



**HAL**  
open science

# Modélisation par éléments finis d'essais de caractérisation de la sensibilité des tôles métalliques à l'hydrogène

Yann Charles, Hung Nguyen, Monique Gaspérini

► **To cite this version:**

Yann Charles, Hung Nguyen, Monique Gaspérini. Modélisation par éléments finis d'essais de caractérisation de la sensibilité des tôles métalliques à l'hydrogène. CFM 2013 - 21ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2013, Bordeaux, France. hal-03439903

**HAL Id: hal-03439903**

**<https://hal.science/hal-03439903v1>**

Submitted on 22 Nov 2021

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisation par éléments finis d'essais de caractérisation de la sensibilité des tôles métalliques à l'hydrogène

Yann Charles, Hung Nguyen, Monique Gaspérini

LSPM-CNRS, Université Paris 13, PRES Sorbonne Paris Cité, 93430 Villetaneuse

## Résumé :

*Des modèles couplés diffusion-plasticité-rupture ont été implémentés dans Abaqus, à l'aide de procédures utilisateurs, afin d'étudier des problèmes de fragilisation par l'hydrogène. Des simulations ont été effectuées pour l'essai de disque à rupture, avec confrontation à des résultats expérimentaux, ainsi que pour un essai de pliage en U et pour un multicristal virtuel.*

## Abstract:

*Coupled models for diffusion-plasticity-fracture have been implemented in Abaqus FE code, thanks to user subroutines. Computations were performed for the disk pressure test, including comparison with experimental data, for the U-bend test and for a virtual multicrystal..*

**Mots clefs :** hydrogène, éléments finis, zone cohésives, diffusion, plasticité cristalline, procédures utilisateurs

## 1 Introduction

Dans un contexte de développement de l'hydrogène comme source d'énergie, la sécurité des structures vis-à-vis des risques de fragilisation par l'hydrogène (FPH), notamment dans le secteur du transport et du stockage, constitue un enjeu important et nécessite des modélisations fiables des interactions matériau-hydrogène lors du dimensionnement. Dans le domaine de la mise en forme des matériaux métalliques, les simulations numériques en présence de FPH conduisent à des problèmes couplés diffusion-plasticité-fissuration fortement non-linéaires et pour lesquels la prise en compte de mécanismes locaux dans des problèmes aux limites macroscopiques constitue un champ de recherche très ouvert.

Le présent papier est consacré à la présentation de développements numériques dans un code commercial élément finis de procédures couplées intégrant la diffusion d'hydrogène et la fissuration dans des matériaux métalliques déformés plastiquement. Après un rappel de la modélisation utilisée et de la stratégie de résolution retenue, l'approche est appliquée à deux essais mécaniques de caractérisation de la sensibilité à l'hydrogène, l'essai de disque et l'essai de pliage en U, puis étendue au cas d'un agrégat polycristallin virtuel.

## 2 Modélisation

### 2.1.1 Diffusion de l'hydrogène

La concentration locale d'hydrogène dans le matériau est supposée constituée d'une partie diffusive  $C_L$  correspondant à la diffusion en volume sur les sites interstitiels du réseau cristallin et une partie piégée par les dislocations  $C_T$ .

L'équation de diffusion de Fick, peut être modifiée pour prendre en compte ces diverses interactions [1, 2]

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_{\text{eff}} \Delta C_L + \nabla \cdot (D_{\text{eff}} \kappa_p C_L \nabla P_H) - \frac{D_{\text{eff}}}{D_H} \theta_T \frac{\partial N_T}{\partial \varepsilon_p} \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t}, \quad (1)$$

où  $D_{\text{eff}}$  et  $D_H$  représentent les coefficients de diffusion de l'hydrogène respectivement effectif et sans

piégeage dans le métal,  $N_T$  le nombre de site de piégeage (qui dépend de la déformation plastique [3, 4]) et  $\theta_T$  leur taux de recouvrement ; il est ici supposé qu'hydrogène diffusif et piégé sont toujours en équilibre [5].  $\kappa_p$  est un paramètre matériau, et  $P_H$  la pression hydrostatique. Dans cette équation de diffusion n'est pas pris en compte le transport de l'hydrogène piégé par les dislocations mobiles [6].

### 2.1.2 Fissuration assistée par l'hydrogène

La FPH se traduit par une modification du mode de rupture (ductile vers fragile) et une diminution de la contrainte à rupture [7]. Cette fragilisation est modélisée à l'aide d'éléments cohésifs dont la formulation a été modifiée afin de prendre en compte l'interaction entre champs mécaniques et population locale d'hydrogène totale. La loi de comportement retenue pour cet élément d'interface est celle développée par [8] tandis que l'altération de ses propriétés a été faite en reprenant l'approche de Sheider [9]

$$\sigma_{\max} = \sigma_{\max}^0 - \alpha(C_L + C_T), \quad (2)$$

$\alpha$  étant un paramètre phénoménologique à identifier et  $\sigma_{\max}$  la contrainte cohésive maximale. Enfin, afin de permettre une propagation brutale d'une fissure à travers le maillage, la formulation cohésive a été modifiée en suivant les recommandations de [10].

### 2.1.3 Simulation éléments finis

Ces différents aspects des interactions entre hydrogène et matériau ont été implémentés dans le code éléments finis Abaqus, par le développement de procédure utilisateurs [11] permettant une résolution couplée, à chaque itération du code, du problème mécanique, d'adsorption et de diffusion, et enfin de rupture (le cas échéant). Le schéma de principe des développements effectués est donné figure 1.

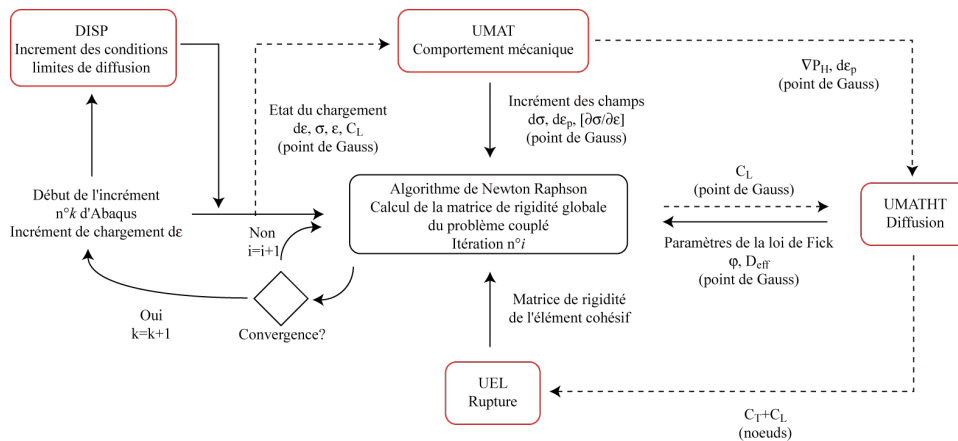


FIG. 1 – Schéma de principe de la résolution du problème couplé dans Abaqus.

## 3 Applications

L'approche précédente a été appliquée à deux configurations d'essais : un essai de disque [12], et un essai de pliage en U ; le premier consiste en la fragilisation d'un acier sous pression d'hydrogène gazeux, et le second, en environnement cathodique.

Les calculs sont réalisés en utilisant un calcul couplé diffusion-mécanique (*coupled temperature-displacement*), en utilisant le degré de liberté normalement dédié à la température pour la concentration locale d'hydrogène.

### 3.1 Essais de disque

Cet essai normalisé [13] permet de définir la sensibilité à l'hydrogène de tôles métalliques. Il consiste en un gonflement d'un disque mince jusqu'à rupture sous pression de gaz neutre (l'hélium) ou d'hydrogène (figure 2). Le rapport des deux pressions de rupture donne un indice phénoménologique de sensibilité du matériau à l'hydrogène, et définit empiriquement son aptitude à être employé dans un environnement hydrogène.

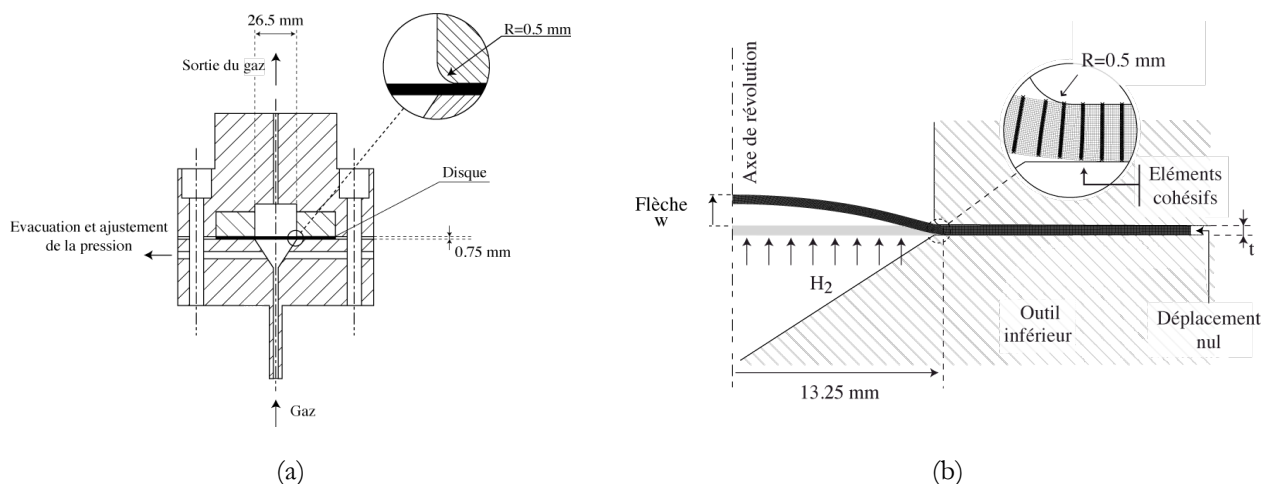


FIG. 2 – (a) Essais de disque (issus de la norme [13]), et (b) modélisation sous Abaqus pour  $t=0.6$  mm.

L'essai est modélisé en axisymétrique, en utilisant des éléments bilinéaires à 4 nœuds, avec intégration complète. Des lignes d'éléments cohésifs sont insérées au voisinage du lieu expérimental de rupture ; la taille des éléments fins est homogène et égale à  $20 \mu\text{m}$ . Le disque est chargé en pression imposée, la condition limite en concentration associée étant calculé par une équation de Lagmuir [14]. Pour cette application, seules sont considérés les interactions hydrogène-rupture : la diffusion dans le matériau est purement Fickienne, sans piégeage.

Les contacts sont tous sans frottement, les outils supérieur et inférieur étant des corps rigides.

Des données expérimentales d'essais de disque, de différentes épaisseurs, ont été utilisées pour un acier Cr-Mo. L'écroissage du matériau est supposé suivre une loi de Ludwik, identifié sur des essais de traction ; toutes les autres grandeurs matériaux ont été choisies à partir de données de la littérature. Les paramètres cohésifs ont été définis de manière à ne pas produire de rupture sans hydrogène.  $\alpha$  est identifié sur les résultats associés à une épaisseur de disque  $t=0.6$  mm.

Une fois tous les paramètres de la simulation identifiés, des calculs ont été effectués en faisant varier l'épaisseur du disque. La simulation a été validée en comparant des données expérimentales et numériques, dont les courbes flèche-pression. Enfin, les valeurs simulées des pressions numériques de rupture induites par l'hydrogène ont été comparées avec des résultats expérimentaux (figure 3). Les détails figurent dans un travail récent [12].

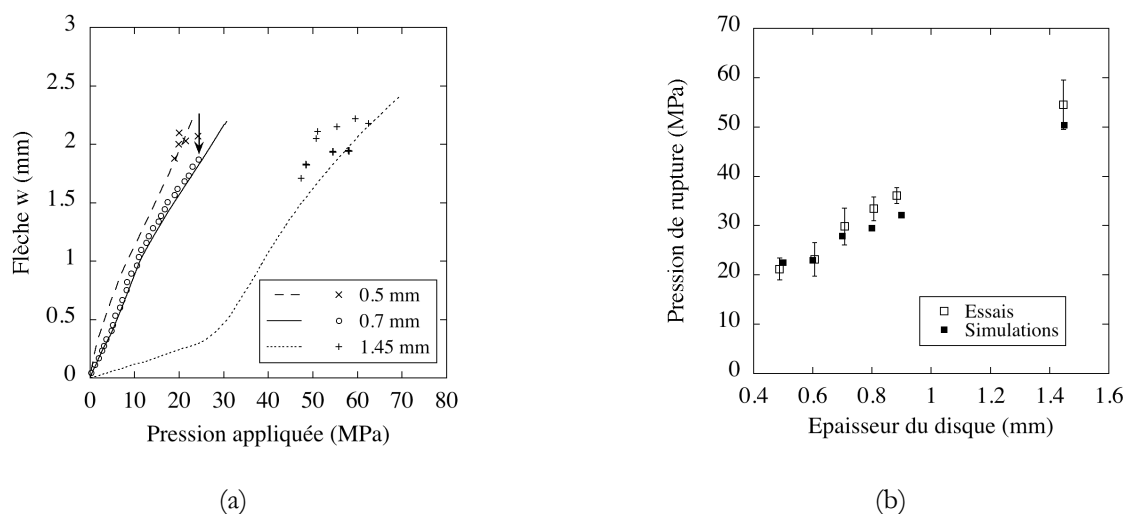


FIG. 3 – (a) Comparaison entre les courbes flèche-pression numériques et expérimentales pour trois épaisseurs de disque, et (b) Comparaison entre pressions expérimentales et numériques de rupture assistées par l'hydrogène (d'après [12]).

### 3.2 Essais en U

L'essai consiste à déformer une lame métallique en forme de U à l'aide d'une flexion trois points (le rouleau supérieur définissant le rayon de déformation  $R$ ), puis à maintenir les brins extérieurs du U à l'aide d'un boulon (figure 4) [15]. L'éprouvette est ensuite plongée dans un bain électrolytique, ce qui permet une entrée d'hydrogène dans le matériau : le couplage entre le champ de contraintes issu de la mise en forme et la diffusion d'hydrogène induit, selon les conditions expérimentales, une rupture différée [16].

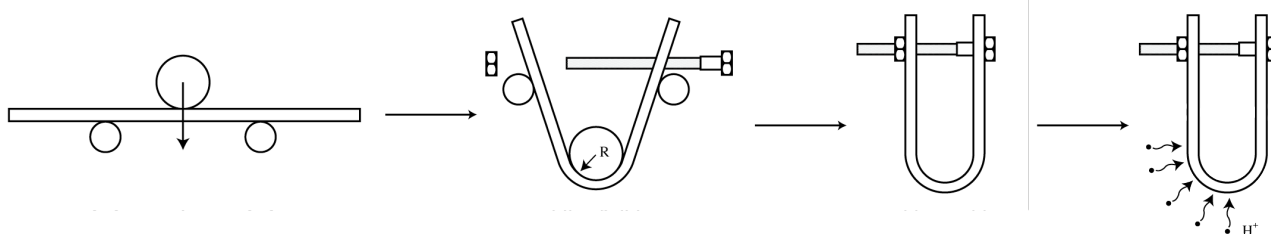


FIG. 4 – Principe de l'essai en U.

Le problème est modélisé en déformation plane, avec une éprouvette de longueur 100 mm et d'épaisseur 1,6 mm, et maillée avec des éléments bilinéaires à 4 nœuds et en intégration complète. Une ligne d'éléments cohésifs est placée au niveau de l'axe de symétrie de l'éprouvette ; au voisinage de ce dernier, où la rupture s'amorce, la taille des éléments est de 3.2  $\mu\text{m}$ . La diffusion de l'hydrogène est couplée avec le champ de contrainte et la déformation plastique équivalente.

L'éprouvette est chargée en déplacement imposé, la condition limite en concentration est constante. Les contacts sont tous supposés sans frottements, les appuis étant des corps rigides.

La simulation est appliquée à un acier Dual-Phase, dont le comportement est considéré élasto-plastique avec un écrouissage supposé linéaire. Les paramètres mécaniques et diffusifs sont issus de la littérature [16,17]. Les paramètres cohésifs sont définis de manière analogue à l'application précédente.

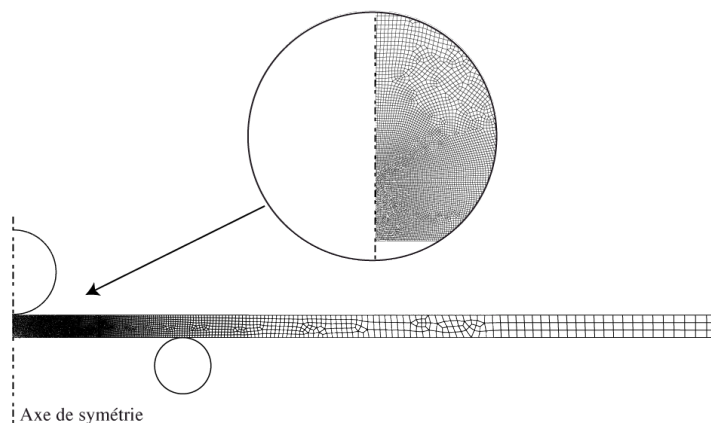


FIG. 5 – Maillage de l'éprouvette de l'essai de pliage en U.

La figure 6 montre la distribution spatiale de la déformation plastique équivalente et de la concentration relative d'hydrogène piégé en régime permanent (voir équation 2). La contrainte maximale principale la concentration totale d'hydrogène étant toutes deux maximales sur la fibre externe de l'éprouvette, le calcul couplé entraîne une rupture brutale qui se propage au delà de la fibre neutre (figure 6c).

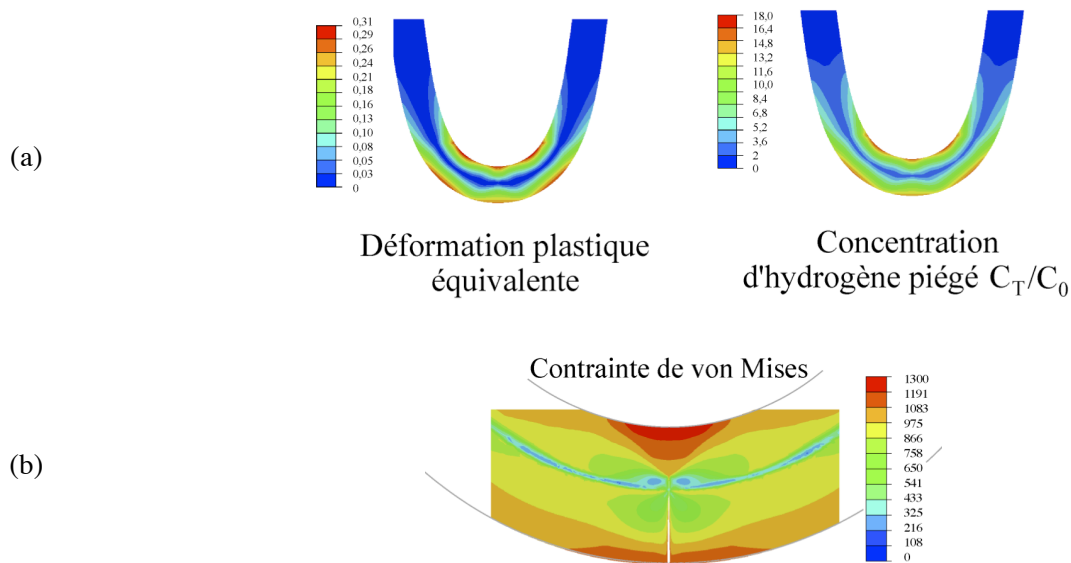


FIG. 6 – Résultat du calcul couplé mécanique-diffusion en régime permanent : (a) déformation plastique équivalente et hydrogène piégé.  $C_0$  représente la condition limite en concentration (supposée constante). (b) Propagation brutale de la fissure liée à l’interaction entre le champ de contrainte et la concentration d’hydrogène.

### 3.3 Application à un Multicristal

Le multicristal, une plaque carrée de 2 mm de coté et de 0,1 mm d épaisseur, est maillé en trois dimensions par extrusion, en utilisant des éléments trilineaires à 8 nœuds, avec intégration complète ; la rupture assistée par l’hydrogène n’est pas ici prise en compte. L’éprouvette est chargée en déplacement imposé, la condition limite en concentration est constante. Les calculs sont effectués en régime permanent pour la diffusion.

Le matériau considéré pour cette application est un acier austénitique, dont le comportement est considéré comme étant élasto-plastique anisotrope, et basé sur les modèles de plasticité cristalline [18] ; chaque grain ayant une orientation aléatoire définie par une procédure utilisateur dans Abaqus. Les grains sont considérés comme étant hexagonaux (figure 7a). Dans le calcul, la diffusion de l’hydrogène est considérée comme couplée avec le champ de contrainte et la déformation plastique équivalente, calculée à partir de la valeur du glissement sur chaque système de glissement  $\{111\}\langle 110 \rangle$ .

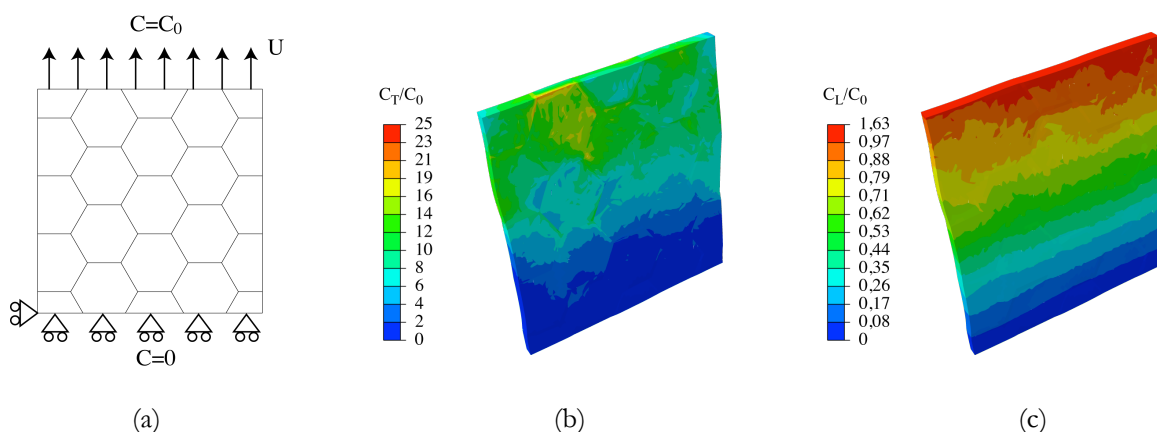


FIG. 7 – (a) Conditions limites du multicristal et Cartes de l’hydrogène (b) piégé et (c) diffusif.

Sur la figure 7b et c sont reportées les cartes de la répartition des populations d’hydrogène piégés et diffusif. Cette dernière population semble peu affectée par le champ de contrainte hétérogène, tandis que la répartition d’hydrogène piégé est en forte corrélation avec la topologie des grains.

## 4 Conclusions, perspectives

L'implémentation numérique, et le couplage, de différents modèles et procédures numériques permettant de traiter de problèmes couplés de diffusion-plasticité-rupture a été réalisé dans Abaqus. Des simulations ont été menées sur des essais mécaniques spécifiques d'étude de la sensibilité à l'hydrogène des tôles métalliques, en configuration axisymétrique ou en déformation plane. Les simulations ont été étendues au cas d'un multicristal en chargement uniaxial en 3D afin de développer les outils de prise en compte de l'anisotropie d'origine cristalline dans la modélisation de la FPH.

## Références

- [1] Krom A.H.M., Koers R.W.J. and Bakker A., Hydrogen transport near a blunting crack tip, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47, 4, 971–992, 1999.
- [2] Svoboda J. and Fischer F.D., Modelling for hydrogen diffusion in metals with traps revisited, *Acta Materialia*, 60, 3, 1211–1220, 2012.
- [3] Kumnick A.J. and Johnson H.H., Deep trapping states for hydrogen in deformed iron, *Acta Metallurgica*, 28, 1, 33–39, 1980.
- [4] Olden V., Alvaro A. and Akselsen O.M., Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint—Experiments and FE simulations, *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 15, 11474–11486, 2012.
- [5] Oriani R.A., The diffusion and trapping of hydrogen in steel, *Acta Metallurgica*, 18, 1, 147–157, 1970.
- [6] Chêne J. and Brass A.M., Hydrogen transport by mobile dislocations in nickel base superalloy single crystals, *Scripta Materialia*, 42, 5, 537–542, 1999.
- [7] Serebrinsky S., Carter E.A. and Ortiz M., A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, 10, 2403–2430, 2004.
- [8] Xu X.P. and Needleman A., Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42, 1397–1434, 1994.
- [9] Scheider I., Pfuff M. and Dietzel W., Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model, *Engineering Fracture Mechanics*, 75, 15, 4283–4291, 2008.
- [10] Gao Y.F. and Bower A.F., A simple technique for avoiding convergence problems in finite element simulations of crack nucleation and growth on cohesive interfaces, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12, 3, 453–463, 2004.
- [11] Abaqus, 2008. User Subroutine Reference Manual, Paragraph 1.1.19.
- [12] Charles Y., Gaspérini M., Disashi J. and Jouinot P., Numerical modelling of the Disk Pressure Test up to failure under gaseous hydrogen, *Journal of Materials Processing Technology*, 212, 8, 1761–1770, 2012.
- [13] ISO 11114-4, 2005. Transportable gas cylinders – compatibility of cylinder and valve materials with gas contents – part 4: test methods for selecting metallic materials resistant to hydrogen embrittlement.
- [14] Pospieszczyk A. and Tagle J.A., Adsorption behaviour of H<sub>2</sub> and CO on Inconel 600 surfaces under laser-induced thermal desorption, *Journal of Nuclear Materials*, 105, 1, 14–22, 1982.
- [15] ASTM G30 - 97(2009) Standard Practice for Making and Using U-Bend Stress-Corrosion Test Specimens.
- [16] Takagi S., Toji Y., Yoshino M. and Hasegawa K., Hydrogen Embrittlement Resistance Evaluation of Ultra High Strength Steel Sheets for Automobiles, *ISIJ International*, 52, 2, 316–322, 2012.
- [17] Hadžipašić A.B., Malina J. and Nižnik Š., The influence of microstructure on hydrogen diffusion in dual phase steel, *Acta Metallurgica Slovaca*, 17, 2, 129–137, 2011.
- [18] Huang Y., A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS Finite Element Program. Mech. Report 178, Division of Applied Sciences, Harvard University, Cambridge, MA, 1991.