch Of Shape Memory Effect: One-Dimensional Tensile Behavior," *Res Mechanica: International Journal of Structural Mechanics and Materials Science*, vol. 18, pp. 251-263, 1986.
- 23 F. Auricchio, S. Marfia, and E. Sacco, "Modelling of SMA materials: Training and two way memory effects," *Computers and Structures*, vol. 81, pp. 2301-2317, 2003.
- 24 P. Thamburaja and N. Nikabdullah, "A macroscopic constitutive model for shapememory alloys: theory and finite-element simulations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 198, pp. 1074-86, 2009.

- 25 V. A. Likhachev, "Structure-analytical theory of martensitic unelasticity," *Proceedings of the 1995 International Conference on Martensitic Transformations, ICOMAT-95. Part 1 (of 2), Aug 20-25 1995 Journal De Physique. IV: JP*, vol. 5, pp. 137-142, 1995.
- 26 A. Paradis, P. Terriault, and V. Brailovski, "Modeling of Residual Strain Accumulation of NiTi Shape Memory Alloys Under Uniaxial Cyclic Loading," *Computational Materials Science*, doi:10.1016/j.commatsci.2009.08.013.
- 27 K.-J. Bathe, *Finite Element Procedures*. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice-Hall, 1996.
- 28 O. C. Zienkiewicz and K. Morgan, *Finite Element and Approximation*. Mineola, N.Y.: Dover Publications inc., 1983.
- 29 K. M. Knowles and D. A. Smith, "Crystallography Of The Martensitic Transformation In Equiatomic Nickel-Titanium.," *Acta Metallurgica*, vol. 29, pp. 101-110, 1981.
- 30 S. D. Prokoshkin, A. V. Korotitskiy, V. Brailovski, S. Turenne, I. Y. Khmelevskaya, and I. B. Trubitsyna, "On the lattice parameters of phases in binary Ti-Ni shape memory alloys," *Acta Materialia*, vol. 52, pp. 4479-4492, 2004.
- 31 V. Gunter, *Shape Memory Effects (in Russian)*. Novossibirsk, Russia: Nauka, 1992.

CHAPITRE 5

ARTICLE 3: DÉVELOPPEMENT RÉCENT

Le but du présent chapitre est de faire le point sur la situation de l'article 3, présenté au chapitre 4 de la thèse, et soumis pour publication au journal scientifique « Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering ». Cette mise à jour concerne l'état de la soumission en date du 11 février 2010, c'est-à-dire en date de la soutenance de la thèse.

L'article présenté au chapitre 4 de la thèse a été refusé pour publication dans sa forme actuelle, le 19 janvier 2010, soit 3 semaines avant la soutenance de la thèse. L'éditeur de la revue mentionne que suite aux recommandations des examinateurs, il se voit dans l'obligation de refuser la publication de l'article. Les principales raisons du refus se résument de la façon suivante :

Examinateur 1 :

- Le modèle tel que présenté ne se base que sur un article de conférence. Ceci n'est pas un indicateur fiable de la validité du modèle.
- L'examinateur questionne l'application discrète du modèle. De plus, il ne semble pas comprendre l'utilisation de la notation tensorielle dans l'article en entier.
- L'examinateur se questionne sur l'absence de base thermodynamique au modèle, bien que cette dernière soit présentée dans l'article.
- L'examinateur soulève plusieurs points discutables (numérotation des pages, qualité de la langue, abréviations non clairement définies dans le texte avant utilisation (FEM), etc.)

Examinateur 2 :

- L'article ne présente pas la base théorique du modèle; il se base sur un article de conférence. Ce point est similaire à celui soulevé par l'examinateur 1 et semble donc majeur.
- L'examinateur se questionne sur l'absence de validation en trois dimensions de l'algorithme.
- La provenance physique explicite de certaines équations n'est pas clairement définie.
- La robustesse de l'algorithme n'est pas discutée.

Globalement, les commentaires de l'examinateur 1 sont très mauvais vis-à-vis l'article et peu ou pas constructifs. Par contre, ceux de l'examinateur 2 semblent plus à propos et sont plus étayés sur le fond. Les points importants à retenir de l'évaluation des examinateurs sont les suivants :

- Il importe de mieux présenter la provenance de l'algorithme utilisé. Le modèle de Likhachev ne semble pas être familier à de nombreux chercheurs.
- Il faut mieux valider le modèle par de nombreuses comparaisons numériques, tant avec le modèle de base qu'avec des modèles existants.
- Il faut discuter de la sensibilité des paramètres du modèle.

Le point de la sensibilité a d'ailleurs été soulevé comme étant absent de la thèse par certains membres du jury. Il sera donc un des points importants à traiter dans la suite des choses.

Pour faire suite à la décision de l'éditeur de la revue de ne pas publier l'article en se basant sur les commentaires des examinateurs, les changements suivant seront apportés à l'article présenté au chapitre 4 de la thèse :

- 1- La matière sera présentée en deux articles distincts :
 - Le premier sera la présentation théorique du modèle, incluant la provenance, l'utilisation de l'analyse structurelle en modélisation, l'application des hypothèses utilisées et leurs limitations.
 - ii) Le second article portera sur l'implantation de l'algorithme de façon plus extensive dans des logiciels de simulation. Il y aura comparaisons en trois dimensions, présentation de l'étude de sensibilité des paramètres du modèle et, selon les données disponibles, il pourrait également y avoir une première implantation du modèle dans un logiciel d'analyses par éléments finis afin de simuler le comportement d'une géométrie relativement simple. Ce point reste par contre à établir.
- 2- Une revue de la littérature plus exhaustive relativement à l'utilisation de l'algorithme de Likhachev sera faite et présentée dans l'article sur l'explication théorique du modèle pour assoir la validité de la théorie sous-jacente.
- 3- Une plus grande explication de l'utilisation des notions de thermodynamique des phénomènes irréversibles sera présentée, également dans le premier article.

Suivant ces changements, qui devraient s'opérer d'ici quelques mois (un à deux pour l'article plus théorique et 3 à 4 pour la portion de validation extensive), il y aura re-soumission des articles à des revues spécialisées. Pour l'article plus théorique, le choix devrait s'arrêter sur une revue comme « European Journal of Physic : B », bien que ce choix ne soit pas encore entièrement arrêté pour le moment. Pour l'article de modélisation, le choix n'est pas encore effectué.
CONCLUSION GÉNÉRALE

La présente thèse avait pour but de mettre au point un modèle de simulation capable de traiter la dégradation de l'alliage NiTi soumis à un chargement cyclique. Après une brève introduction générale sur les alliages à mémoire de forme, différents travaux de recherche existants sur le sujet ont été présentés. Une courte présentation de l'originalité des travaux de recherche effectués ainsi que de la méthodologie employée à ensuite été effectuée. Par la suite, les trois publications générées dans le cadre de cette thèse ont été présentées dans les trois chapitres subséquents.

Dans le premier article (chapitre 2), une étude expérimentale des propriétés fonctionnelles de l'alliage est effectuée. Une explication du phénomène de recouvrement de déformation (strain recovery) est présentée comme étant un phénomène thermique. Les évidences expérimentales de l'explication sont bien démontrées. De plus, le phénomène d'augmentation de la valeur, en contrainte, du plateau de transformation suite à une pause dans la sollicitation cyclique est clairement mis en évidence. Ce phénomène qui n'était pas expliqué par le passé est maintenant mieux compris. Une application simple de la relation de Clausius-Clapeyron permet de visualiser le phénomène. La contribution de l'auteur à cet article est, en premier lieu, le design et la réalisation des expériences effectuées dans le but de quantifier la dégradation. Ensuite, le fait d'avoir remarqué l'influence de la température, d'avoir posé une partie de l'hypothèse pour comprendre ce qui se passe et d'avoir validé le tout avec de nouveaux tests sont également des contributions de l'auteur.

Dans le second article (chapitre 3), un modèle constitutif incluant la dégradation est proposé. Il s'agit d'une adaptation du modèle micromécanique de Likhachev. Cette adaptation, permettant de simuler correctement la dégradation de l'alliage lors de différents types de chargements, peut se résumer en trois points : ajout d'un algorithme d'automate cellulaire, ajout d'un terme de plasticité, incluant la plasticité classique et celle issue de la transformation de phase et finalement l'ajout d'un module thermique. Ces contributions forment une nouveauté intéressante dans le domaine de la modélisation des AMF car elles permettent d'inclure la dégradation là où autrefois elle n'était pas modélisée. La contribution de l'auteur a été d'imaginer et de construire les adaptations (automate cellulaire et Ramberg-Osgood), de programmer le modèle et de valider le modèle, tant de façon théorique qu'expérimentale. De plus, l'auteur a écrit l'article en entier.

Dans le dernier article (chapitre 4), une inversion de l'algorithme de Likhachev a permis de définir un modèle pouvant être utilisé aisément dans un logiciel de calcul par éléments finis. L'approche novatrice de cet article ce concentre en trois points. Tout d'abord, le modèle de Likhachev tridimensionnel n'avait jamais été adapté aux analyses par éléments finis de façon directe. Ensuite, bien que le modèle de Likhachev sans dégradation ait été par le passé utilisé pour effectuer du calcul par éléments finis unidimensionnel, la formulation proposée dans le chapitre 4 devrait permettre une économie de temps de calcul considérable et une possibilité d'effectuer des calculs en 3 dimensions. Finalement, l'ajout de la dégradation à l'algorithme de Likhachev dans le contexte du contrôle en déformation est une nouveauté. La contribution de l'auteur à cet article a été l'analyse mathématique du modèle et l'élaboration de la formulation inverse. L'élaboration de l'étude de la dégradation dans un contexte de contrôle en déformation est aussi une contribution de l'auteur. De plus, l'auteur a écrit l'article en entier.

Il est clair cependant que les modèles développés dans cette thèse nécessitent encore des développements. Par exemple, l'algorithme inversé du chapitre 4 n'a été validé qu'en une seule dimension. De plus, l'effet mémoire double sens assisté n'a pas été complètement modélisée à l'aide du modèle proposé. Également, le modèle tridimensionnel incluant la plasticité serait un aspect intéressant à valider. Pour ce faire, une caractérisation complète en chargements multiaxiaux (tension bi-axiale, tension-torsion, etc.) de l'alliage devra être faite, permettant d'étendre les notions de dégradation à plus d'une dimension.

Il reste également une étape majeure à effectuer. L'implémentation du modèle du chapitre 4 (contrôlé en déplacement) dans un logiciel de calcul par éléments finis reconnu (ANSYS, ABAQUS, etc.) n'a pas été faite. Il resterait donc à faire des simulations sur des pièces

d'ingénierie complexes et à valider les résultats ainsi obtenus avec des résultats expérimentaux.

Malgré leurs quelques défauts, les modèles présentés dans cette thèse constituent un avancement dans la modélisation des AMF pour les raisons suivantes. Les modèles proposés sont aisément caractérisables et comportent un minimum de constantes ad hoc à définir. Les modèles reproduisent assez bien les comportements expérimentaux observés et ils sont capables de simuler différents types de comportements particuliers des AMF (superélasticité, effet mémoire, etc.). Somme toute, les objectifs de recherche initialement fixés ont été atteints.

LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ASM http://products.asminternational.org/hbk/index.jsp. A. internationnal, ASM. 2007.

- Auricchio, F. (2001). "A robust integration-algorithm for a finite-strain shape-memory-alloy superelastic model." <u>International Journal of Plasticity</u> **17**(7): 971-990.
- Auricchio, F., S. Marfia, et al. (2003). "Modelling of SMA materials: Training and two way memory effects." <u>Computers and Structures</u> 81(24-25): 2301-2317.
- Auricchio, F. and A. Reali (2007). "A phenomenological one-dimensional model describing stress-induced solid phase transformation with permanent inelasticity." <u>Mechanics of Advanced Materials and Structures</u> 14(1): 43-55.
- Baïlon, J.-P. and J.-M. Dorlot (2000). <u>Des matériaux</u>. Montréal, Presses internationales Polytechnique.
- Bannantine, J. A., J. J. Comer, et al. (1990). <u>Fundamentals of metal fatigue analysis</u>. Englewood Cliffs, N.J, Prentice-Hall.
- Bathe, K.-J. (1996). <u>Finite Element Procedures</u>. Upper Saddle River, New Jersey, Prentice-Hall.
- Belyaev, S., A. Petrov, et al. (2004). "Mechanical properties of titanium nickelide at high strain rate loading." <u>Materials Science and Engineering A</u> 378(1-2 SPEC ISS): 122-124.
- Benzaoui, H., C. Lexcellent, et al. (1997). "Experimental study and modeling of a TiNi shape memory alloy wire actuator." Journal of Intelligent Material Systems and Structures 8(7): 619-29.
- Bo, Z. and D. C. Lagoudas (1999). "Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part I: Theoretical derivations." <u>International Journal of</u> <u>Engineering Science</u> 37(9): 1089-1140.
- Bo, Z. and D. C. Lagoudas (1999). "Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part III: Evolution of plastic strains and two-way shape memory effect." <u>International Journal of Engineering Science</u> 37(9): 1175-1203.
- Bo, Z. and D. C. Lagoudas (1999). "Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part IV: Modeling of minor hysteresis loops." <u>International</u> <u>Journal of Engineering Science</u> 37(9): 1205-1249.

Bolotin, V. V. (1999). Mechanics of fatigue. Boca Raton, Flor, CRC Press.

- Brailovski, Prokoshkin, et al. (2003). <u>Shape memory alloys : fundamentals, modeling and applications</u>. Montréal, École de technologie supérieure.
- Breczko, T. and K. Kus (2001). "Residual stresses and shape memory effect." <u>Transactions</u> of the Institute of Fluid-Flow Machinery(108): 33-45.
- Breczko, T. and K. Kus (2002). <u>Development of residual stresses in shape memory alloys</u> <u>under thermomechanical cycle loadings</u>. Fifth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering, 12-17 June 2001 Proceedings of the SPIE - The International Society for Optical Engineering, USA, SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.
- Brinson, L. C., I. Schmidt, et al. (2004). "Stress-induced transformation behavior of a polycrystalline NiTi shape memory alloy: Micro and macromechanical investigations via in situ optical microscopy." Journal of the Mechanics and Physics of Solids 52(7): 1549-1571.
- Chang, B.-C., J. A. Shaw, et al. (2006). "Thermodynamics of shape memory alloy wire: Modeling, experiments, and application." <u>Continuum Mechanics and</u> <u>Thermodynamics</u> 18(1-2): 83-118.
- Chopard, B. and M. Droz (2005). <u>Cellular Automata Modeling of Physical Systems</u>. New York, Cambridge University Press.
- Desroches, R., J. McCormick, et al. (2004). "Cyclic properties of superelastic shape memory alloy wires and bars." Journal of Structural Engineering **130**(1): 38-46.
- Dolce, M. and D. Cardone (2001). "Mechanical behaviour of shape memory alloys for seismic applications 2. Austenite NiTi wires subjected to tension." <u>International</u> <u>Journal of Mechanical Sciences</u> 43(11): 2657-2677.
- Dowling, N. E. (1999). chap11-12-14. <u>Mechanical behavior of materials</u> : engineering <u>methods for deformation, fracture, and fatigue</u>. Upper Saddle River, Prentice-Hall: 830.
- Eggeler, G., E. Hornbogen, et al. (2004). "Structural and functional fatigue of NiTi shape memory alloys." <u>Materials Science and Engineering A</u> **378**(1-2 SPEC ISS): 24-33.
- Evard, M. E. and A. E. Volkov (1999). "Modeling of martensite accommodation effect on mechanical behavior of shape memory alloys." <u>Journal of Engineering Materials and Technology</u>, <u>Transactions of the ASME</u> 121(1): 102-104.

- Evard, M. E. and A. E. Volkov (1999). "Modelling of strain accumulation and recovery due to fcc-hcp transformation at thermocycles." <u>Proceedings of the 1998 Internal</u> <u>Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and</u> <u>Engineering, NDTCS-98, Jun 8-Jun 12 1998 Proceedings of SPIE - The International</u> Society for Optical Engineering **3687**: 330-334.
- Franzosi, R. and M. Pettini (2004). "Theorem on the Origin of Phase Transitions." <u>Physical</u> <u>Review Letters</u> 92(6): 60601-1.
- Franzosi, R. and M. Pettini (2007). "Topology and phase transitions II. Theorem on a necessary relation." <u>Nuclear Physics, Section B</u> **782**(3): 219-40.
- Franzosi, R., M. Pettini, et al. (2007). "Topology and phase transitions. I. Preliminary results." <u>Nuclear Physics, Section B</u> **782**(3): 189-218.
- Gall, K. and H. J. Maier (2002). "Cyclic deformation mechanisms in precipitated NiTi shape memory alloys." <u>Acta Materialia</u> **50**(18): 4643-4657.
- Gall, K., H. Sehitoglu, et al. (2001). "On the mechanical behavior of single crystal NiTi shape memory alloys and related polycrystalline phenomenon." <u>Materials Science</u> <u>and Engineering A</u> 317(1-2): 85-92.
- Hill, R. (1998). The Mathematical Theory of Plasticity. New York, Oxford Unversity Press.
- Hodgson, D. E. (2004). Shaping the nitinol industry. San Jose, Johnson Matthey.
- Hornbogen, E. (2002). "Some effects of martensitic transformation on fatigue resistance." <u>Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures</u> **25**(8-9): 785-790.
- Hornbogen, E. (2004). "Review Thermo-mechanical fatigue of shape memory alloys." Journal of Materials Science **39**(2): 385-399.
- Hornbogen, E. and G. Eggeler (2004). "Surface aspects in fatigue of Shape Memory Alloys (SMA)." <u>Materialwissenschaft und Werkstofftechnik</u> **35**(5): 255-259.
- Huang, W. (1999). ""Yield" surfaces of shape memory alloys and their applications." <u>Acta</u> <u>Materialia</u> **47**(9): 2769-76.
- Lagoudas, D. C. and Z. Bo (1999). "Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part II: Material characterization and experimental results for a stable transformation cycle." <u>International Journal of Engineering Science</u> **37**(9): 1141-1173.
- Lagoudas, D. C., P. B. Entchev, et al. (2006). "Shape memory alloys, Part II: Modeling of polycrystals." <u>Shape Memory Alloys Mechanics of Materials</u> 38(5-6): 430-462.

- Lagoudas, D. C., J. J. Mayes, et al. (2001). <u>Simplified Shape Memory Alloy (SMA) material</u> <u>model for vibration isolation</u>. Smart Structures and Materials 2001-Modeling, Signal Processing, and Control in Smart Structures-, Mar 5-8 2001, Newport Beach, CA, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers.
- Leclercq, S., C. Lexcellent, et al. (1996). <u>A finite element calculation for the design of devices made of shape memory alloys</u>. MECAMAT '95 International Seminar on Mechanics and Mechanisms of Solid-Solid Phase Transformations, 16-19 May 1995 Journal de Physique IV (Colloque), France, Editions de Physique.
- Lexcellent, C., M. L. Boubakar, et al. (2006). "About modelling the shape memory alloy behaviour based on the phase transformation surface identification under proportional loading and anisothermal conditions." <u>International Journal of Solids and Structures</u> 43(3-4): 613-26.
- Li, H.-N., D. Cui, et al. (2007). "Hysteresis model for superelasticity of shape memory alloy based on ANN." Key Engineering Materials **340-341 II**: 1175-1180.
- Likhachev, V. A. (1995). "Structure-analitycal theory of martensitic unelasticity." <u>Proceedings of the 1995 International Conference on Martensitic Transformations,</u> <u>ICOMAT-95. Part 1 (of 2), Aug 20-25 1995 Journal De Physique. IV : JP</u> **5**(8 pt 1): 137-142.
- Likhachev, V. A. and V. G. Malinin (1988). "Equations of the general theory of plasticity of crystals." <u>Soviet Physics Journal Uchebnykh Zavedenii, Fizika)Soviet Physics</u> Journal (English Translation of Izvestiia Vysshykh **31**(6): 487-491.
- Liu, Y., Z. Xie, et al. (1998). "Asymmetry of stress-strain curves under tension and compression for NiTi shape memory alloys." <u>Acta Materialia</u> **46**(12): 4325-4338.
- Malecot, P., C. Lexcellent, et al. (2006). "Shape memory alloys cyclic behavior: Experimental study and modeling." <u>Journal of Engineering Materials and</u> <u>Technology</u>, <u>Transactions of the ASME</u> **128**(3): 335-345.
- McCormick, J., R. DesRoches, et al. (2006). "Seismic vibration control using superelastic shape memory alloys." Journal of Engineering Materials and Technology, <u>Transactions of the ASME</u> **128**(3): 294-301.
- McKelvey, A. L. and R. O. Ritchie (1999). "Fatigue-crack propagation in Nitinol, a shapememory and superelastic endovascular stent material." <u>Journal of Biomedical</u> <u>Materials Research</u> 47(3): 301-308.
- Melton, K. N. and O. Mercier (1979). "FATIGUE OF NITI THERMOELASTIC MARTENSITES." <u>Acta Metallurgica</u> 27(1): 137-144.

- Montgomery, D. C. (2005). <u>Design and Analysis of Experiments</u>. United States of America, John Wiley & Sons, Inc.
- Moumni, Z., A. Van Herpen, et al. (2005). "Fatigue analysis of shape memory alloys: Energy approach." <u>Smart Materials and Structures</u> 14(5): 287-292.
- Nemat-Nasser, S. and W.-G. Guo (2006). "Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates and temperatures." <u>Shape Memory Alloys Mechanics of Materials</u> 38(5-6): 463-474.
- Otsuka, K. and X. Ren (1999a). "Martensitic transformations in nonferrous shape memory alloys." <u>Proceedings of the 1998 International Conference on Martensitic</u> <u>Transformations (ICOMAT 98), Dec 7-Dec 11 1998 Materials Science and</u> <u>Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing</u> A273-275: 89-105.
- Otsuka, K. and X. Ren (1999b). "Recent developments in the research of shape memory alloys." <u>Intermetallics</u> 7(5): 511-528.
- Otsuka, K. and C. M. Wayman (1998). Shape memory materials. Angleterre, Cambridge.
- Patoor, E., D. C. Lagoudas, et al. (2006). "Shape memory alloys, Part I: General properties and modeling of single crystals." <u>Shape Memory Alloys Mechanics of Materials</u> 38(5-6): 391-429.
- Piedboeuf, M. C., R. Gauvin, et al. (1998). "Damping behavior of shape memory alloys: strain amplitude, frequency and temperature effects." Journal of Sound and Vibration **214**(5): 885-901.
- Ren, W., H. Li, et al. (2007). "Phenomenological modeling of the cyclic behavior of superelastic shape memory alloys." <u>Smart Materials and Structures</u> 16(4): 1083-1089.
- Sadjadpour, A. and K. Bhattacharya (2007). "A micromechanics inspired constitutive model for shape-memory alloys: the one-dimensional case." <u>Smart Materials and Structures</u> 16(1): 51-62.
- Schmidt, I. (2006). "A phenomenological model for superelastic NiTi wires based on plasticity with focus on strain-rate dependency caused by temperature." <u>Journal of</u> <u>Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME</u> 128(3): 279-284.

Sedov, L. I. (1997). Mechanics of Continuous Media- vol1. Singapore, World Scientific.

Sedov, L. I. (1997). Mechanics of Continuous Media- vol2. Singapore, World Scientific.

- Seelecke, S. and I. Muller (2004). "Shape memory alloy actuators in smart structures: Modeling and simulation." <u>Applied Mechanics Reviews</u> **57**(1-6): 23-46.
- Sittner, P., Y. Liu, et al. (2005). "On the origin of Luders-like deformation of NiTi shape memory alloys." Journal of the Mechanics and Physics of Solids **53**(8): 1719-1746.
- Spencer, A. J. M. (2004). Continuum Mechanics. Mineola, N.Y., Dover Publications, Inc.
- Tamai, H. and Y. Kitagawa (2002). "Pseudoelastic behavior of shape memory alloy wire and its application to seismic resistance member for building." <u>Computational Materials</u> <u>Science</u> 25(1-2): 218-227.
- Tanaka, K. (1986). "THERMOMECHANICAL SKETCH OF SHAPE MEMORY EFFECT: ONE-DIMENSIONAL TENSILE BEHAVIOR." <u>Res Mechanica: International</u> Journal of Structural Mechanics and Materials Science **18**(3): 251-263.
- Tanaka, K., S. Kobayashi, et al. (1986). "THERMOMECHANICS OF TRANSFORMATION PSEUDOELASTICITY AND SHAPE MEMORY EFFECT IN ALLOYS." <u>International Journal of Plasticity</u> **2**(1): 59-72.
- Tanaka, K., F. Nishimura, et al. (1995). "Phenomenological analysis on subloops and cyclic behavior in shape memory alloys under mechanical and/or thermal loads." <u>Mechanics of Materials</u> 19(4): 281-292.
- Thamburaja, P. and N. Nikabdullah (2009). "A macroscopic constitutive model for shapememory alloys: theory and finite-element simulations." <u>Computer Methods in</u> <u>Applied Mechanics and Engineering 198(9-12)</u>: 1074-86.
- Thiebaud, F., C. Lexcellent, et al. (2007). "Implementation of a model taking into account the asymmetry between tension and compression, the temperature effects in a finite element code for shape memory alloys structures calculations." <u>Computational Materials Science</u> **41**(2): 208-221.
- Torra, V., A. Isalgue, et al. (2001). <u>Guaranteed behavior in shape memory alloys: Short- and long-time effects related to temperature and phase coexistence</u>. 22nd Italian Congress on Calorimetry Thermal Analysis and Chemical Thermodynamics (AICAT-GICAT Meeting 2000), Dec 15-31 2001, Camogli, Kluwer Academic Publishers.
- Vaidyanathan, R., D. C. Dunand, et al. (2000). "Fatigue crack-growth in shape-memory NiTi and NiTi-TiC composites." <u>Materials Science and Engineering A: Structural</u> <u>Materials: Properties, Microstructure and Processing</u> 289(1): 208-216.
- Van Humbeeck, J. (2003). "Damping capacity of thermoelastic martensite in shape memory alloys." <u>Journal of Alloys and Compounds International Symposium on High</u> <u>Damping Materials</u>, 22-24 Aug. 2002 355: 58-64.

Wagner, M. F.-X., N. Nayan, et al. (2008). "Healing of fatigue damage in NiTi shape memory alloys." Journal of Physics D: Applied Physics 41(18): 185408 (4 pp.).

Wolfram, S. (1994). Cellular automata and complexity: collected papers, Westview press.

Wolfram, S. (2002). <u>A New Kind of Science</u>. Champaign, Ill., Wolfram Media.

- Wong, F. C., O. Boissonneault, et al. (2005). <u>Hybrid micro-macro-mechanical constitutive</u> <u>model for shape-memory alloys</u>. Smart Structures and Materials 2005 - Active Materials: Behavior and Mechanics, Mar 7-10 2005, San Diego, CA, United States, Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering.
- Zhang, J., X. Ren, et al. (1999). "Reversible change in transformation temperatures of a Ti-51at%Ni alloy associated with alternating aging." <u>Scripta Materialia</u> **41**(10): 1109-1113.
- Zienkiewicz, O. C. and K. Morgan (1983). <u>Finite Element and Approximation</u>. Mineola, N.Y., Dover Publications inc.