

Simulation numérique des effets d'une distribution hétérogène d'hydrogène sur la réponse thermomécanique de structures en alliages à mémoires de forme à base nickel-titane

N. ULFF^a, C. BOUBY^a, A. LACHIGUER^b, T. BOURAOU^b,
T. BEN ZINEB^a

a. Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, F-54000 Nancy, France
email : nicolas.ulff@univ-lorraine.fr

b. LGM, ENIM, Université de Monastir, Monastir, Av. Ibn ElJazzar, 5019, Tunisia.

Résumé :

Les fils orthodontiques en alliages à mémoire de forme (AMF) NiTi sont soumis à des chargements complexes dans la bouche, notamment chimiques. Dans les cas les plus défavorables, des ruptures peuvent être observées, dues au phénomène de fragilisation par hydrogène analogue à celui observé dans les alliages à base de Titane. Pour prendre en compte les effets de la diffusion de l'hydrogène, une loi de comportement intégrant le couplage chimio-thermo-mécanique doit donc être formulée. Le travail de Lachiguer et al. (2016) a introduit dans un premier temps une dépendance des paramètres matériaux à la concentration normalisée d'hydrogène dans une loi de comportement dédiée aux AMF NiTi. La principale limitation de ce modèle provient du fait que la répartition de la concentration d'hydrogène est considérée comme homogène. Des essais de nano-indentation sur des fils en NiTi préalablement chargés en hydrogène ont mis en évidence une répartition hétérogène de dureté, indirectement reliée à la quantité d'hydrogène. Il devient donc nécessaire de prendre en compte le gradient de concentration au sein du fil en développant un élément fini spécifique. A cette fin, les formes faibles des équations d'équilibres de chaque champ (chimique, thermique et mécanique), pour un domaine quelconque, sont discrétisées et intégrées numériquement par la méthode des éléments finis. Un élément avec des degrés de liberté couplés (déplacement, température et concentration d'hydrogène) est développé et implémenté dans le logiciel d'éléments finis Abaqus[©] à travers la sous routine UEL (User Element). Des simulations numériques avec des cas de chargement complexe ont été effectuées et sont présentées pour montrer la pertinence de l'approche choisie.

Abstract :

NiTi Shape Memory Alloys (SMAs) orthodontic wires are subject to complex chemical loading in oral cavities. In the worst case, fractures are observed. Hydrogen effects are suspected, by analogy with the hydrogen embrittlement in Ti alloy systems. Accounting for effects of hydrogen diffusion on the NiTi behavior, a coupled chemo-thermo-mechanical constitutive model needs to be formulated. The work of (Lachiguer and al., 2016) proposes material parameter dependencies to the normalized concentration

of hydrogen in a NiTi constitutive law. The main limitation of this model is that the hydrogen concentration can only be considered as homogeneous. Nano-indentation tests carried out on NiTi wires charged with hydrogen highlighted an heterogeneous distribution of hardness (which is related to the hydrogen concentration). It becomes then necessary to take into account the gradient of hydrogen distribution. To this end, the weak form of equilibrium equations for each field (thermal, mechanical and chemical) through 3D domain is discretized and numerically solved by finite element method. A special finite element with coupled degrees of freedom (displacements, temperature and hydrogen concentration) is developed and implemented in the Abaqus[®] finite element software through the UEL subroutine. Numerical tests with complex loadings are carried out. Obtained results are discussed showing the relevance of the adopted approach.

Mots clefs : Alliages à Mémoire de Forme NiTi ; Diffusion d'hydrogène ; Éléments finis ; Lois de comportement ; Applications orthodontiques

1 Introduction

La transformation martensitique dans les AMF à base NiTi induit les deux principaux mécanismes que sont la pseudo-élasticité et l'effet mémoire de forme (simple ou double effet). Le premier phénomène permet d'appliquer une déformation à force constante, qui est mis à profit dans les applications orthodontiques [1]. Néanmoins la présence de fissures et de ruptures peut être observée après plusieurs mois passés dans l'environnement buccale [2]. Une dégradation des propriétés mécaniques des arcs en NiTi apparait due à la présence d'hydrogène. Ces atomes d'hydrogène, qui sont issus de l'environnement chimique de la bouche, sont supposés se diffuser dans l'alliage NiTi de manière analogue à ce qui est observé dans les aciers, c'est à dire qu'ils se déplacent par l'intermédiaire des sites interstitiels naturellement présents dans la structure cristallographique. A l'échelle macroscopique, les observations montrent une diminution de la déformation maximale de transformation et de l'aire de l'hystérésis quand la quantité d'hydrogène augmente dans l'AMF [3, 4]. Le comportement en fatigue est également affecté [5 - 8]. L'objectif de cette étude est de prendre en compte dans la modélisation du comportement des AMF NiTi la diffusion d'hydrogène, à travers l'amélioration d'un modèle existant [9 - 11]. Pour obtenir un couplage complet chimio-thermo-mécanique (entre le comportement thermo-mécanique des AMF et la concentration d'hydrogène) la formulation d'un nouvel élément fini est nécessaire. En effet, différents éléments (voir par exemple [12]) présentent déjà un couplage chimio-mécanique, mais ils ne prennent pas en compte la diffusion de la chaleur et les spécificités du comportement des AMF.

2 Introduction du couplage chimique dans la loi de comportement dédiée aux AMF

La loi de comportement avec prise en compte du couplage chimique, et donc de la dépendance à la concentration d'hydrogène proposée, est basée sur le modèle thermo-mécanique de Chemisky et al. [11]. Les principales étapes de la construction du modèle, ainsi que les améliorations liées à la partie chimique seront présentées. Ce modèle s'inscrit dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations.

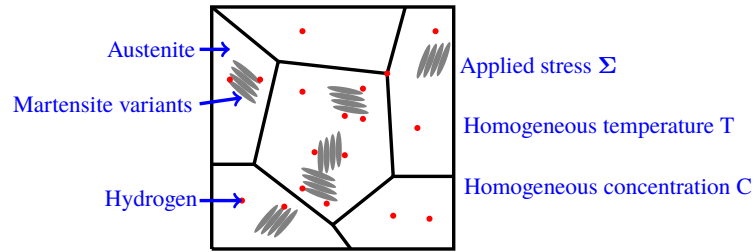


FIGURE 1 – Volume élémentaire représentatif (VER) d'un AMF contenant des variantes de martensite et des atomes d'hydrogène.

2.1 Potentiel thermodynamique

Afin d'assurer la cohérence du comportement, un potentiel thermodynamique approprié doit être utilisé. D'après [13], l'expression locale du premier principe est :

$$\rho \dot{e} = \Sigma : \dot{\mathbf{E}} + r - \text{div } \mathbf{q} - \text{div } (\mu \mathbf{j}) \quad (1)$$

où ρ représente la densité, e est l'énergie spécifique interne, Σ est le tenseur des contraintes de Cauchy, \mathbf{E} est le tenseur des déformations, r est la densité volumique de source interne de chaleur, \mathbf{q} est le flux de chaleur, μ est le potentiel chimique et \mathbf{j} est le flux d'hydrogène. La notation $(\dot{\quad})$ représente la dérivée temporelle.

Les variables de contrôle de notre modèle sont la contrainte, la température et la concentration d'hydrogène. L'enthalpie libre de Gibbs est définie par :

$$G = \rho e - TS - \Sigma : \mathbf{E} \quad (2)$$

où T est la température et S l'entropie du système.

La prochaine étape consiste à écrire l'inégalité de Clausius-Duhem. Le point de départ est le second principe de la thermodynamique :

$$\rho \dot{s} + \text{div } \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{r}{T} \geq 0 \quad (3)$$

Si on introduit l'enthalpie libre et sa dérivée temporelle l'inégalité devient :

$$-\dot{G} - S\dot{T} - \mathbf{E} : \dot{\Sigma} - \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{grad} T}{T} - \text{div } (\mu \mathbf{j}) \geq 0 \quad (4)$$

Il faut maintenant déterminer une expression du potentiel décrivant les différents mécanismes observés, soit l'élasticité, la transformation de phase, la réorientation des variantes de martensite et la diffusion d'hydrogène.

2.2 Mécanismes de déformation et variables internes

La loi de comportement pour les AMF à base NiTi décrite dans cette section est issue des travaux de [9, 10] et a été enrichie dans [11]. C'est ce modèle qui va être modifié pour prendre en compte la diffusion d'hydrogène. Le point de départ est un volume élémentaire représentatif (VER) d'AMF composé d'une phase austénitique, dans laquelle peut se former une phase martensitique sous l'effet d'un chargement thermo-mécanique. En outre, le VER contient également des atomes d'hydrogène qui migrent au sein

de la structure, et qui s'accumulent près des interfaces entre austénite et martensite et près des joints de grains. La déformation macroscopique du VER d'un AMF polycristallin (voir figure 1) est supposée être formée par l'addition de plusieurs contributions :

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{el} + \mathbf{E}^{th} + \mathbf{E}^{in} \quad (5)$$

où \mathbf{E}^{el} , \mathbf{E}^{th} , \mathbf{E}^{in} représentent respectivement la déformation élastique, la déformation thermique et la déformation inélastique. La contribution élastique de \mathbf{E} peut facilement être reliée aux contraintes par :

$$\mathbf{E}^{el} = \mathbb{S} : \Sigma \quad (6)$$

où \mathbb{S} est le tenseur de souplesse du 4^{ème} ordre. Concernant la déformation thermique, l'hypothèse choisie est celle d'une dilatation volumique homogène et isotrope :

$$\mathbf{E}^{th} = \alpha^{th} \Delta T \quad (7)$$

où α^{th} désigne le tenseur de dilatation volumique, ΔT est la différence entre la température actuelle et une température de référence T^{ref} .

Dans ce modèle, la déformation inélastique \mathbf{E}^{in} est supposée ne traduire que les phénomènes de transformation martensitique et de réorientation de la martensite formée. La déformation macroscopique de transformation \mathbf{E}^{tr} représente la moyenne sur le VER de la déformation locale de transformation. Si la déformation en un point matériel quelconque est notée $\varepsilon^{tr}(r)$, la relation entre la grandeur locale et macroscopique s'écrit :

$$\mathbf{E}^{tr} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon^{tr}(r) dV \quad (8)$$

où V est le volume du VER. Cette déformation est liée au volume de martensite V_M produit pendant la transformation de phase. Il est donc possible de reformuler l'équation (8) :

$$\mathbf{E}^{tr} = \frac{V_M}{V} \frac{1}{V_M} \int_{V_M} \varepsilon^{tr}(r) dV = f \bar{\varepsilon}^{tr} \quad (9)$$

où f représente la fraction volumique de martensite et $\bar{\varepsilon}^{tr}$ représente la déformation due à l'orientation moyenne des variantes de martensites.

Pour résumer, deux variables internes ont été introduites :

- la fraction volumique de martensite f ;
- la déformation de transformation moyenne $\bar{\varepsilon}^{tr}$.

2.3 Expression de l'enthalpie libre de Gibbs

L'enthalpie libre de Gibbs permet de prendre en compte toutes les contributions dans un cadre unifié, et est composée de plusieurs termes :

- G^{init} pour un matériau entièrement composé d'austénite à une température initiale T^{init} ;
- G^A la contribution de la phase d'austénite ;
- G^M la contribution de la phase de martensite ;
- G^{ext} la contribution du chargement mécanique ;

- G^{int} la contribution des incompatibilités de déformations dues aux différents variantes et grains. Ce terme prend en compte les interactions à différentes échelles, en supposant que les propriétés thermo-élastiques sont les mêmes pour les deux phases.

L'enthalpie libre d'origine chimique (liée à la diffusion d'hydrogène) est également nécessaire. Elle est définie par Cottrell dans [14] :

$$G^{ch} = E_0 C + RT [C \ln(C) + (1 - C) \ln(1 - C)] \quad (10)$$

où E_0 est l'énergie interne de la solution solide d'hydrogène et R est la constante des gaz parfaits.

Toutes ces contributions peuvent être rassemblées dans l'expression complète de l'enthalpie libre de Gibbs pour le matériau biphasé :

$$G^{biphasé} = G^A + G^M + G^{ext} + G^{int} + G^{ch} \quad (11)$$

Pour le VER d'AMF, le potentiel thermodynamique considéré représente la différence entre l'énergie du matériau biphasé et l'énergie à l'état initial :

$$\Delta G = G^{biphasé} - G^{init} \quad (12)$$

L'expression complète de l'enthalpie libre pour le VER d'AMF est fonction des variables de contrôles (Σ, T, C) et des variables internes ($f, \bar{\epsilon}^{tr}$).

2.4 Forces motrices

Le potentiel dépend des variables de contrôles et internes, mais dépend également de paramètres matériaux intrinsèques à l'alliage NiTi. En calculant la dérivée totale de ΔG , l'inégalité de Clausius-Duhem (4) devient :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma} : \dot{\Sigma} - \dot{\Sigma} : \mathbf{E} - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \dot{T} - S \dot{T} - \frac{\partial \Delta G}{\partial f} \dot{f} - \frac{\partial \Delta G}{\partial C} \dot{C} - \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} \\ & - \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{grad} T}{T} - \mathbf{j} \cdot \mathbf{grad}(\mu) - \mu \operatorname{div}(\mathbf{j}) \geq 0 \end{aligned} \quad (13)$$

Du point de vue macroscopique, la concentration d'hydrogène C est reliée au flux d'hydrogène par l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0 \text{ dans } \Omega \quad (14)$$

En utilisant cette dernière équation, l'inégalité devient :

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma} - \mathbf{E} \right) : \dot{\Sigma} + \left(-\frac{\partial \Delta G}{\partial T} - S \right) \dot{T} - \frac{\partial \Delta G}{\partial f} \dot{f} + \left(\mu - \frac{\partial \Delta G}{\partial C} \right) \dot{C} \\ & - \frac{\partial \Delta G}{\partial \bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} - \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{grad} T}{T} - \mathbf{j} \cdot \mathbf{grad}(\mu) \geq 0 \end{aligned} \quad (15)$$

Il est maintenant possible d'identifier les différentes forces motrices :

- Force élastique ;

- Force de transformation de phase ;
- Force d'orientation des variantes de martensite ;
- Force thermique ;
- Force chimique.

L'équilibre chimio-thermo-mécanique est considéré comme instantané :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Delta G}{\partial \Sigma} - \mathbf{E} &= 0 \\ -\frac{\partial \Delta G}{\partial T} - S &= 0 \\ -\frac{\partial \Delta G}{\partial C} + \mu &= 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Grâce à cette dernière condition, il est possible de déterminer les lois de comportement de l'AMF ; pour la partie mécanique :

$$\mathbf{E} = \mathbb{S} : \Sigma + \alpha^{th} \Delta T + f \bar{\epsilon}^{tr} \quad (17)$$

Puis :

$$S = S^A - Bf + \Sigma : \alpha^{th} + C_V \log \frac{T}{T_{ref}} + R(C \ln(C) + (1 - C) \ln(1 - C)) \quad (18)$$

Enfin, pour la partie chimique, le potentiel chimique μ est donné par :

$$\mu = RT \left(\ln \left(\frac{C}{1 - C} \right) + \frac{E_0}{RT} \right) \quad (19)$$

2.5 Dissipation

En prenant en compte l'équilibre instantané, l'inégalité de Clausius-Duhem se simplifie. Les termes restant sont :

$$F^f \dot{f} + \mathbf{F}^{\bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} - \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{grad} T}{T} - \mathbf{j} \cdot \mathbf{grad}(\mu) \geq 0 \quad (20)$$

L'équation (20) devient une fonction de l'évolution des variables internes, de la température, de la concentration d'hydrogène, des forces motrices et des flux thermiques et chimiques. Cette expression met en valeur les trois contributions au phénomène de dissipation [13], la dissipation intrinsèque ou mécanique ϕ_m , la dissipation thermique ϕ_T et la dissipation chimique ϕ_C :

$$\phi_m + \phi_T + \phi_C \geq 0 \quad (21)$$

avec :

$$\begin{aligned} \phi_m &= F^f \dot{f} + \mathbf{F}^{\bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} \\ \phi_T &= -\frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{grad} T}{T} \\ \phi_C &= -\mathbf{j} \cdot \mathbf{grad}(\mu) \end{aligned} \quad (22)$$

La dissipation mécanique provient des mécanismes de transformation et de réorientation. L'hystérésis observée pour ces deux phénomènes est modélisée par l'introduction de forces critiques. La dissipation mécanique devient :

$$\phi_m = F^f \dot{f} + \mathbf{F}^{\bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} = F_{yield}^f \dot{f} + \mathbf{F}_{yield}^{\bar{\epsilon}^{tr}} : \dot{\bar{\epsilon}}^{tr} \quad (23)$$

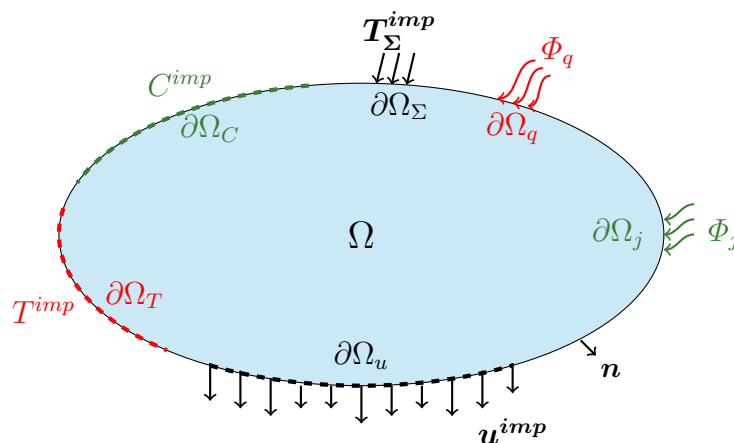


FIGURE 2 – Domaine étudié et conditions aux limites associées au couplage.

Afin de simplifier la formulation, le critère tensoriel relatif à la réorientation est remplacé par un critère scalaire équivalent, construit sur le même modèle que ceux utilisés en plasticité, en introduisant :

$$F_{eq}^{\bar{\epsilon}^{tr}} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{F}^{\bar{\epsilon}^{tr}} : \mathbf{F}^{\bar{\epsilon}^{tr}}} \quad (24)$$

C'est lors de cette étape que dans le travail de Lachiguer et al. [3] est introduite une dépendance de F_{crit}^f à la concentration d'hydrogène C , ce qui donne une version modifiée de l'équation (23) :

$$\phi_m = F^f \dot{f} + F_{eq}^{\bar{\epsilon}^{tr}} \dot{\bar{\epsilon}}_{eq}^{tr} = F_{yield}^f(C) \dot{f} + f F_{yield}^{\bar{\epsilon}^{tr}} \dot{\bar{\epsilon}}_{eq}^{tr} \quad (25)$$

Ce modèle permet également de prendre en compte les phénomènes de boucles internes, d'asymétrie du comportement en traction et compression et la saturation de réorientation, pour plus de détails à ce sujet, le lecteur pourra se reporter à [11].

Cette loi de comportement pour AMF est maintenant capable de prendre en compte des chargements chimio-thermo-mécaniques et les différents couplages entre les trois champs. Le phénomène de diffusion peut engendrer une répartition hétérogène d'hydrogène. Pour accéder de manière locale à la concentration d'hydrogène pour chaque point matériel, un élément fini spécifique doit être formulé, c'est ce qui sera présenté dans la partie suivante.

3 Formulation d'un élément dédié au couplage chimio-thermo-mécanique

3.1 Equations d'équilibre et lois de comportement

Dans ce qui suit, le domaine considéré sera noté Ω .

La diffusion d'hydrogène se produit de manière préférentielle dans les sites interstitiels présents dans la structure cristallographique des AMF NiTi. La concentration d'hydrogène est définie par le ratio entre les sites occupés par de l'hydrogène et les sites inoccupés. Pour prendre en compte les différents phénomènes, il faut écrire les équations d'équilibre relatives à chaque champ ainsi que les lois de comportement associées qui ont été déterminées dans la partie précédente. L'équation classique de l'équilibre

mécanique est donnée par :

$$\mathbf{0} = \text{div } \boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{f}_v \quad \text{avec } \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{u}, T, C) = \mathbb{C} : \mathbf{E}^{el} = \mathbb{C} : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^{tr} - \mathbf{E}^{th}) \quad (26)$$

L'équation d'équilibre thermique sans source de chaleur est donnée par :

$$0 = \text{div } \mathbf{q} + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{avec } \mathbf{q}(\mathbf{u}, T, C) = -k \mathbf{grad } T \quad (27)$$

avec k la conductivité thermique.

L'équation d'équilibre chimique sans source interne d'hydrogène est donnée par :

$$0 = \text{div } \mathbf{j} + \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{avec } \mathbf{j}(\mathbf{u}, T, C) = -D \mathbf{grad } C \quad (28)$$

où D représente le coefficient de diffusion de l'hydrogène.

Pour pouvoir appliquer la méthode des éléments finis, il faut déterminer la forme faible de ces trois équations et prendre en compte les conditions aux limites possibles. Cette forme est obtenue à partir de la forme locale en appliquant la méthode de Galerkin, qui consiste à multiplier chaque équation locale par le champ virtuel correspondant ($\{\mathbf{u}^*\}$, $\{T^*\}$, $\{C^*\}$) puis à intégrer sur le domaine complet. Le système non linéaire constitué de ces équations est celui qui doit être discrétisé puis résolu ; il prend la forme :

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \mathbf{E}^* : \boldsymbol{\Sigma} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_{\Sigma}} \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{T}_{\Sigma}^{imp} \, dS + \int_{\Omega} \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{f}_v \, d\Omega = 0 \\ & - \int_{\Omega} \mathbf{grad} T^* \cdot \mathbf{q} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_T} T^* \Phi_q \, dS + \int_{\Omega} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} T^* \, d\Omega = 0 \\ & - \int_{\Omega} \mathbf{grad} C^* \cdot \mathbf{j} \, d\Omega + \int_{\partial\Omega_C} C^* \Phi_j \, dS + \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} C^* \, d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\Sigma}^{imp} &= \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \\ \Phi_q &= \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \\ \Phi_j &= \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (30)$$

avec \mathbf{n} la normale extérieure au domaine (voir figure 2).

3.2 Discrétisation par éléments finis

Pour résoudre ce dernier système, un nouvel élément fini doit être défini permettant de considérer une répartition hétérogène en déplacement, en température et surtout en concentration d'hydrogène. Le cas considéré est celui d'un élément 3D. La formulation choisie possède 8 nœuds, une méthode d'interpolation linéaire et 5 degrés de libertés (les 3 composantes du déplacement \mathbf{u} , la température T et la concentration d'hydrogène C). Le passage de la forme continue du système (29) à la forme discrète requiert le calcul des matrices des fonctions d'interpolation $[N^i]$ et des matrices des dérivées des fonctions de forme $[B^i]$. Elles permettent d'écrire pour l'élément de référence :

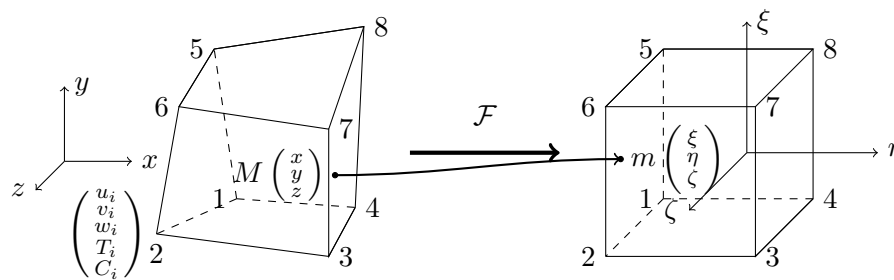


FIGURE 3 – Transformation entre l'élément actuel et l'élément de référence pour un élément 3D.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}(\xi, \eta, \zeta) &= [N^u] \{u\} & \mathbf{E}(\xi, \eta, \zeta) &= [B^u] \{u\} \\
 T(\xi, \eta, \zeta) &= [N^{th}] \{T\} & \mathbf{grad} T(\xi, \eta, \zeta) &= [B^{th}] \{T\} \\
 C(\xi, \eta, \zeta) &= [N^{ch}] \{C\} & \mathbf{grad} C(\xi, \eta, \zeta) &= [B^{ch}] \{C\}
 \end{aligned} \quad (31) \quad (32)$$

où (ξ, η, ζ) sont les coordonnées d'un point m dans l'élément de référence qui est associé avec un point matériel M (voir figure 3). $\{u\}$, $\{T\}$, $\{C\}$ désignent les vecteurs nodaux.

Le système discrétisé devient alors :

$$\begin{aligned}
 [R_e^u] &= - \int_{\Omega_e} [B^u]^T \{\Sigma\} d\Omega_e + \int_{\partial\Omega_{e\Sigma}} [N^u]^T \{T^\Sigma\} dS + \int_{\Omega_e} [N^u]^T \{f_v\} d\Omega_e = [0] \\
 [R_e^{th}] &= - \int_{\Omega_e} [B^{th}]^T \{q\} d\Omega_e + \int_{\partial\Omega_{eq}} [N^{th}]^T \{\Phi_q\} dS + \int_{\Omega_e} [N^{th}]^T [N^{th}] \rho C_p \frac{\Delta T}{\Delta t} d\Omega_e = [0] \\
 [R_e^{ch}] &= - \int_{\Omega_e} [B^{ch}]^T \{j\} d\Omega_e + \int_{\partial\Omega_{ej}} [N^{ch}]^T \{\Phi_j\} dS + \int_{\Omega_e} [N^{ch}]^T [N^{ch}] \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega_e = [0]
 \end{aligned} \quad (33)$$

où Ω_e est le volume de l'élément et $\partial\Omega_e$ est la frontière de l'élément.

Le système d'équations non linéaires (33) est résolu par la méthode de Newton-Raphson, les intégrations numériques étant effectuées par les quadratures de Gauss. Les inconnues au temps $t = t_{n+1}$ sont les déplacements $\{u\}_{n+1}$, la température $\{T\}_{n+1}$ et la concentration $\{C\}_{n+1}$. Pour cette méthode, il faut calculer la matrice de rigidité équivalente $[K_e]$ (dérivée première de chaque résidu par rapport à chaque variable), qui est elle-même composée de plusieurs sous matrices :

$$\begin{aligned}
 [K_e^{uu}] &= \frac{\partial [R_e^u]}{\partial [E]} & [K_e^{uT}] &= \frac{\partial [R_e^u]}{\partial [T]} & [K_e^{uC}] &= \frac{\partial [R_e^u]}{\partial [C]} \\
 [K_e^{Tu}] &= \frac{\partial [R_e^{th}]}{\partial [E]} & [K_e^{TT}] &= \frac{\partial [R_e^{th}]}{\partial [T]} & [K_e^{TC}] &= \frac{\partial [R_e^{th}]}{\partial [C]} \\
 [K_e^{Cu}] &= \frac{\partial [R_e^{ch}]}{\partial [E]} & [K_e^{CT}] &= \frac{\partial [R_e^{ch}]}{\partial [T]} & [K_e^{CC}] &= \frac{\partial [R_e^{ch}]}{\partial [C]}
 \end{aligned} \quad (34)$$

Grâce à ces développements, un nouvel élément a été implémenté avec le langage C++ dans le logiciel d'éléments finis Abaqus[©] à travers la sous routine UEL (User Element). L'algorithme est détaillé dans la figure 4.

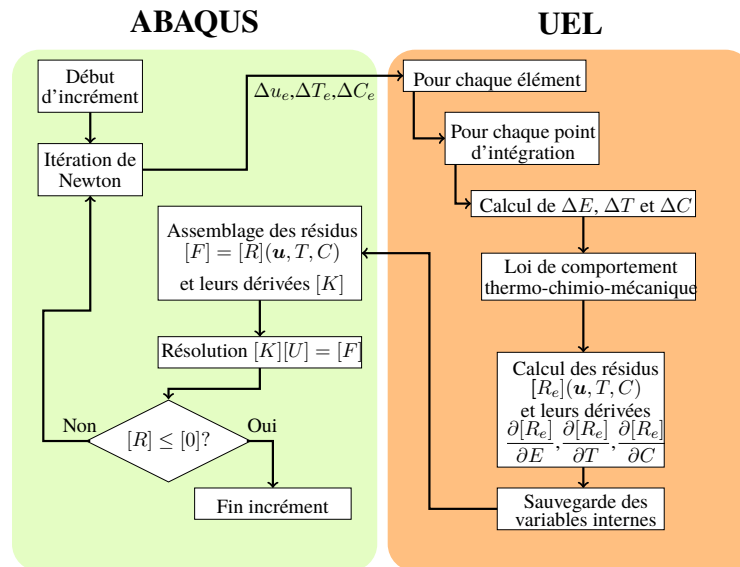


FIGURE 4 – Algorithme de résolution implémenté dans le logiciel d'élément finis.

4 Simulations par éléments finis avec des chargements chimio-thermo-mécaniques

L'élément décrit dans la section précédente a été testé et validé dans le cadre de simulation pour des cas de chargements multi-physiques.

4.1 Premier cas test : plaque carrée

La première géométrie étudiée est une plaque carrée ayant pour dimension $2 \times 2 \times 0.2 \text{ mm}^3$. En raison de la symétrie de ce domaine, la partie modélisée ne représente que le quart de la plaque, grâce aux conditions aux limites (CL) appropriées. L'ensemble du domaine est à une température homogène de $T = 20^\circ\text{C}$. Pour la partie chimique, une concentration nulle est appliquée sur le bas de la plaque et $C = 0.03 \text{ ppm}$ sont appliquées sur le haut de la plaque. Enfin, un déplacement vertical de $U = 0.08 \text{ mm}$ est appliqué sur le haut de la plaque.

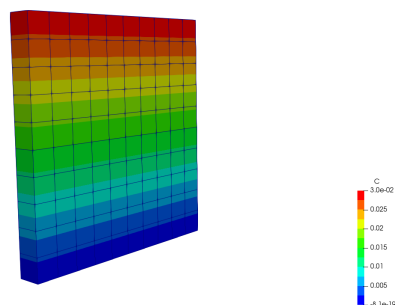


FIGURE 5 – Répartition hétérogène d'hydrogène dans la plaque carrée 3D.

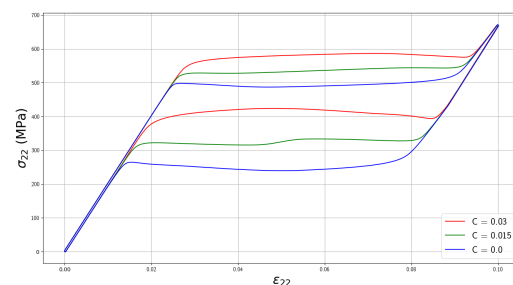


FIGURE 6 – Courbes contraintes-déformations pour différents niveaux d'hydrogène dans la plaque carrée 3D.

La figure 5 montre le gradient de concentration indépendant du temps obtenu après le chargement chimique. Son effet sur le comportement mécanique est visible sur la figure 6 qui représente les courbes contrainte-déformation pour plusieurs concentrations chimiques différentes. La courbe à 0 ppm donne la

réponse classique d'un AMF à base NiTi pour le comportement superélastique. En revanche, les autres courbes montrent que la dépendance à l'hydrogène résulte en une augmentation des contraintes critiques pour la transformation directe et inverse. L'aire de l'hystérésis diminue également.

4.2 Deuxième cas test : plaque percée

La deuxième géométrie étudiée est une plaque percée qui permet de tester l'élément 3D dans le cas d'une répartition hétérogène des contraintes. Les dimensions choisies sont de $4 \times 4 \times 0.1 \text{ mm}^3$ avec un rayon de 0,6 mm pour le trou. La température est à nouveau homogène à $T = 20^\circ\text{C}$. Pour les concentrations d'hydrogène, une concentration nulle est imposée sur le bord du perçage. Sur le haut et sur la droite de la plaque, une concentration de $C = 0.03 \text{ ppm}$ est présente. A nouveau, un déplacement vertical de $U = 0.08 \text{ mm}$ est appliqué sur le haut de la plaque.

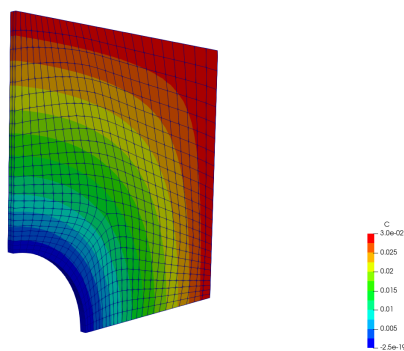


FIGURE 7 – Répartition hétérogène d'hydrogène dans la plaque percée 3D.

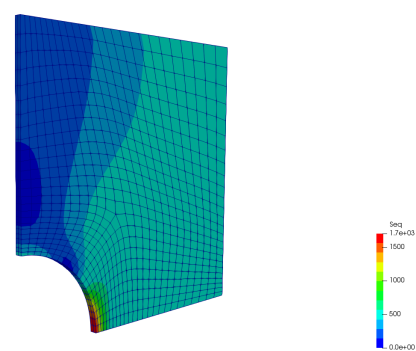


FIGURE 8 – Répartition de la contrainte équivalente de von Mises dans la plaque percée 3D.

Sur la figure 7, on peut constater que la présence du trou engendre un gradient de concentration, plus complexe que pour le premier test. Les zones de concentration importantes sont situées près des frontières externes du domaine, et la concentration diminue à mesure que l'on se rapproche du trou de la plaque. Enfin la figure 8 permet de valider les résultats pour la partie mécanique. En effet, la répartition des contraintes est cohérente avec la solution analytique connue. Il est notamment possible de retrouver des résultats qualitativement proches de ceux obtenus pour un matériau élastique, mais quantitativement différents en raison du comportement superélastique de l'AMF (pour un niveau de déformation équivalent, la contrainte sera plus faible pour l'alliage NiTi que pour un acier classique).

5 Conclusion

Dans cet article, les principales étapes du développement d'une loi de comportement chimio-thermo-mécanique ont été décrites, permettant de prendre en compte les effets de la diffusion d'hydrogène. En utilisant le cadre de la thermodynamique, les lois de comportement des différents champs ont été déterminées. Le développement d'un nouvel élément 3D ayant 8 nœuds et 5 degrés de liberté par nœud a été détaillé. Les résultats numériques obtenus montrent les capacités de l'approche développée et complètent les travaux préliminaires de Lachiguer et al. [3], qui permettaient uniquement de considérer une concentration d'hydrogène homogène.

Les perspectives de ce travail concernent les possibles extensions du modèle thermodynamique en prenant notamment en compte le phénomène de désorption. Les travaux expérimentaux débutés dans [3] vont être également poursuivis et comparés aux résultats numériques. Cette modélisation et son implémentation numérique permettront d'accéder de manière locale à l'état de contrainte, à la fraction de

martensite, en chaque point matériel, avec une concentration locale d'hydrogène pouvant être différente pour chaque point. L'outil numérique obtenu permettra ainsi d'améliorer la conception des arcs orthodontiques en NiTi en prenant en compte les effets de la diffusion d'hydrogène sur leur performances.

Références

- [1] F. Miura, M. Mogi, Y. Ohura, H. Hamanaka, The super-elastic property of the Japanese NiTi alloy wire for use in orthodontics, *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*, 90 (1986) 1–10.
- [2] K. Yokoyama, K. Hamada, K. Moriyama, K. Asaoka, Degradation and fracture of Ni-Ti superelastic wire in an oral cavity, *Biomaterials*, 22 (2001) 2257–2262.
- [3] A. Lachiguer, C. Bouby, F. Gamaoun, T. Bouraoui, T. Ben Zineb, Modeling of hydrogen effect on the superelastic behavior of Ni-Ti shape memory alloy wires, *Smart Materials and Structures*, 25 (2016) 1–11.
- [4] N. Wade, Y. Adachi, Y. Hosoi, A role of hydrogen in shape memory effect of Ni-Ti alloys, *Scripta Metallurgica et Materialia*, 24 (1990) 1051–1055.
- [5] K. Yokoyama, T. Ogawa, K. Asaoka, J. Sakai, M. Nagumo, Degradation of tensile strength of Ni-Ti superelastic alloy due to hydrogen absorption in methanol solution containing hydrochloric acid, *Materials Science and Engineering A*, 360 (2003) 153–159.
- [6] K. Yokoyama, K. Kaneko, K. Moriyama, K. Asaoka, J. Sakai, M. Nagumo, Delayed fracture of Ni-Ti superelastic alloys in acidic and neutral fluoride solutions, *Journal of Biomedical Materials Research - Part A*, 69 (2004) 105–113.
- [7] J. Sheriff, A. R. Pelton, L. A. Pruitt, Hydrogen effects on NITINOL fatigue, *Proceedings of the International Conference on Shape Memory and Superelastic Technologies*, (2004) 111–116.
- [8] K. House, F. Sernetz, D. Dymock, J. R. Sandy, A. J. Ireland, Corrosion of orthodontic appliances—should we care?, *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*, 133 (2008) 584–592.
- [9] B. Peultier, T. Ben Zineb, E. Patoor, Macroscopic constitutive law of shape memory alloy thermo-mechanical behaviour. Application to structure computation by FEM, *Mechanics of Materials*, 38 (2006) 510–524.
- [10] B. Peultier, T. Ben Zineb, E. Patoor, A simplified micromechanical constitutive law adapted to the design of shape memory applications by finite element methods, *Materials Science and Engineering A*, 481 (2008) 384–388.
- [11] Y. Chemisky, A. Duval, E. Patoor, T. Ben Zineb, Constitutive model for shape memory alloys including phase transformation, martensitic reorientation and twins accommodation, *Mechanics of Materials*, 43 (2011) 361–376.
- [12] O. Barrera, E. Tarleton, H. W. Tang, A. C. Cocks, Modelling the coupling between hydrogen diffusion and the mechanical behaviour of metals, *Computational Materials Science*, 122 (2016) 219–228.
- [13] J. Lemaitre, J.-L. Chaboche, A. Benallal, R. Desmorat, *Mécanique des matériaux solides*, 3rd Edition, Dunod, (2009).
- [14] A. Cottrell, *An introduction to metallurgy*, 2nd Edition, (1975).