



HAL
open science

Optimisation des joints soudés de canalisation pour le transport du dihydrogène gazeux

Delphine Retraint, Patrick Olier, Sebastien Rouquettes, Laurent Briottet,
Julien Monfrini, Laurent Waltz

► **To cite this version:**

Delphine Retraint, Patrick Olier, Sebastien Rouquettes, Laurent Briottet, Julien Monfrini, et al.. Optimisation des joints soudés de canalisation pour le transport du dihydrogène gazeux. Université de montpellier. 2023. hal-04543752

HAL Id: hal-04543752

<https://hal.science/hal-04543752>

Submitted on 12 Apr 2024

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.

STAGE MASTER MECANIQUE 2023

Prénom, NOM : Julien MONFRINI
Parcours master : Calculs et Simulation en Ingénierie Mécanique
Année master : 2
Tuteur universitaire : Laurent WALTZ
Président de jury : Thierry LAURENT
Responsable des stages : Thierry LAURENT



www.meca.univ-montp2.fr

Optimisation des joints soudés de canalisation pour le transport du dihydrogène gazeux



Mots clés

<i>Nature de l'activité</i>	<i>Branche de l'activité économique</i>	<i>Domaine technologique</i>	<i>Application physique directe</i>	<i>Code de simulation – Outils CAO</i>
Recherche fondamentale (RF)	Energie (pétrole, chimie, gaz, eau) (NRJ)	Mécanique (MEC)	Matériaux (MAT)	Autres (AUT)

Société : Laboratoire de Mécanique et de Génie Civil
Localité (code postal) : Montpellier (34)
Maître de stage : Laurent WALTZ



<https://lmgc.umontpellier.fr>



Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mon tuteur de stage, Laurent Waltz, pour cette période en laboratoire très instructive, qui m'a permis de découvrir le monde de la recherche, ses avantages et contraintes ; et la réalité de nombreux des professeurs que je côtoie ou ai pu côtoyer durant mon cursus universitaire à la Faculté des Sciences de Montpellier. Je le remercie aussi pour m'avoir accompagné et poussé dans mon travail tout au long du stage.

Je remercie aussi Delphine Retraint, Patrick Olier, Sebastien Rouquettes, et Laurent Briottet, pour l'aide et les connaissances qu'ils m'ont apporté pendant ce stage.

Je remercie Thierry Laurent, Responsable des Stages, pour l'aide et le suivi global du stage.

Je souhaite remercier le Laboratoire de Mécanique et de Génie Civil de Montpellier, de m'avoir accueilli pour mon stage de fin d'année.

Enfin, je remercie le Département de Mécanique et la Faculté des Sciences de Montpellier pour cette formation de Master, et plus globalement, pour ma formation générale depuis ma première année de licence.

Table des matières :

I Introduction:

I-1 Présentation LMGc

I-2 Objectif du stage

II Etude bibliographique

II-1 Procédé SMAT

II-2 Effet du SMAT sur le comportement mécanique et la microstructure du matériau

II-3 Matériau pipeline : Acier X80 et ses propriétés

II-4 L'hydrogène dans les matériaux

II-4-1 Mécanisme d'adsorption et d'absorption de l'hydrogène :

II-4-2 Hydrogène réticulaire

II-4-2-1 Diffusion de l'hydrogène en réseau

II-4-2-2 Piégeage de l'hydrogène réticulaire

II-5 Mécanisme de Fragilisation Par l'hydrogène

II-5-1 HEDE : Hydrogen-Enhanced Decohesion

II-5-2 HELP : Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity

II-5-3 AIDE : Adsorption-Induced Dislocation Emission

II-5-4 HESIV : Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies

II-5-5 Discussion sur les différents mécanismes de la FPH étudiés :

II-6 Traitement SPD pour améliorer la FPH

II-7 Traitement SMAT sur un cordon soudure, pipeline en acier X80

III Simulation :

III-1 Recherches de données

III-2 Modèle 1

III-2-1 Résolution analytique

III-2-1-1 Modélisation du problème

III-2-1-2 Equation de diffusion 1D

III-2-1-3 Schéma explicite

III-2-1-3-1 Discrétisation du problème



III-2-1-3-2 Schéma de résolution

III-2-2 Résolution numérique

III-3 Modèle 2

III-3-1 Résolution analytique

III-3-1-1 Modélisation du problème

III-3-1-2 Schéma implicite de Crank-Nicolson

III-3-1-3 Discrétisation des conditions limites

III-3-1-4 Milieux de coefficients de diffusion différents

III-3-1-5 Résolution du système tridiagonal

III-3-2 Résolution numérique

III-4 Discussion :

IV Techniques expérimentales

IV-1 Réalisation des échantillons

IV-1-1 Découpes

IV-1-3 Tests de dureté sur échantillons enrobés

IV-2 Discussion sur la suite des tests expérimentaux :

V Conclusion et perspectives

Annexe

I Introduction

I-1 Présentation du LMGC et de services

J'ai effectué mon stage au LMGC, Laboratoire de Mécanique et de Génie Civil, du 13 mars 2023 au 31 juillet 2023 dans le cadre de mon stage de fin d'étude de mon Master Calculs et Simulation en Ingénierie Mécanique.

Le Laboratoire de Mécanique et Génie Civil aborde dans ces activités des thématiques originales basées sur des questionnements fondamentaux, mais aussi des thématiques plus récentes basées sur des interactions avec la biologie, la chimie, les sciences de l'environnement, etc.

Il est organisé en 7 équipes de recherche. Le LMGC couvre un large spectre de thématiques allant du soudage à la thermographie en passant par la biomécanique, le bois, les mathématiques, les milieux granulaires ou les structures innovantes.

Ces thématiques concilient recherche structurante et recherche appliquée au cœur de l'innovation et des préoccupations de l'industrie, de la santé et de l'environnement.

Je suis rattaché aux équipes ThermoMécanique des Matériaux ThM2 et Assemblages Soudés AS. L'équipe ThM2 étudie les lois de comportement des Matériaux Solides. L'approche consiste à s'assurer de la validité thermodynamique des modèles de comportement au travers de bilans d'énergie associés aux processus de déformation. Et l'équipe AS, aussi présente à l'IUT de Nîmes, développe des compétences dans le domaine du soudage, pour créer un pôle de compétences associant formation, recherche et transfert de technologie.

Ce stage se réalise en collaboration avec le CEA Saclay, et l'Université de Technologie de Troyes (UTT).

I-2 Objectif du stage

Le développement de la filière hydrogène requiert la nécessité de produire, de transporter et de stocker de grandes quantités d'hydrogène sous de multiples conditions de mise en œuvre et d'exploitation. L'une des préoccupations majeures pour la sécurité et l'environnement des utilisateurs est la fragilisation par l'hydrogène des cuves de réacteur, des pipelines de transport et des conteneurs de stockage, ainsi que les scénarios d'explosion potentiels liés à l'accumulation d'hydrogène dans des espaces clos. Pour le cas spécifique des pipelines de transport, il est à craindre que la molécule d'hydrogène se dissocie à la surface de l'acier et diffuse dans le métal sous-jacent, altérant considérablement ses propriétés physiques et mécaniques. Les joints soudés des pipelines ayant subi un historique thermomécanique différent du reste du pipe, demandent donc une attention toute particulière en termes de tenue à la Fragilisation par l'Hydrogène (FPH).

Des études récentes montrent que des procédés de traitement de surface de type « shot peening » peuvent atténuer les effets induits par l'hydrogène dans des aciers de transport via l'introduction d'un niveau d'écaillage élevé et des contraintes résiduelles de compression en surface. Un certain nombre d'études ont également porté plus spécifiquement sur la fragilisation des joints soudés

en atmosphère hydrogène. C'est dans ce contexte, que l'on souhaite évaluer l'intérêt des procédés de déformation plastique sévère (SPD) de type SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment) pour l'amélioration de la diffusion de l'hydrogène ainsi que de la FPH des joints soudés.

Pour se faire, la première partie de mon stage a été d'effectuer un état de l'art bibliographique permettant d'évaluer l'impact de la diffusion d'hydrogène dans les aciers, d'identifier les mécanismes de Fragilisation Par Hydrogène intervenant lors de la diffusion d'hydrogène dans l'acier X80, et de comprendre leurs fonctionnements. Aussi, il était nécessaire d'effectuer des recherches sur les procédés de déformation plastique sévère (SPD), notamment le SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment), et l'impact de tels méthodes sur les aciers, en particulier l'acier X80. Enfin, il était aussi important de s'intéresser à la diffusion d'hydrogène dans la partie soudée du pipeline.

La deuxième partie du stage été concentré sur la réalisation de simulation de diffusion dans un matériau homogène (X80), puis dans un modèle dit multicouche, simulant l'effet du traitement SMAT sur le matériau. Cette partie a été faite en collaboration avec Sebastien Rouquettes de l'équipe Assemblage Soudés.

La dernière partie du stage, se déroulant en même temps que la deuxième, consiste à la réalisation des différents échantillons qui serviront aux tests de perméation, le procédé SMAT réalisé au LASMIS de l'Université de Technologie de Troyes (UTT), et les essais de perméation au CEA de Grenoble.

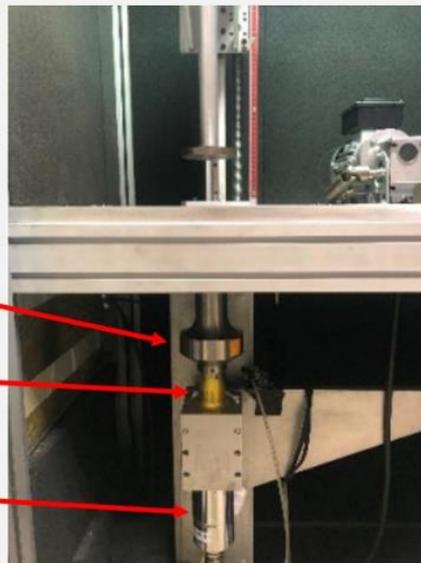
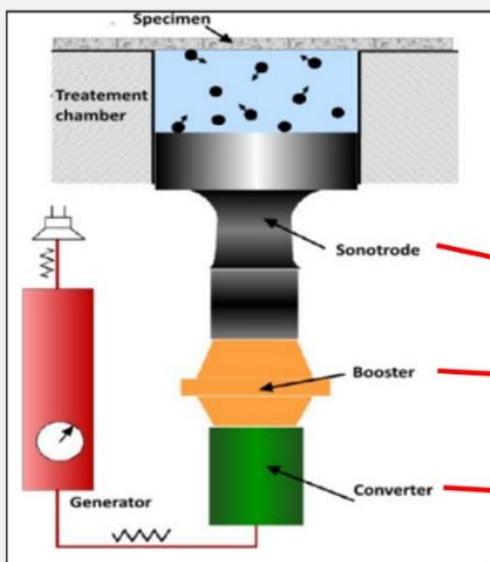
Ce rapport présente les différents travaux menés durant ce stage. La première partie est consacrée à l'étude bibliographique. S'ensuit la partie traitant des simulations, et enfin les techniques expérimentales à mettre en œuvre pour nos différents essais. Une conclusion ainsi que des perspectives d'évolution concluent ce rapport.

II Etude bibliographique

II-1 Procédé SMAT

Le procédé SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment), est un traitement de surface qui a pour objectif la formation d'une sous-structure dans la couche superficielle, à la suite de déformations plastiques sévères (SPD, Severe Plastic Déformations) aléatoires et cycliques. Cette sous-structure peut être utilisée pour améliorer la résistance à la fatigue, la résistance à la corrosion, la fissuration par corrosion sous contrainte du matériau traité.

Le principe du traitement SMAT repose sur la mise en mouvement de billes sphériques par une sonotrode, à l'aide d'un générateur à ultrasons (environ 20kHz). Les billes vont venir impacter la surface du matériau traité et engendrer des déformations plastiques sévères, mais aussi induire des contraintes résiduelles de compression. Au bout d'un temps de traitement donné, une nouvelle structure apparaît à la surface, structure à taille de grain raffinée, pouvant être de l'ordre nanométrique pour certains matériaux.



Figures 1,2,3 : Schéma du mécanisme SMAT [Ben Afia, 2016] (à gauche), photo de la machine SMAT du LASMIS (milieu), et photo de la chambre de traitement remplie de billes (droite) [Daban, 2022]

Ce traitement va aussi créer de nombreux défauts, notamment dans la couche la plus superficielle. En effet les déformations plastiques sévères vont grandement augmenter la densité de joints de grains mais aussi la quantité de dislocations. Ces défauts vont avoir un impact sur le piégeage de l'hydrogène dans les différentes couches, faisant office de site de piégeage pour ralentir la diffusion de l'hydrogène (cf. II-4-2-2 Piégeage de l'hydrogène réticulaire).

Les principaux paramètres de réglage du procédé sont le temps de traitement (s), le diamètre des billes (mm), le nombre de billes, l'amplitude des vibrations (μm) et la température (K).

II-2 Effet du SMAT sur le comportement mécanique et la microstructure du matériau

Comme dit précédemment, le procédé SMAT induit une couche constituée de grains de taille nanométrique (pour certains matériaux), d'épaisseur de quelques dizaines de micromètres (suivant les matériaux étudiés). La génération de cette couche nanostructurée en surface du matériau, a des effets directs sur le comportement mécanique. En effet, la taille de grains a de multiples influences sur le comportement du matériau traité. D'après la relation bien connue de Hall-Petch (ci-dessous), la taille de grain a un effet direct sur la limite élastique et la ductilité du matériau, ainsi que sur le niveau d'écroutissage et la dureté du matériau.

Loi de Hall-Petch :

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \quad (1)$$

Avec σ_y la limite d'élasticité (MPa), σ_0 et k des constantes (en MPa et MPa.nm), et d la taille de grain (nm).

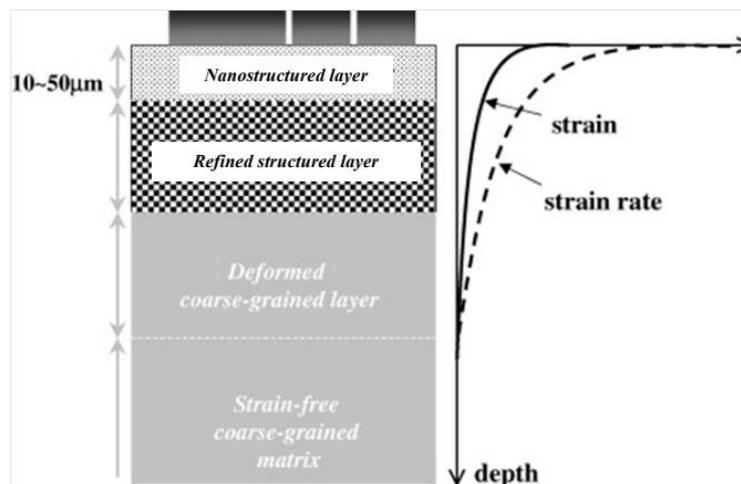


Figure 4 : Evolution de la microstructure et distribution de la déformation/vitesse de déformation au sein d'un matériau après traitement SMAT [K. Lu, J. Lu, 2002]

Dans le cas d'un essai de traction, la loi d'Hall-Petch permet d'estimer la limite d'élasticité d'un matériau à partir de la dimension des grains à travers l'équation précédente (1).

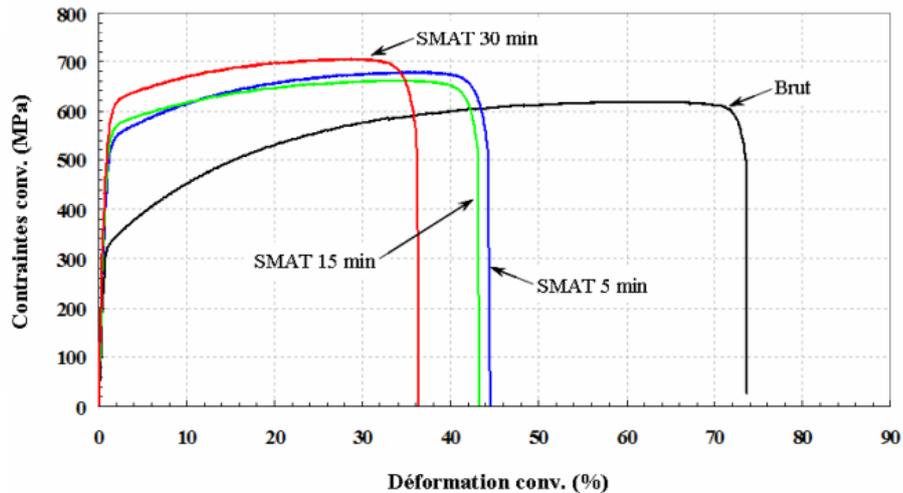


Figure 5 : Courbes de traction pour des échantillons en acier, SMATés avec des billes de \varnothing 3mm pour différents temps de traitement [Waltz, 2009].

Il est possible d’observer une augmentation de la limite élastique du matériau, proportionnelle au temps de traitement SMAT, mais aussi une diminution de la ductilité du matériau avec l’augmentation du temps de SMAT. Cela s’explique notamment par la loi d’Hall-Petch, le raffinement de la taille des grains augmente la limite élastique du matériau traité.

Comme dit précédemment, la taille de grain a un effet direct sur le niveau d’érouissage et la dureté du matériau. [Hahn et al.] ont proposé la relation suivante pour calculer la dureté en fonction de la taille de grain :

$$H = H_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \quad [\text{Hahn et al.}]$$

Avec H la dureté du matériau (GPa), H_0 et k des constantes matériaux (en GPa et GPa.nm), et d la taille des grains (nm).

Par rapport à la dureté du matériau, [Waltz, 2009] a étudié l’évolution de la dureté en fonction de la profondeur pour un acier inoxydable austénitique (316L) après SMAT.

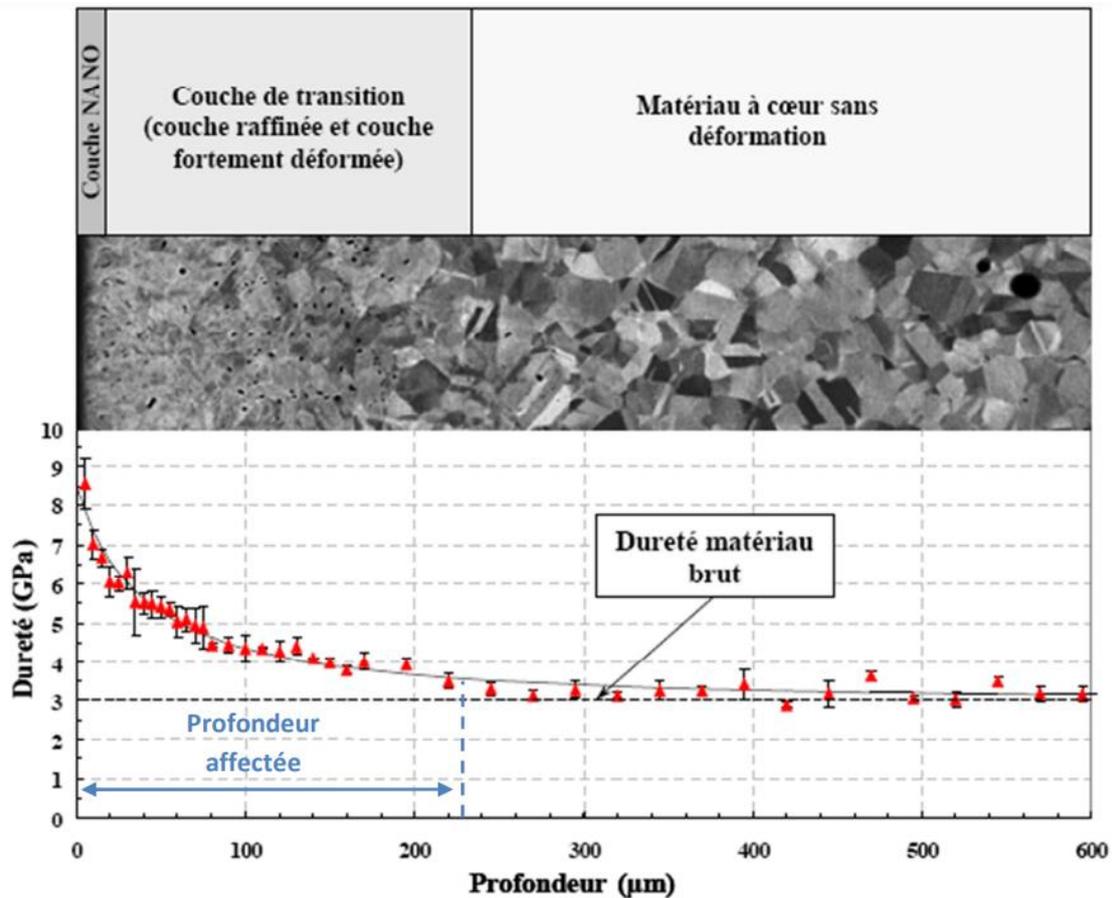


Figure 6 : Mesures de dureté locale (GPa) par nanoindentation sur une éprouvette SMATée pendant 30 minutes avec des billes de \varnothing 3mm, [Waltz, 2009].

Ici, la profondeur correspond à la distance des différents indents par rapport à la surface traitée. Comme il est possible de le voir sur la figure ci-dessus, un gradient de taille de grain a un effet direct sur le niveau d'écroutissage et la dureté du matériau (Hall-Petch). Ici, la dureté du matériau est la plus élevée proche de la surface SMATée (à gauche), et progressivement, la courbe arrive sur une asymptote horizontale à la courbe de dureté du matériau brut, en progressant dans la profondeur du matériau.

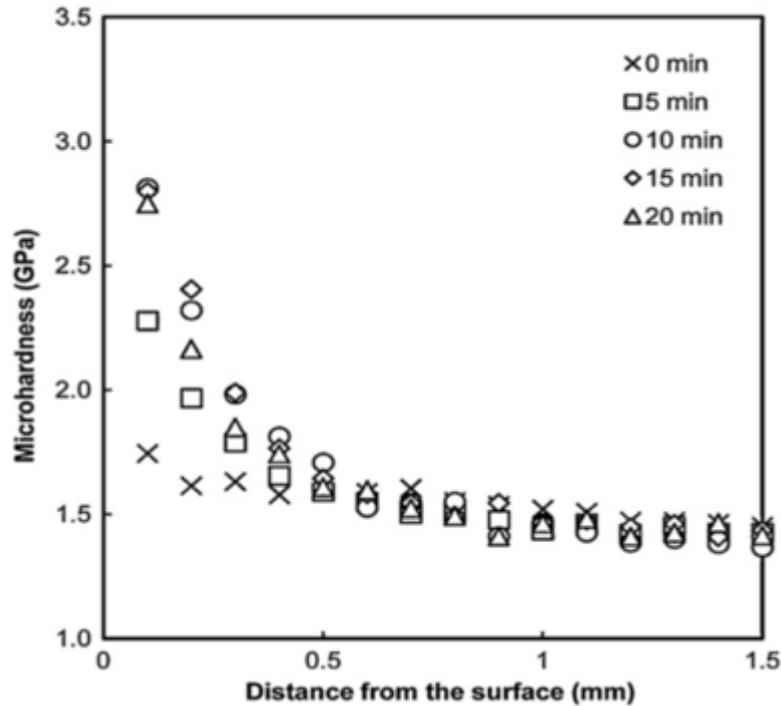


Figure 7 : Microdureté sur acier 316L (GPa), pour différents temps de SMAT, [Samih, 2014]

On peut aussi constater sur la figure ci-dessus, que le temps de traitement SMAT a un impact sur la dureté du matériau, avec une augmentation de la dureté pour un temps de SMAT plus élevé.

II-3 Matériau pipeline : Acier X80 et ses propriétés

Le matériau étudié est un acier à haute limite d'élasticité de grade API (American Petroleum Institute) X80 utilisé pour la construction de pipelines. L'idée ici étant de réutiliser les pipelines servant au transport du gaz naturel, en appliquant un traitement SMAT sur la surface interne du pipeline, pour pouvoir transporter de l'hydrogène. Ces pipelines mesurent environ 1 mètre de diamètre, pour une épaisseur de la paroi de 12.5mm environ.

Composition chimique :

Orientation	C	Mn	Si	Nb	V	Cu	P	S
45°	0,075	1,86	0,35	0,05	<0,01	0,22	0,015	<0,003
90°	0,076	1,84	0,35	0,05	<0,01	0,22	0,015	<0,003
135°	0,076	1,83	0,35	0,05	<0,01	0,22	0,015	<0,003
180°	0,075	1,82	0,35	0,05	<0,01	0,22	0,015	<0,003

Figure 8 : Caractéristiques mécaniques nécessaires à l'obtention des grades API pour les aciers HLE [Luu 2006].

Le choix de l'acier X80 ne s'explique pas seulement par l'existence d'infrastructures, mais aussi par ces propriétés mécaniques.

En effet, il faut que l'acier sélectionné dispose d'un grade pas trop haut pour garantir une meilleure résistance à la FPH [Cialone 1988, Trasatti 2005, Hardie 2006]. Aussi, un grade suffisamment élevé serait requis pour permettre la production de pipelines à bas coût, ce qui n'est pas nécessaire dans cette étude.

II-4 L'hydrogène dans les matériaux

Les effets et mécanismes du dihydrogène sur les matériaux sont très nombreux. [Moro, 2009] a notamment couvert ce sujet de façon très complète. Cette partie n'est qu'un résumé de quelques-uns de ces effets/mécanismes.

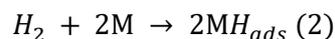
Par sa taille, l'atome d'hydrogène a tendance à se diffuser plus facilement dans les matériaux métalliques. Les métaux sont perméables à l'hydrogène, perméation qui s'effectue en deux phases dans ces métaux : l'adsorption et l'absorption de l'hydrogène dans les sites interstitiels du réseau métallique.

II-4-1 Mécanisme d'adsorption et d'absorption de l'hydrogène :

Le mécanisme d'adsorption correspond à la dissociation de la molécule de dihydrogène et à la création de liaisons physiques puis chimiques avec la surface du matériau.

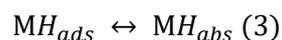
Le mécanisme d'absorption correspond au passage des atomes liés à la surface vers les sites interstitiels du réseau métallique.

Le phénomène d'adsorption peut se résumer à l'équation suivante :



Cette équation correspond à la dissociation des molécules d' H_2 , puis à l'adsorption des atomes d'hydrogène. Elle est réversible, certains atomes d'hydrogène adsorbés se recombinent en H_2 (désorption des atomes d'hydrogène, se recombinant).

La deuxième étape, celle de l'absorption, implique le passage des atomes adsorbés vers les sites interstitiels du réseau métallique (3). Aussi, la réaction opposée se produit, avec la migration des atomes d'hydrogène absorbés vers la surface du matériau.



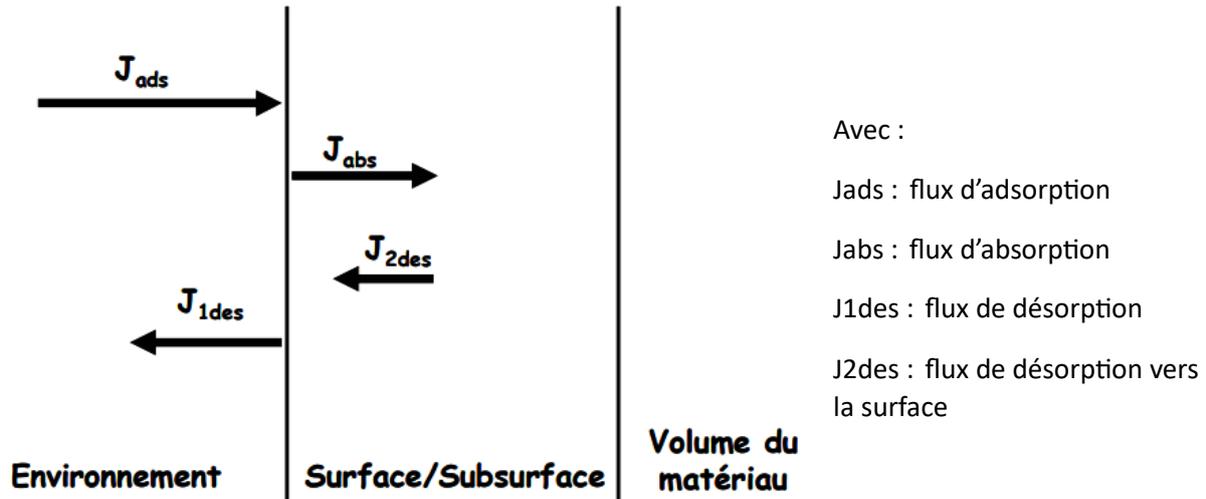


Figure 9 : Schématisation des flux d'adsorption, d'absorption et de désorption d'hydrogène [Moro, 2009]

Les mécanismes de pénétration de l'hydrogène influent sur la quantité et la répartition d'hydrogène dans le matériau. La compréhension des étapes d'adsorption et d'absorption est donc primordiale pour l'étude de la FPH.

II-4-2 Hydrogène réticulaire

II-4-2-1 Diffusion de l'hydrogène en réseau

Une fois les atomes d'hydrogène absorbés dans la matrice cristalline, par sa faible taille l'atome va se loger dans des sites interstitiels (sites tétraédriques dans les cubiques centré (CC) et octaédriques dans les Cubiques Faces Centrés (CFC)), provoquant une distorsion du réseau.

La diffusion réticulaire de l'atome d'hydrogène correspond à des séries de sauts entre sites interstitiels. Une énergie d'activation ΔW_L est nécessaire pour passer le col énergétique entre deux sites (figure). Dans le réseau cristallin d'un acier ferritique, il a été montré que l'enthalpie de migration de l'hydrogène est faible, de l'ordre de 10 kJ/mol.

La figure n'est qu'une schématisation très simplifiée de la diffusion réticulaire.

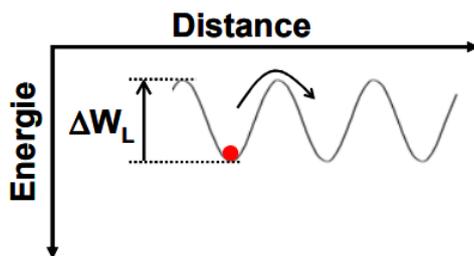


Figure 10 : Schématisation de la diffusion réticulaire de l'hydrogène, [Moro, 2009]

La première (4) et la seconde loi de Fick (5) décrivent la diffusion de l'hydrogène en réseau :

$$\vec{J} = -D_0 \vec{\nabla} C_L \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = \text{div}(-D_0 \vec{\nabla} C_L) \quad (5)$$

Où D_0 est le coefficient de diffusion réticulaire ($m^2 \cdot s^{-1}$), J le flux d'hydrogène ($m^{-2} s^{-1}$), et C_L la concentration réticulaire d'hydrogène ($mol \cdot m^{-3}$).

La diffusion peut aussi être influencé par la présence d'un champ de contrainte, d'un gradient de température, ou autres.

II-4-2-2 Piégeage de l'hydrogène réticulaire

Un piège est défini comme étant un site où l'hydrogène peut diminuer son potentiel chimique. Ces pièges viennent modifier la diffusion de l'hydrogène au sein du réseau cristallin. Ils peuvent notamment apparaître après traitement SMAT (cf. II-1 Procédé SMAT).

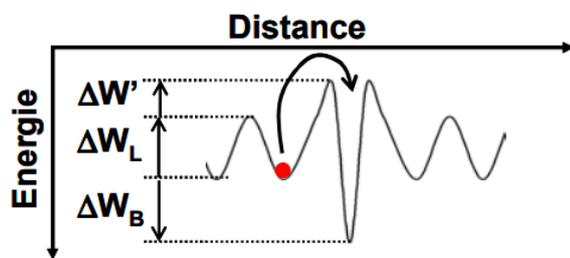


Figure 11 : Schématisation du piégeage de l'hydrogène, [Moro, 2009]

Ici, $\Delta W'$ correspond au col énergétique que doit franchir l'atome d'hydrogène pour entrer dans le piège. Néanmoins, ΔW_B , l'énergie de piégeage, est la qualité essentielle d'un piège. ΔW_B quantifie l'abaissement d'énergie de l'atome d'hydrogène piégé, et permet de distinguer schématiquement deux types de pièges :

- Les pièges irréversibles, caractérisés par des énergies de piégeage fortes. Dans ce cas, la probabilité de sortie d'un atome d'hydrogène piégé est quasi nulle.
- Les pièges réversibles, caractérisés par des énergies de piégeage faibles.

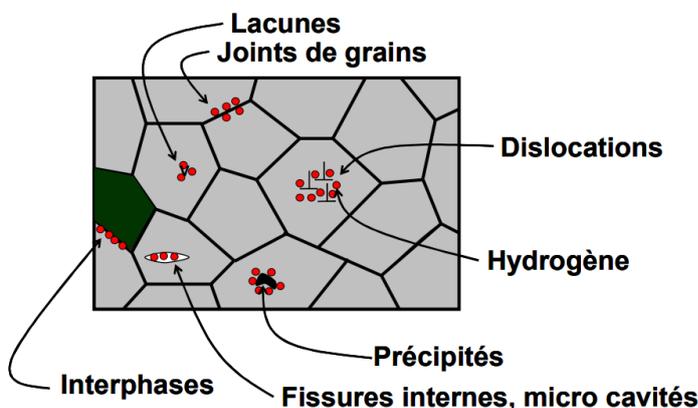


Figure 12 : Schématisation des sites de piégeage de l'hydrogène, [Moro, 2009]

II-5 Mécanisme de Fragilisation Par l'Hydrogène

La diffusion de l'hydrogène au sein d'un matériau métallique a un impact sur les propriétés mécaniques du matériau affecté. Différentes recherches ont montré un impact sur les propriétés suivantes : Ductilité, striction, contrainte à la rupture, limite d'élasticité, tenue en fatigue, et autres.

Ces modifications des propriétés mécaniques peuvent s'expliquer par les différents mécanismes intervenant dans la FPH.

Les mécanismes présentés plus bas sont ceux susceptibles d'intervenir dans notre étude. Il existe d'autres mécanismes liés à la FPH.

II-5-1 HEDE : Hydrogen-Enhanced Decohesion

L'article de [Zhiwei G. et al., 2021] a permis la recherches des articles cités ci-dessous.

L'HEDE a été proposé à l'origine par [Troiano, 1960] et développé par [Oriani, 1972] en postulant que la diffusion d'hydrogène dans le réseau peut réduire directement l'énergie de cohésion des liaisons inter-atomiques. En effet, la forte concentration d'hydrogène dans le réseau perturbe le champ électronique du métal, entraînant une diminution de l'énergie de cohésion inter-atomique. L'HEDE est généralement utilisée pour expliquer la rupture fragile le long de diverses interfaces en présence d'hydrogène, plutôt que pour rationaliser la FPH des aciers pour pipelines, qui est souvent transgranulaire avec une surface de rupture ductile.

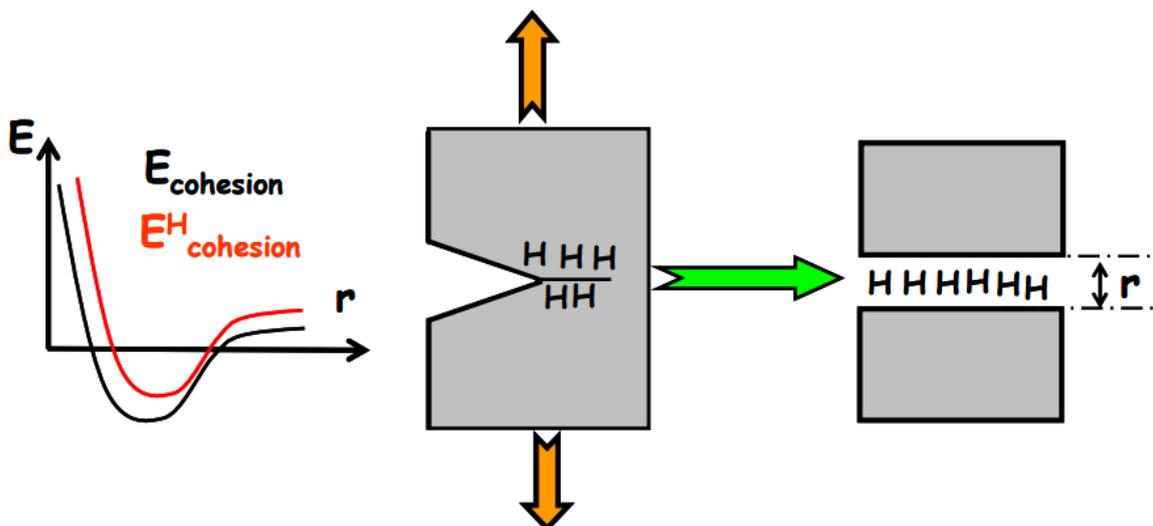


Figure 13 : schématisation du mécanisme HEDE. Ici, $E_{cohesion}$ représente l'énergie de cohésion du matériau, $E_{cohesion}^H$ représente l'énergie de cohésion du matériau en présence d'hydrogène, et r est l'épaisseur de l'échantillon, [Moro, 2009].

II-5-2 HELP : Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity

L'article de [J. Song, W.A. Curtin;2014] a permis la recherches des articles cités ci-dessous.

Le mécanisme HELP (Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity) a été proposée pour la première fois par [Beachem, 1972] sur la base de l'observation de surfaces de rupture ductiles dans des aciers mi-carbone fragilisés par l'hydrogène. Il provoque une forte localisation de la plasticité, qui induit une diminution de la ductilité macroscopique du matériau.

Deux mécanismes ont été couramment cités pour provoquer les phénomènes HELP observés :

- L'hydrogène augmente la mobilité des dislocations, ce qui conduit à l'adoucissement du matériau [Matsui et al., 1978 ; Somerday et al., 2008 ; Vlasov, Zaznoba, 1999]. Ce mécanisme est dû à la formation d'atmosphères de Cottrell [1.] d'hydrogène autour des dislocations qui provoque une augmentation de la mobilité des dislocations et une diminution de leur écartement respectif.

- L'hydrogène réduit les interactions dislocation-dislocation, ce qui facilite le glissement planaire et augmente les phénomènes d'empilement [Chateau et al., 2002 (1) ; Chateau et al., 2002 (2) ; Yagodzinsky et al., 2005].

Ces effets combinés aboutissent à la formation d'empilements denses de dislocations qui entraînent une rupture localisée du matériau en pointe d'empilement, où se forme un fort champ de contrainte (figure 14) [Moro, 2009].

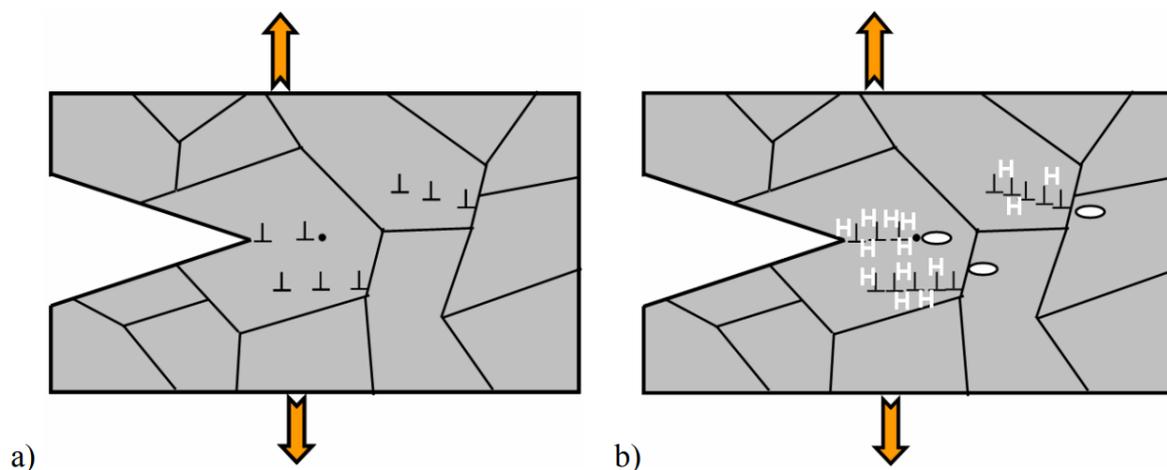


Figure 14 : Schématisation du mécanisme HELP, déformation sans (a) et avec hydrogène (b), [Moro, 2009].

II-5-3 AIDE : Adsorption-Induced Dislocation Emission

L'article de [Hanyu Li et al., 2022] a permis la recherches des articles cités ci-dessous.

[Lynch, 1988] a proposé la théorie de l'émission de dislocations induite par l'adsorption (AIDE, Adsorption-Induced Dislocation Emission), qui met en évidence la relation entre la solution d'hydrogène dans la sous-surface du front de fissure et la surface de fissure alvéolée, contrairement à la théorie HELP, qui prend en compte l'interaction hydrogène-dislocation dans le réseau.

En présence de contraintes au niveau du front de la fissure, où l'espacement des sites interstitiels du réseau est élargi, le mécanisme AIDE prédit que l'hydrogène à la pointe de la fissure conduit à une émission de dislocation localement accrue de la surface vers le matériau [Lu et al., 2001 ; Lynch, 2011 ; Taketomi et al., 2010].

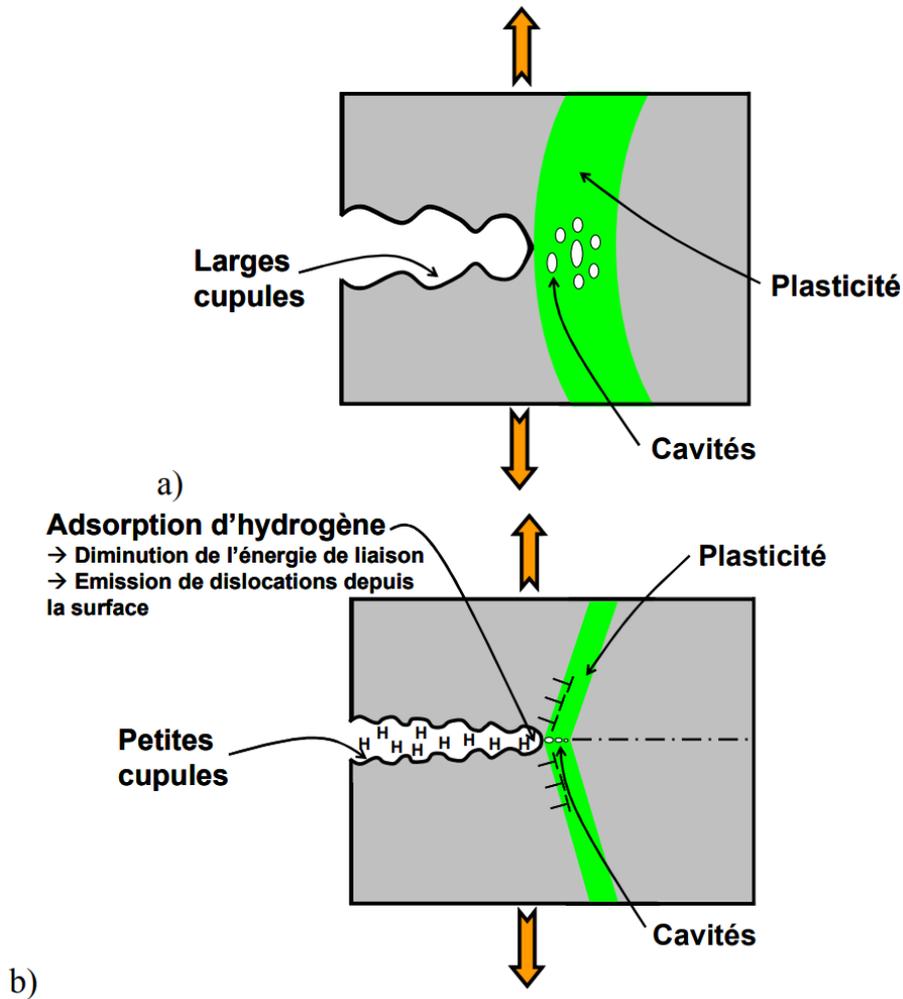


Figure 15 : Schématisation du mécanisme AIDE, rupture par déformation plastique (a) et rupture assistée par l'hydrogène selon le modèle AIDE (b) (cupule = coupe), [Moro, 2009].

II-5-4 HESIV : Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies

L'article de [Y. Sugiyama et al., 2021] a permis la recherches des articles cités ci-dessous.

L'un des mécanismes typiques proposés pour l'HE est le mécanisme HESIV (Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies), qui postule que la présence d'hydrogène favorise la formation de lacunes induites par la déformation, ce qui conduit à la FPH [[K. Sakaki et al., 2006][M. Nagumo, 2004][M. Nagumo et al., 2019][K. Ebihara et al., 2021][Y. Sugiyama et al., 1, 2021]]. La surconcentration de ces lacunes cause ici la fragilisation du métal, le mécanisme HESIV étant ici promoteur de la FPH. Il a aussi été signalé que non seulement l'action directe de l'hydrogène, mais aussi le mécanisme HESIV sont impliqués dans la réduction de la ductilité des matériaux [K. Takai et al., 2008].

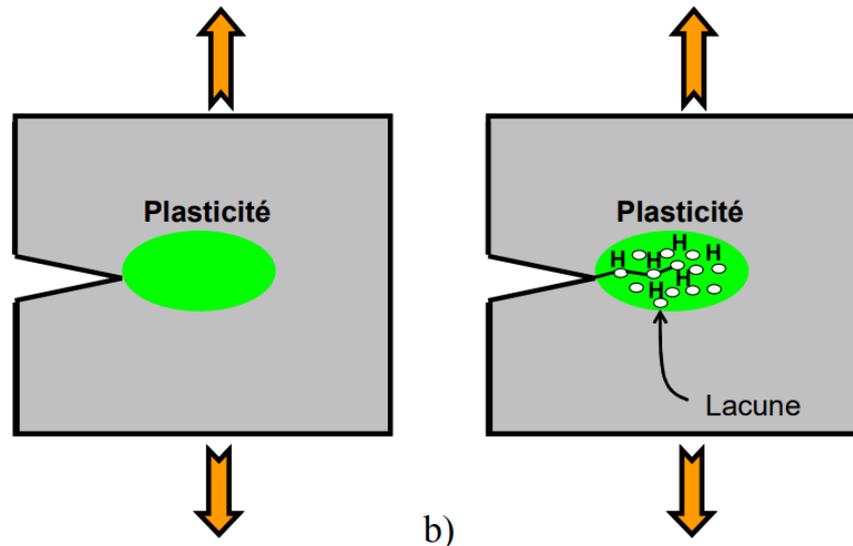


Figure 16 : Schématisation du mécanisme HESIVE, rupture sans hydrogène (a) et avec hydrogène (b), [Moro, 2009].

II-5-5 Discussion sur les différents mécanismes de la FPH étudiés :

Différents mécanismes interviennent dans la FPH, avec chacun leur particularité : le modèle HEDE suppose que l'hydrogène réticulaire affaiblit les liaisons inter-atomiques, le mécanisme HELP explique cette fragilisation par l'hydrogène piégé dans les dislocations (atmosphère de Cottrell), le modèle AIDE fait intervenir l'hydrogène adsorbé, et enfin, le mécanisme HESIVE n'apporte pas de réponse quant à la nature de la population d'hydrogène responsable de la fragilisation.

Néanmoins, la FPH serait causée par une combinaison de ces mécanismes, et non un seul.

II-6 Traitement SPD pour améliorer la FPH

Plusieurs études ont été menées pour étudier la résistance à la FPH de différents matériaux.

Lors de son stage, [Daban, 2022] a pu réaliser des essais de perméation sur différents échantillons d'acier X80, des disques d'un diamètre de 49mm, épaisseur de 1mm, avec une surface traitée de 33mm. Ici, on s'intéressera aux résultats du traitement SMAT1 et SMAT2.

Pour les données de ses expériences :

	SMAT1	SMAT2
Billes	Acier 100C6-3mm-20g	
Temps de traitement (min)	10	
Amplitude de vibration (μm)	12.5	25

Seul l'amplitude de vibration de la sonotrode change entre chaque type de SMAT

La pression de l'hydrogène est fixée à 8 bars pour des essais à 30°C et 80°C.

Les résultats obtenus pour le SMAT1 ne sont pas concluant, mais ceux du SMAT2 ont l'air intéressant.

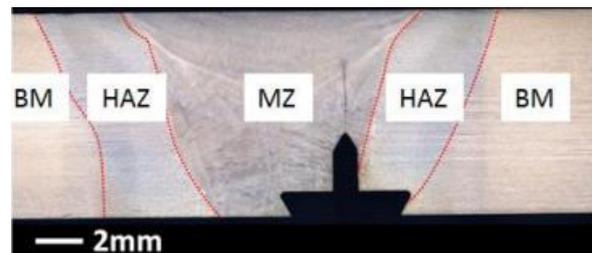
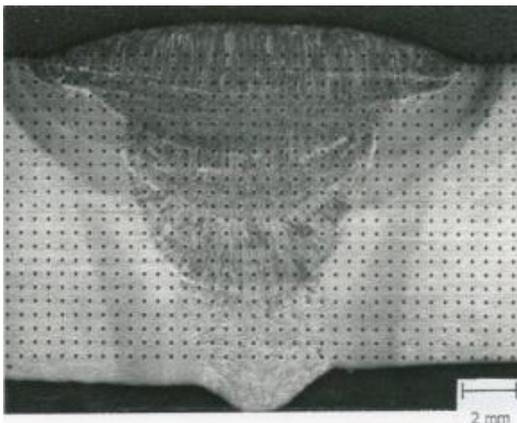
Bien que n'ayant pas eu le temps de finir l'analyse de ces essais SMAT2, [Daban, 2022] indique toutefois que pour un test SMAT2 à 80°C, aucun flux d'hydrogène n'a été détecté durant une semaine.

En faisant un nouveau test à 120°C, après environ 10000s une valeur de $2.7e-10 m^{-2}s^{-1}$, la courbe étant toujours montante. Comme vu en partie bibliographique, la diffusion dans un matériau peut varier en fonction de la température.

II-7 Traitement SMAT sur un cordon soudure, pipeline en acier X80

Plusieurs articles documentent les effets de l'hydrogène sur la partie soudée du pipeline. Une soudure longitudinale parcourt le tronçon de pipeline pour relier les deux extrémités.

Cette zone a été affectée thermiquement, on peut la découper en trois parties : Zone fondu ZF (Melted Zone MZ), Zone Affectée Thermiquement ZAT (Heat Affected Zone HAZ) et le matériau de base MB (Base Metal BM). Ce traitement thermique induit un changement de microstructure dans les zone affectées (MZ et HAZ), et aussi de comportement mécanique.



Figures 17 et 18 : Cordons de soudure sur pipeline en acier X80 [Moro et al.].

L'étude de [Yinghao Sun, Y. Frank Cheng ; 2021] donne les résultats suivants :

Un adoucissement se produit au niveau de la ZAT de la soudure de l'acier X80.

La micro-dureté des zones de soudure a été mesurée à l'aide d'un testeur de dureté microVickers sous une charge de 0,2 kg (HV0.2). La dureté du métal soudé ZF, de la ZAT et de l'acier de base est d'environ 290, 248 et 261 HV0.2, respectivement. Les limites d'élasticité estimées du métal et de la ZAT sont respectivement de 693,60 et 563,27 MPa.

Le flux d'hydrogène est respectivement le plus élevé et le plus faible au niveau de la ZAT et de l'acier de base, sous l'effet des contraintes élastiques et plastiques.

La densité de piégeage de l'hydrogène est toujours la plus élevée et la diffusivité de l'hydrogène la plus faible dans la ZAT. L'hydrogène, une fois qu'il a pénétré dans l'acier soudé, a tendance à s'accumuler dans la ZAT, par rapport aux deux autres zones. L'acier de base présente la plus faible

concentration d'hydrogène sous la surface, la plus grande diffusivité d'hydrogène et la plus faible densité de piégeage. L'acier de base devrait donc être peu sensible aux dommages causés par l'hydrogène.

Lorsque l'acier soudé est soumis à des contraintes, en particulier à une contrainte plastique, la diffusivité et la perméabilité de l'hydrogène diminuent, tandis que la concentration d'hydrogène sous la surface et la densité de piégeage de l'hydrogène augmentent considérablement. Les déformations plastiques favorisent la perméation et le piégeage de l'hydrogène au niveau de la soudure, en particulier au niveau de la ZAT, ce qui augmente la sensibilité aux dommages causés par l'hydrogène. En outre, une concentration de contraintes qui va jusqu'au niveau de la limite d'élasticité se produit au niveau de la ZAT, même sous des contraintes élastiques. L'effet de synergie de l'hydrogène et des contraintes au niveau de la ZAT rend la zone locale plus sensible aux dommages causés par l'hydrogène, tels que la fissuration induite par l'hydrogène.

Il est clair que la ZAT est identifiée comme étant la zone la plus faible face aux différents effets de la diffusion d'hydrogène.

Néanmoins, le dernier paragraphe donne des indices intéressants quant à l'utilisation d'un traitement SMAT sur le cordon de soudure. En effet, la zone soudée de l'acier, soumise à des contraintes plastiques, verrait sa diffusivité et sa perméabilité réduite. De plus la densité de sites de piégeage augmenterait.

Attention, car les déformations plastiques favorisent la perméation au niveau de la soudure, surtout dans la ZAT.

Il sera donc intéressant de procéder aux essais expérimentaux de SMAT, puis diffusion sur les échantillons SMATés, pour discuter de l'évolution des différentes données évoquées précédemment.

III Simulation de diffusion d'hydrogène

L'objectif de cette partie est la création de modèle analytiques et numériques simplifiés de diffusion d'hydrogène.

La première étape pour obtenir une simulation de diffusion dans un cordon de soudure SMATé, passe par la création de modèles simplifiés de diffusion dans des échantillons autres que le cordon de soudure, n'ayant pas été affecté thermiquement. Cela revient à effectuer des simulations de diffusions dans une zone non-affectée thermiquement du pipeline.

Deux modèles sont envisagés :

Le premier modèle (Modèle 1) correspond à la diffusion d'hydrogène dans un matériau homogène.

Le second modèle (Modèle 2) correspond à la diffusion d'hydrogène dans un matériau multicouches, simulant l'effet du procédé SMAT, par en représentant les différentes couches de sous-structures créées par ce procédé (cf. II-1 Procédé SMAT).

Dans un premier temps, une résolution analytique du problème sera effectuée, puis, en se basant sur la solution analytique, une approche numérique sera réalisée. Les résultats obtenus seront à comparer avec des résultats expérimentaux pour confirmer le bon fonctionnement des approches numériques.

III-1 Recherches de données

Les modèles se veulent simpliste mais il est nécessaire de connaître certains paramètres de diffusion pour mener à bien les calculs.

Les données proviennent des articles de [Wang et al., 2020] et [Xinfeng et al., 2016].

Pour le Modèle 1, on retient un coefficient de diffusion dans le matériau de $2^E-8 \text{ m}^2. \text{s}^{-1}$, une épaisseur de plaque de 1mm et une concentration en surface de plaque à de 100 mol/m^3 .*

Pour le Modèle 2, le coefficient de diffusion dans le matériau de base et l'épaisseur ne change pas par rapport au modèle précédent. Le coefficient de diffusion dans la couche nano est fixé à 2^E-10 et 2^E-11 , en fonction des tests, l'épaisseur de cette couche peut varier entre 150 et 300 microns dans ces tests. Le coefficient de diffusion dans la couche de transition est fixé à 2^E-10 , et une épaisseur de couche à 300 microns dans le dernier test (et seul test). La concentration est déterminé grâce à la pression des essais de [Daban, 2022], et relation suivante :

$$c = \frac{P}{RT}$$

Avec c la concentration (mol. m^3), P la pression (Pa), R la constante universelle des gaz parfaits, et T la température (K)

On obtient $c = 320 \text{ mol/m}^3$ pour $P = 8\text{bars}$, $R = 8.314$ et $T = 300\text{K}$.

III-2 Modèle 1

III-2-1 Résolution analytique

III-2-1-1 Modélisation du problème

Considérons une plaque d'épaisseur e , qui se trouve initialement à une concentration nulle à $t=0$. A l'instant $t > 0$, la concentration sur la surface de la plaque est notée C_1 . On suppose que la concentration à $x = e$ reste à $C=C_0=0$. La solution analytique 1D est ici recherchée.

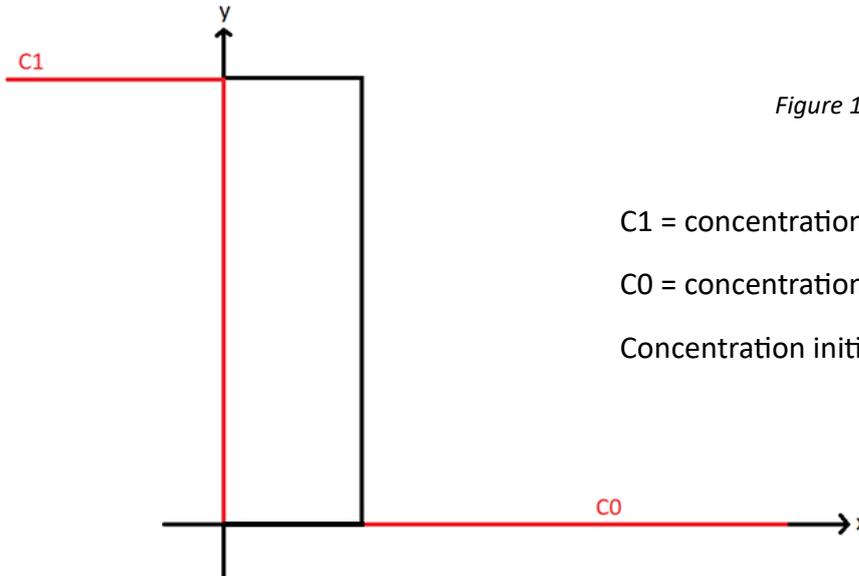


Figure 19 : Schématisation du Modèle 1

C_1 = concentration H₂ sur la surface de la plaque ($t > 0$)

C_0 = concentration en $x=e$ ($C_0 = 0$) ($t > 0$)

Concentration initiale dans la plaque nulle ($t=0$)

III-2-1-2 Equation de diffusion 1D

Il est possible de réécrire la seconde loi de Fick (6) en 1D comme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (11)$$

$$u(x, t) = C(x, t) - C_0$$

$$u_0(x) = 0, \text{ condition initiale.}$$

Avec : $u(0, t) = C_1 - C_0 = u_1$ et $u(e, t) = 0$ pour tout $t > 0$, conditions aux limites de type Dirichlet.

Et D le coefficient de diffusion (m^2/s).

III-2-1-3 Schéma explicite

III-2-1-3-1 Discrétisation du problème

Maillage du temps

Nous allons utiliser un maillage régulier du temps, en posant :

$$t_n = n\Delta t, \text{ pour } n = 0, \dots, N \quad \text{avec } t_{max} = N\Delta t \text{ ou aussi } \Delta t = \frac{t_{max}}{N}$$

Maillage de l'espace

En espace, nous utiliserons de même un maillage régulier du segment $[0, e]$. Le domaine sera discrétisé de la façon suivante :

$$[0, e] = \bigcup_{i=0}^{M-2} [x_m, x_{m+1}] \quad \text{avec } x_m = m\Delta x, \quad m = 0, \dots, M-1$$

$$\text{et } \Delta x = \frac{e}{M-1}$$

Au temps t_n , $u(x, t_n)$ sera approché par U^n , défini aux points de maillage x_m .

$U^n(x_m)$ sera noté U_m^n , pour $m = 0, \dots, M-1$.

III-2-1-3-2 Schéma de résolution

Le schéma de résolution utilisé pour ce cas est le schéma explicite d'Euler, avec un calcul par différences finies en temps et espace de la solution de l'équation :

$$\partial_t u - D \partial_{xx} u = 0$$

Avec les conditions limites et initiale données précédemment.

M et N sont des paramètres de discrétisation.

On cherche à approcher au temps t_n , la solution u en (x_m, t_n) par $U_m^n = U(x_m, t_n)$.

On discrétise chacun des opérateurs de dérivation en utilisant des développements de Taylor de la solution cherchée, soit :

$$\partial_t u(x_m, t_n) \approx \frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t}$$

$$\text{et } \partial_{xx} u(x_m, t_j) \approx \frac{U_{m+1}^j - 2U_m^j + U_{m-1}^j}{\Delta x^2}$$

On obtient le problème à résoudre :

$$\frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t} - D \frac{U_{m+1}^j - 2U_m^j + U_{m-1}^j}{\Delta x^2} = 0$$

Pour que le schéma soit explicite, il faut que $j=n$:

$$\frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t} - D \frac{U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$

pour $1 \leq m \leq M-2$ avec U_m^0 donné pour tout m par la condition initiale

U_0^n et U_{M-1}^n donnés par les conditions limites pour tout n

Attention, le schéma d'Euler explicite doit satisfaire la condition de stabilité suivante :

$$D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$$

III-2-2 Résolution numérique

Pour résoudre ce modèle 1 numériquement, il suffit de programmer la résolution d'Euler explicite en langage informatique. Ici, Python a été utilisé (cf. Annexe).

En rentrant les données trouvées dans la partie Recherche de données, pour la diffusion de l'hydrogène, on obtient les courbes suivantes à différents instants t :

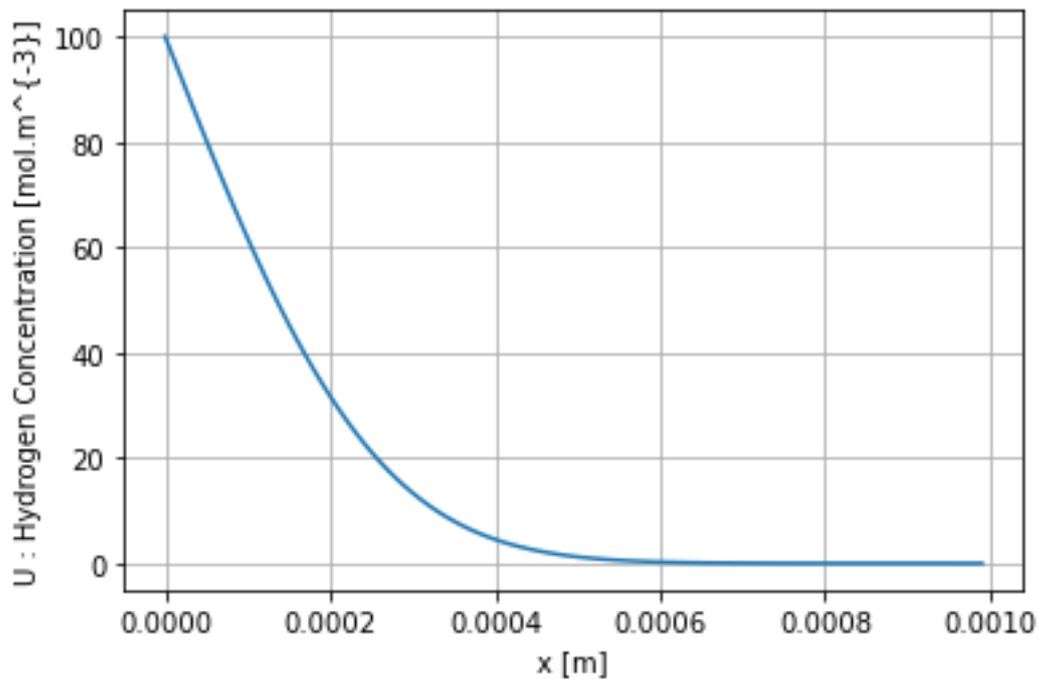


Figure 20 : courbe de concentration à $t = 1000$ secondes, X80.

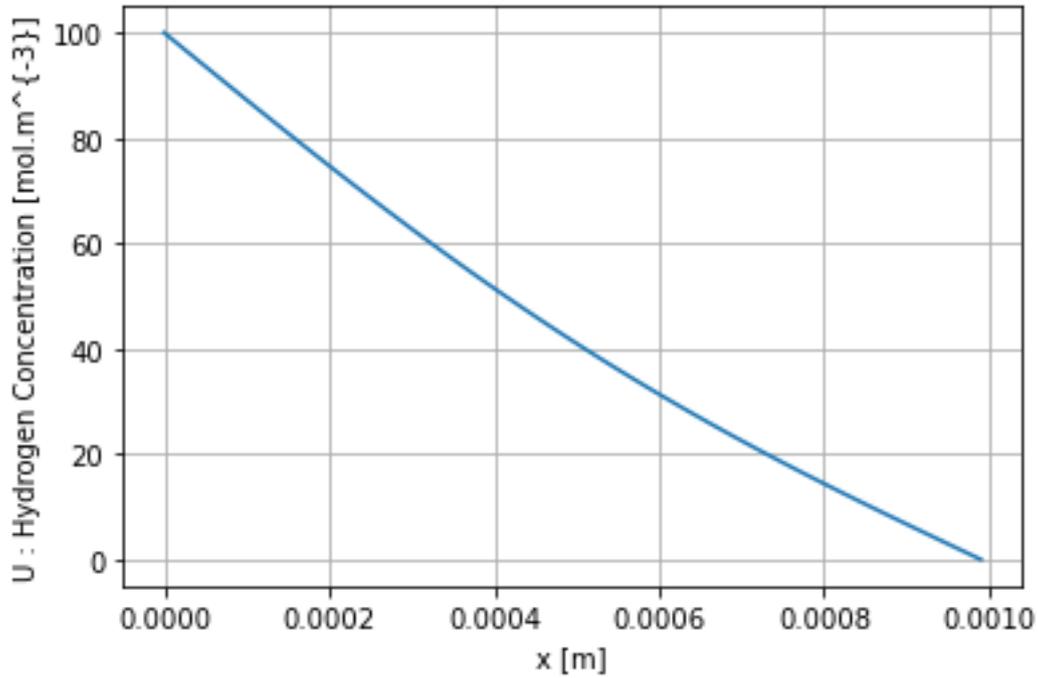


Figure 21 : courbe de concentration à $t = 10000$ secondes, X80

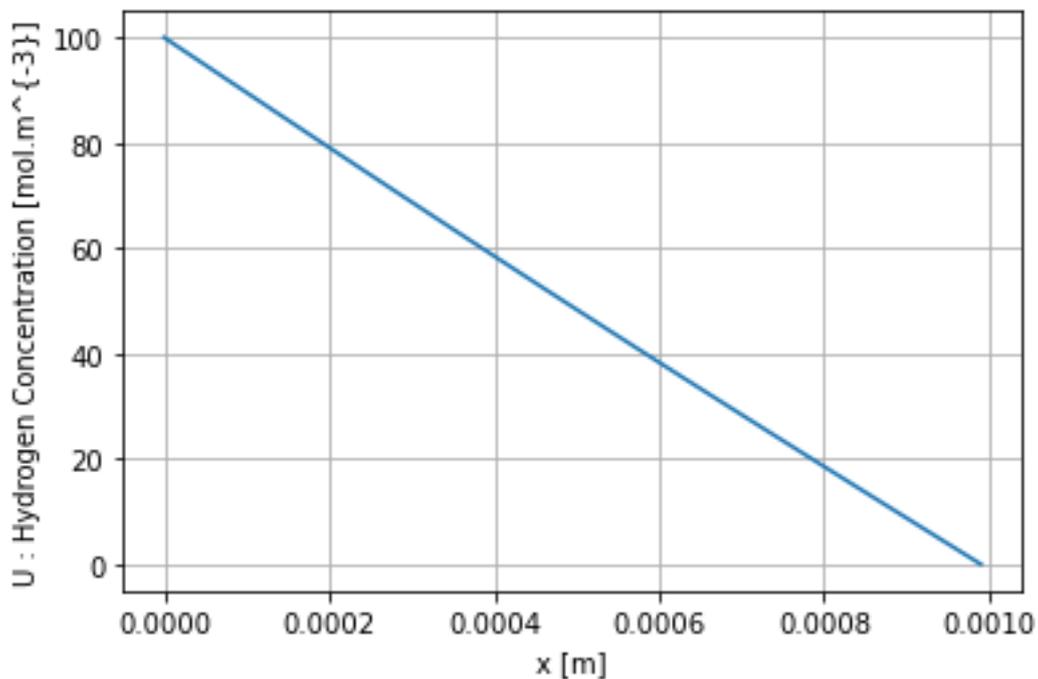


Figure 22 : courbe de concentration à $t = 20000$ secondes, X80.

En ayant fixé comme conditions limites une concentration non nulle sur la surface en $x=0$, et une concentration nulle en sortie en $x=e$, il est possible d'estimer l'allure de la courbe une fois la concentration d'hydrogène stable dans le matériau. La courbe sera une droite reliant le point d'entrée non nul (ici à 100 mol/m^3) en $x=0$, au point de sortie nul en $x=e$.

La première courbe (figure 21) nous donne l'évolution de la concentration d'hydrogène à $t=1000$ secondes. Il est possible d'observer la diffusion d'hydrogène jusqu'à 600 microns dans l'épaisseur de la plaque, où la valeur de la concentration est toujours nulle.

A $t=10000$ seconde (figure 22), la concentration d'hydrogène dans la plaque est proche d'être stable, la courbe étant proche d'une droite.

Enfin, à $t=20000$ secondes, la concentration d'hydrogène est stable au sein de la plaque, la courbe formant une droite en la condition limite d'entrée en $x=0$, et la condition limite de sortie en $x=e$.

Il est possible de constater que la concentration d'hydrogène s'est stabilisée entre 10000 et 20000 secondes dans un matériau homogène. Lors d'une réunion d'équipes (14/06/2023), après présentation du programme et des résultats, il a été confirmé que lors de tests menés par des collègues du CEA, la concentration se stabilise de cette manière pour t compris entre 10000 et 20000 secondes, voir 30000 secondes.

Les essais de perméations permettront de confirmer ou infirmer ces résultats.

(Note : la concentration C_1 , ici égale à 100 mol/m^3 , n'est pas forcément à la bonne valeur. Après les essais sur le matériau multicouche, un calcul de la concentration C_1 pour un cas plus précis a été effectué. Cela ne change en rien l'allure des courbes, seulement la condition limite en $x=0$).

III-3 Modèle 2

III-3-1 Résolution analytique

III-3-1-1 Modélisation du problème

Pour le Modèle 2, la condition initiale et les conditions limites sont conservées par rapport au Modèle 1. Ici, la plaque est considérée comme étant multicouche. Différentes zones représentent les différentes sous-structures créées lors du procédé SMAT. On considère ici trois zones : la couche nanostructurée (à démontrer), la couche de transition et le matériau de base.

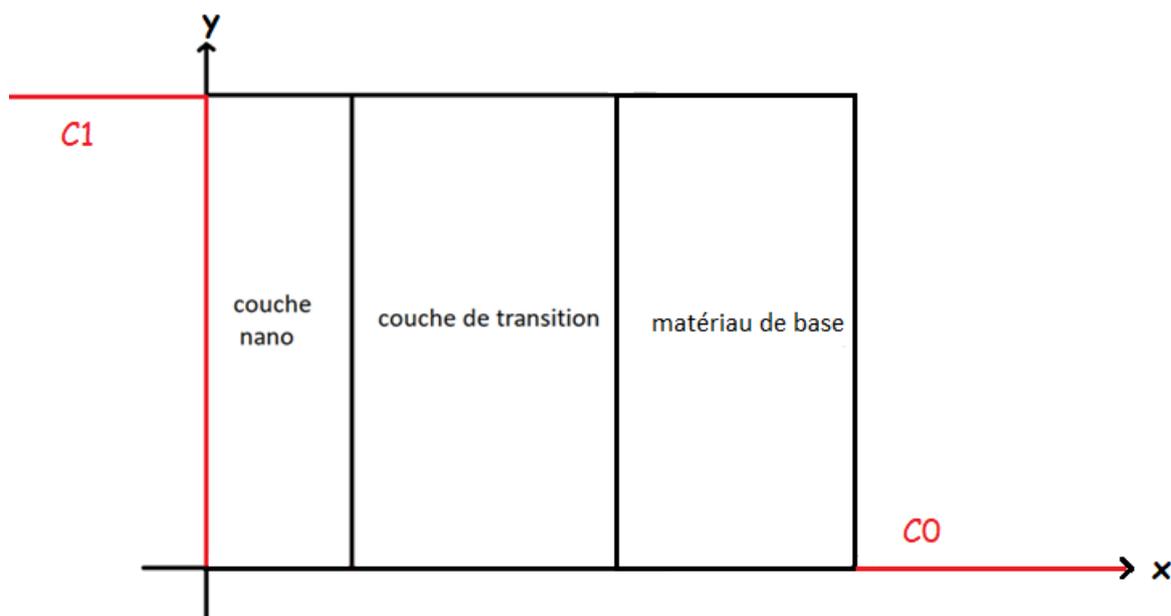


Figure 23: Schématisation du Modèle 2

L'équation de diffusion est la même que pour le Modèle 1, il s'agit de l'équation (11).

III-3-1-2 Schéma implicite de Crank-Nicolson

La dérivée seconde spatiale est discrétisée en écrivant la moyenne de la différence finie évaluée à l'instant n et de celle évaluée à l'instant $n+1$:

$$\frac{U_m^{n+1} - U_m^n}{\Delta t} = \frac{D}{2} \frac{(U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}) + (U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n)}{\Delta x^2}$$

Ce schéma est précis au second ordre. Contrairement au schéma explicite, il est stable sans condition. En revanche, les U_m^{n+1} à l'instant $n+1$ sont donnés de manière implicite. Il faut donc à chaque instant $n+1$ résoudre le système à P équations (P le nombre de points dans l'intervalle $[0,e]$ sur x) suivant :

$$-\frac{\alpha}{2} U_{m-1}^{n+1} + (1 + \alpha) U_m^{n+1} - \frac{\alpha}{2} U_{m+1}^{n+1} = \frac{\alpha}{2} U_{m-1}^n + (1 - \alpha) U_m^n - \frac{\alpha}{2} U_{m+1}^n$$

Ce système est tridiagonal. On peut l'écrire sous la forme :

$$A_{m,m-1} U_{m-1}^{n+1} + A_{m,m} U_m^{n+1} + A_{m,m+1} U_{m+1}^{n+1} = R_m$$

À chaque étape, on calcul la matrice colonne R et on résout le système $AU^{n+1} = R$. Pour $m=0$ et $m=P-1$, l'équation est obtenue par la condition limite.

On peut aussi écrire le membre de droite sous la forme :

$$R_m = B_{m,m-1} U_{m-1}^n + B_{m,m} U_m^n + B_{m,m+1} U_{m+1}^n + C_m$$

ce qui donne la forme matricielle

$$AU^{n+1} = BU^n + C \quad \text{avec : } \alpha(x, t) = D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$$

III-3-1-3 Discrétisation des conditions limites

La discrétisation de la condition de Dirichlet (en $x=0$) est immédiate :

$$U_0^n = U_0$$

On pose donc pour la première équation du système précédent :

$$A_{0,-1} = 0, \quad A_{0,0} = 1, \quad A_{0,1} = 0, \quad R_0 = U_0$$

De même pour une condition limite de Dirichlet en $x=1$ on pose

$$A_{p-1,p-2} = 0, \quad A_{p-1,p-1} = 1, \quad A_{p-1,p} = 0, \quad R_{p-1} = U_1$$

III-3-1-4 Milieux de coefficients de diffusion différents

On suppose que le coefficient de diffusion n'est plus uniforme mais constant par morceaux. Exemple : diffusion thermique entre deux plaques de matériaux différents. Soit une frontière entre deux parties situées entre les indices m et $m+1$, les coefficients de diffusion de part et d'autre étant D_1 et D_2 . Pour $m-1$ et $m+1$, on écrira le schéma de Crank-Nicolson ci-dessus. En revanche, sur le point à gauche de la frontière (indice m), on écrit une condition d'égalité des flux :

$$D_1 \frac{\partial U}{\partial x}(x^-) = D_2 \frac{\partial U}{\partial x}(x^+)$$

qui se traduit par

$$D_1(U_m^{n+1} - U_{m-1}^{n+1}) = D_2(U_{m+1}^{n+1} - U_m^{n+1})$$

et conduit aux coefficients suivants

$$A_{m,m-1} = -D_1, \quad A_{m,m} = D_1 + D_2, \quad A_{m,m+1} = -D_2, \quad R_m = 0$$

III-3-1-5 Résolution du système tridiagonal

La résolution du système tridiagonal étant longue, elle sera à retrouver en Annexe.

III-3-2 Résolution numérique

Le programme de résolution numérique provient de F.legrand : <https://www.f-legrand.fr/scidoc/docmml/numerique/diffusion/pydiffusion/pydiffusion.html>

Sebastien Rouquettes et moi-même avons travaillé sur ce programme, pour comprendre et modifier certains éléments. Sebastien m'a beaucoup aidé pour comprendre certaines méthodes employées par l'auteur.

En se basant sur les données de la partie Recherches de données, les résultats suivants sont obtenus :

Dans un premier temps, le matériau en bicouches (couche nano et matériau à cœur)

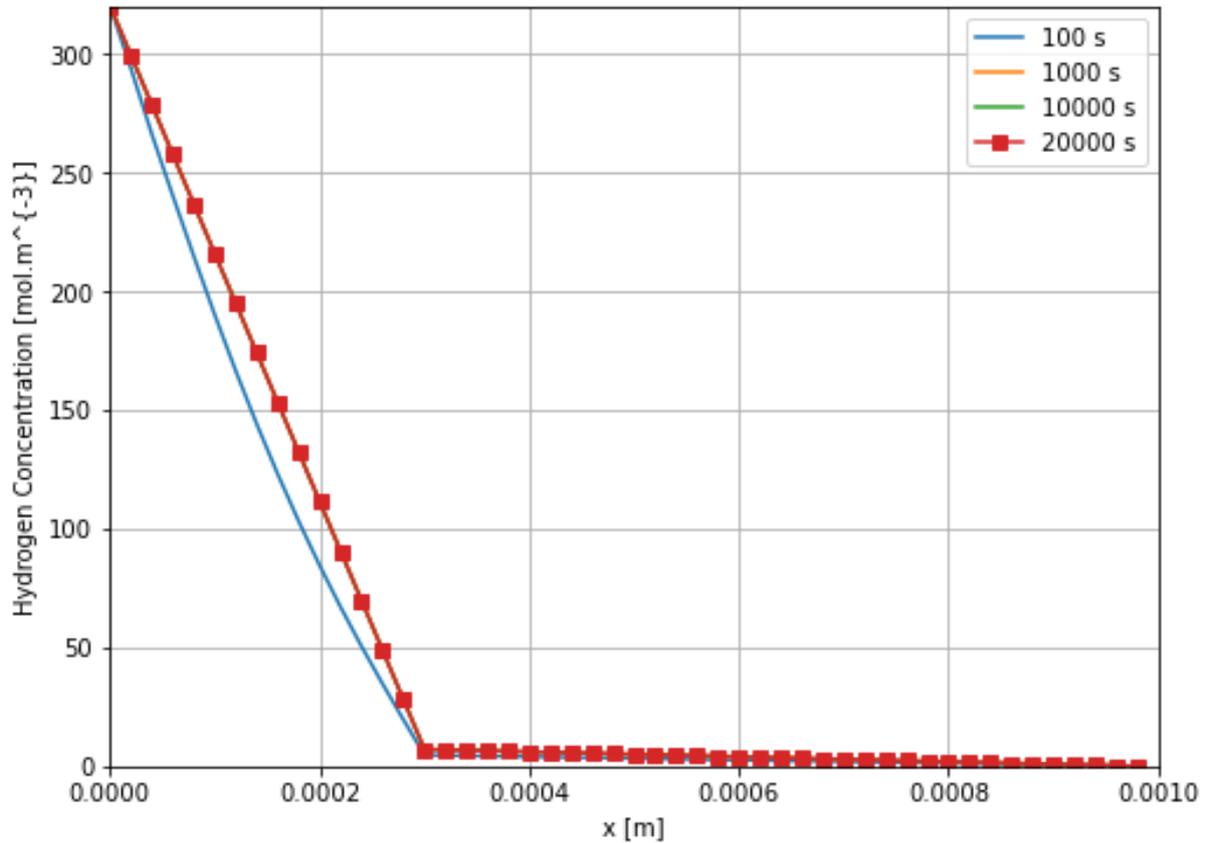


Figure 24 : courbe de concentration d'H2 pour différents temps, coefficient de diffusion couche nano à 2^E-10 mol/m³, épaisseur à 300 microns, X80 multicouche.

Les conditions limites sont les mêmes que pour le Modèle 1.

Ici, le coefficient de diffusion de la couche nano est fixé à 2^E-10 mol/m³. Celui du matériau de base est de 2^E-8 mol/m³. La concentration d'hydrogène en entrée est fixée à 320 mol/m³. Les données proviennent de la partie III-1 Recherches de données.

La couche nano commence en $x=0$, pour une épaisseur de 300 microns. Le matériau de base représente le reste en épaisseur.

On remarque d'abord une cassure nette pour chaque courbe. Elle intervient à la frontière des deux couches. On peut observer le comportement de la diffusion d'hydrogène dans chaque couche.

La couche nano semble remplir sa fonction, on peut y voir la concentration en hydrogène chuter sur son épaisseur.

Même si le coefficient de diffusion du matériau de base est plus élevé que celui de la couche nano, la diffusion a été suffisamment réduite en amont pour qu'elle soit très faible arrivée à la frontière. D'où une concentration très faible au sein de celle-ci.

Pour ce cas, il est aussi possible de constater que la concentration d'hydrogène se stabilise rapidement, la courbe jaune (1000s) peut déjà être assimilée à une droite, et cela dès la couche nano.

En modifiant le coefficient de diffusion de la couche nano, pour être plus proche de l'ordre de grandeur des données de [Xinfeng et al., 2016], on obtient les courbes suivantes :

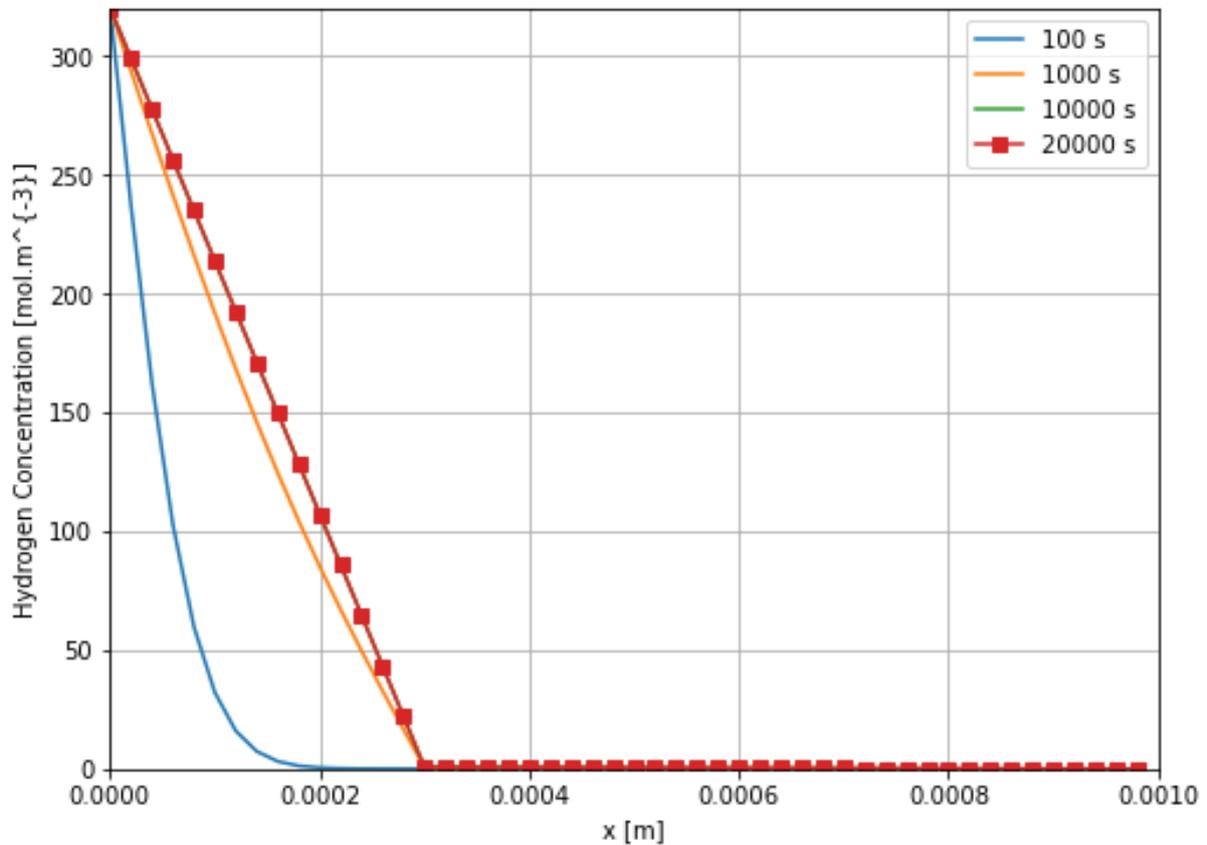


Figure 25 : courbe de concentration d'H₂ pour différents temps, coefficient de diffusion couche nano à 2^E-11 mol/m³, épaisseur à 300 microns, X80 multicouche.

Par rapport aux courbes précédentes, il est clairement possible de constater qu'il a fallu plus de temps à la concentration d'hydrogène pour devenir stable au sein du matériau, c'est à partir de la courbe verte (10000s).

Le choix du coefficient est important quant aux résultats finaux, ici le coefficient de diffusion était de 2^E-11 (le précédent était à 2^E-10). Un ordre de grandeur de 1 permet d'observer de nettes différences.

Maintenant, en changeant l'épaisseur de la couche nano du cas précédent, les résultats suivants sont obtenus :

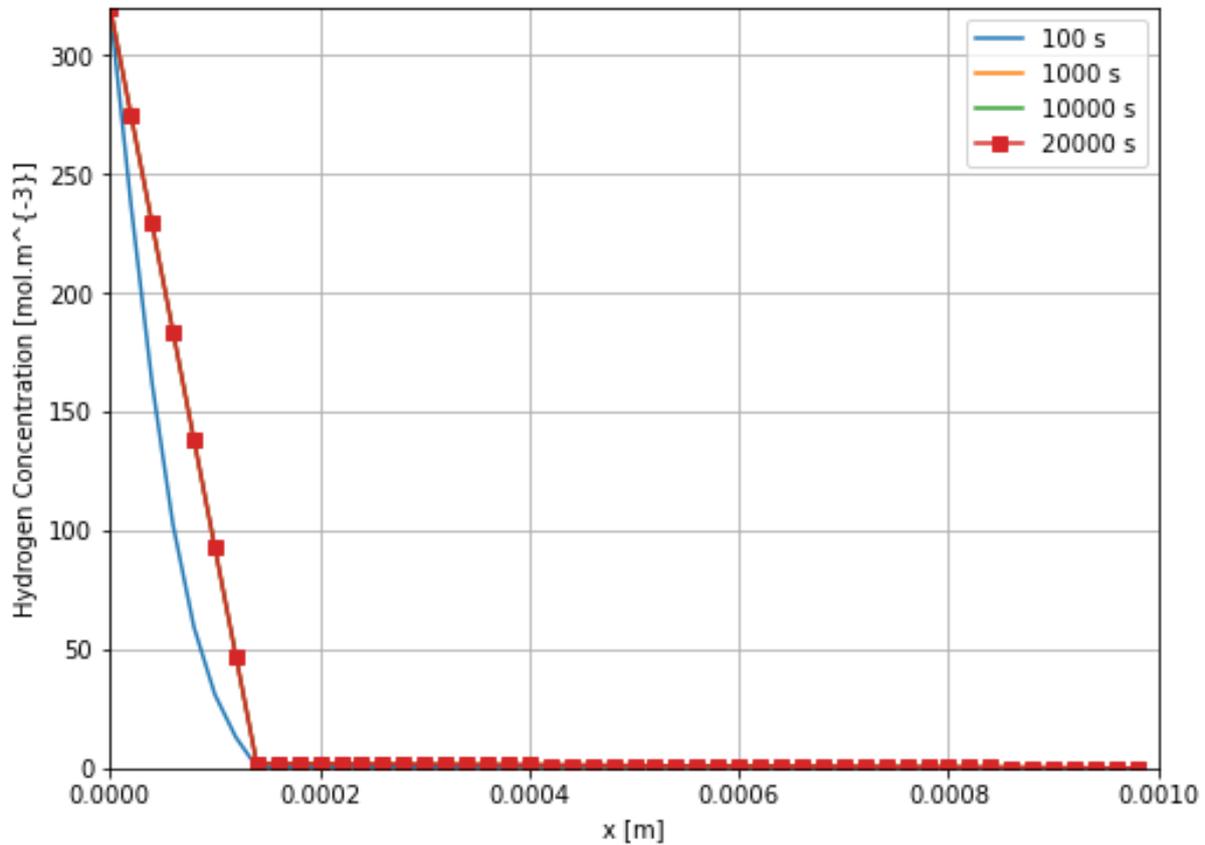


Figure 26 : courbe de concentration d'H2 pour différents temps, coefficient de diffusion couche nano à 2^{E-11} mol/m³, épaisseur à 150 microns, X80 multicouche.

Il est possible de voir, que contrairement au cas précédent, la concentration se stabilise plus rapidement. La courbe jaune (1000s) est toujours visible sur la figure 25, alors qu'ici, cette courbe est déjà assimilée à la droite reliant la condition limite d'entrée et la condition de transition entre couches. Il est possible ici, d'y voir l'impact de l'épaisseur de la couche nano sur la diffusion, qui semble plus rapide avec une couche nano plus fine ; mais aussi l'impact de la durée du traitement SMAT. Un traitement SMAT plus long permet de raffiner la microstructure plus en profondeur [Waltz, 2009][Daban, 2022].

Enfin, le dernier cas étudié jusqu'à maintenant (14/06/2023) avec trois couches :

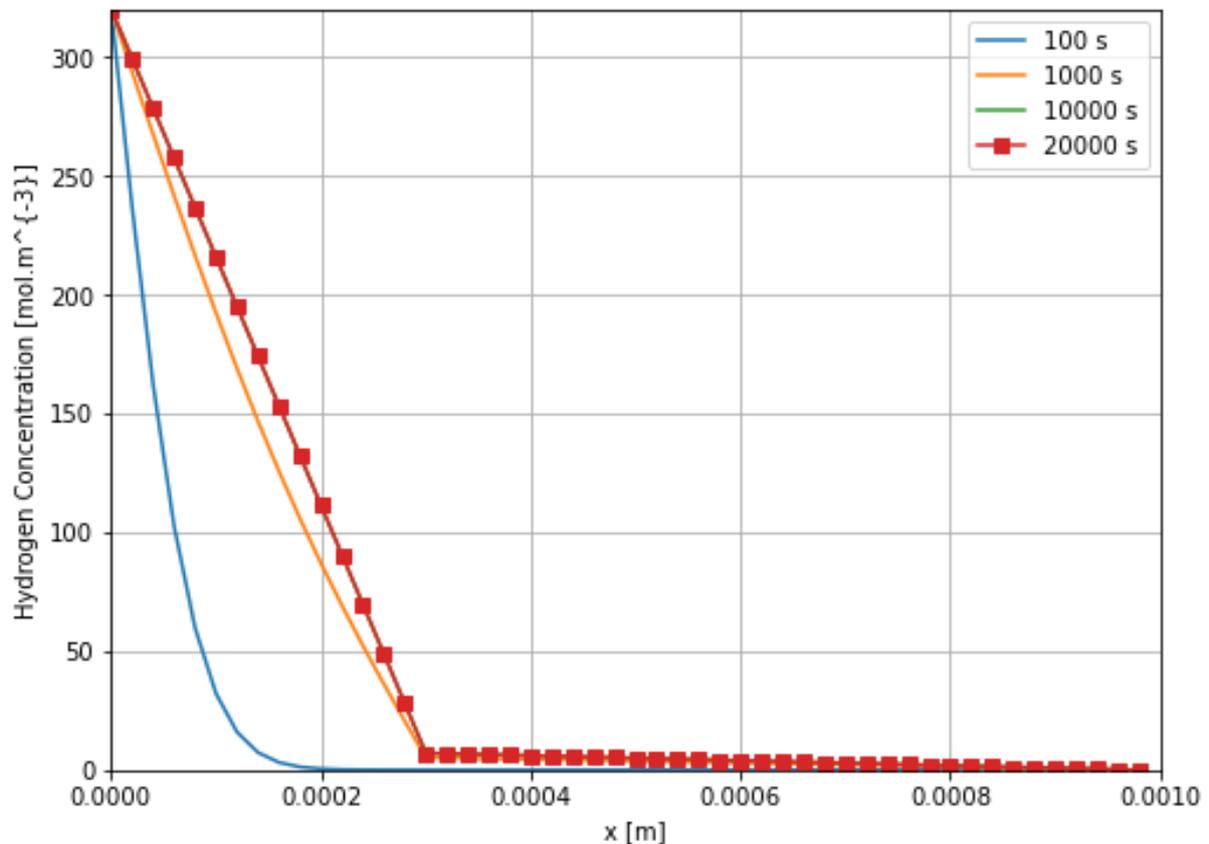


Figure 27 : courbe de concentration d'H₂ pour différents temps, coefficient de diffusion couche nano à 2^{-11} mol/m³, épaisseur à 300 microns, coefficient de diffusion couche transition à 2^{-10} mol/m³, épaisseur à 300 microns, X80 multicouche.

Le coefficient de diffusion de la couche nano est à 2^{-11} mol/m³, épaisseur à 300 microns ; le coefficient de diffusion de la couche de transition est à 2^{-10} mol/m³, épaisseur à 300 microns ; et le reste de l'épaisseur correspond au matériau de base, avec un coefficient de diffusion à 2^{-8} mol/m³.

Par rapport à la figure 25, la différence n'est pas immédiate. La concentration à la frontière entre la couche nano et la couche de transition semble plus élevée sur la figure 26, contrairement à la concentration entre la couche nano et le matériau de base sur la figure 25. L'ajout de cette couche de transition semble donc avoir un impact sur la diffusion.

Même s'il faudra vérifier et confirmer l'épaisseur de la couche de transition, on peut observer que la diffusion au sein de la couche nano est tellement réduite (grâce au procédé SMAT), que la diffusion dans les autres couches est directement impactée.

Il est aussi difficile de voir la cassure entre la couche de transition et le matériau de base (rn x=0.0006m).

Finalement, peut de différence avec le cas traité sur la figure 25, montrant que la couche nano semble avoir le plus gros impact sur la concentration et la diffusion d'hydrogène.



III-4 Discussion :

Les premiers retours semblent encourageants quant aux résultats obtenus.

Les résultats des tests, surtout avec le programme multicouche, nous montre une première tendance, qui suit les résultats trouvés lors des recherches bibliographiques.

Il reste nécessaire de continuer les recherches et de confirmer ou non la validité des programmes, surtout sur le multicouches. Aussi, la modélisation sur un logiciel tel que Code Aster serait très intéressante pour comparer les résultats obtenus via code Python.

La réalisation des essais expérimentaux permettrait là aussi de comparer les résultats des parties numériques et expérimentales.

IV Techniques expérimentales

IV-1 Réalisation des échantillons

IV-1-1 Découpes

Deux types d'échantillons seront à réaliser pour effectuer les différents tests.

Des échantillons cubiques de 15x15x12,5 mm, à envoyer à l'UTT (Université Technologique de Troyes).

Ces échantillons cubiques ont été prélevés sur un morceau de pipeline, pipeline d'un diamètre d'environ 1 m pour une épaisseur de 12,7 mm. Le tronçon est réalisé de la façon suivante :

Il est fait à partir d'une tôle, via le procédé UOE. La fabrication du tube consiste à former la tôle d'acier en U, puis à la presser en forme de O. La tôle est ensuite étirée sur sa circonférence afin d'obtenir une forme circulaire.



Figures 28, 29, 30, 31, 32 : Morceau de pipeline avec cordon de soudure.



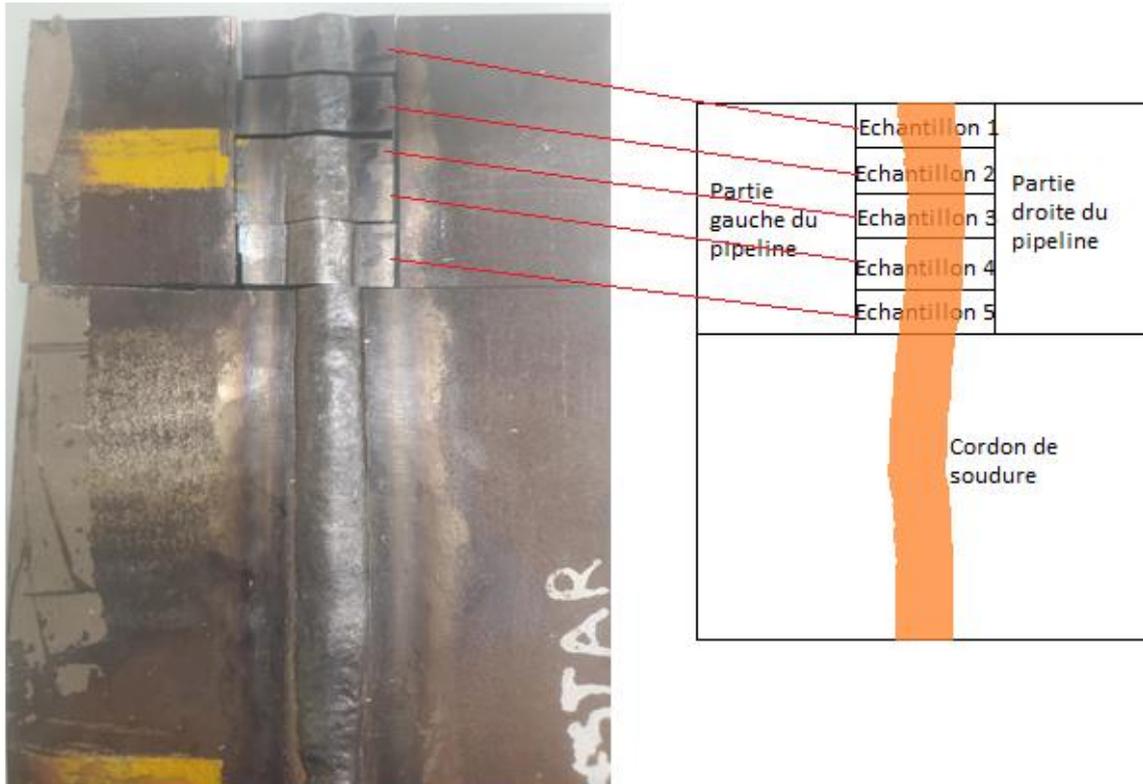


Figure 33: Echantillons prélevé dans le morceau de pipeline.

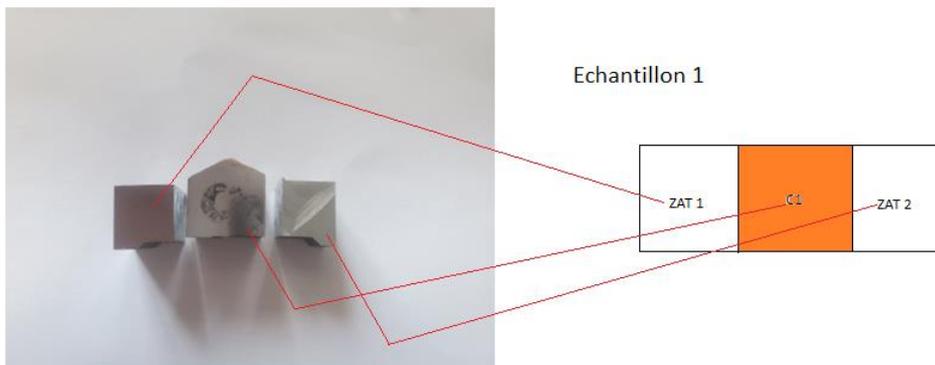


Figure 34 : Echantillon cubique (au centre).

Pour ces échantillons, deux disques d'un diamètre de 49 mm et d'une épaisseur de 5 mm (revue à 4,8 mm pour assurer l'usinage des disques dans l'épaisseur) seront usinés par le CEA Saclay.

L'objectif étant d'extraire de ces deux disques un maximum de disques d'une épaisseur d'environ 1 mm. C'est sur ces disques de 1 mm que seront effectués les différents traitements et tests de perméation au CEA Grenoble.

Certains disques seront seulement polis, et d'autres subiront après le polissage un traitement SMAT. Ce traitement SMAT sera effectué sur la face correspondant à la surface interne du pipeline (Plans en annexe).

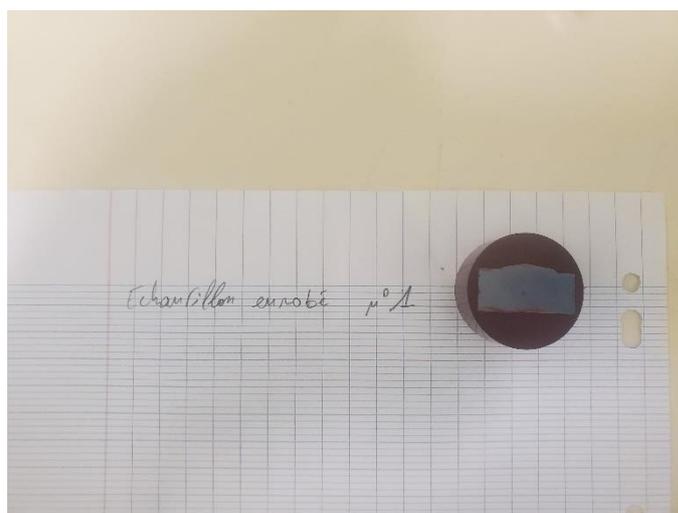
IV-1-2 Enrobage d'échantillons pour test de microdureté :

Sur les 5 échantillons cubiques découpés, un n'était tout simplement pas valable (échantillon 3). Il a donc servi à réaliser le premier échantillon enrobé.

Pour pouvoir conduire des tests de dureté, il faut d'abord préparer des échantillons.

D'abord, réaliser la découpe de ces échantillons. Dans notre cas, les échantillons seront faits de la même façon que l'échantillon 3 : La découpe inclut le cordon de soudure, ainsi qu'à chaque extrémité environ 0,5 mm de matière correspond à la ZAT (Zone Thermiquement Affectée). Les échantillons seront les plus fins possible, afin d'économiser la matière.

Ensuite vient l'enrobage de ces échantillons, réalisé à la halle matériau Polytech. L'échantillon est placé dans l'enrobeuse, avec ensuite rajout de résine d'enrobage. A la fin du procédé, un échantillon comme sur la figure a est obtenu :



Figures 35, 36, 37 : Résine d'enrobage, enrobeuse et échantillon enrobé

Seront ensuite réalisées des attaques au Nital de durées différentes, pour caractériser la microstructure des échantillons au microscope optique et microscope électronique à balayage. Il sera aussi possible de déterminer la distance de la ZAT au cordon de soudure.

Seulement deux échantillons ont été faits jusqu'à présent. L'incendie de la halle mécatronique a beaucoup ralenti la réalisation de ces échantillons. Il nous sera possible de refaire des découpes, et surtout de récupérer la matière stockée sur place, d'ici la fin de la semaine 25 (19-23 juin).

IV-1-3 Tests de dureté sur échantillons enrobés

La technique de nanoindentation sera utilisée pour réaliser les tests de dureté locale de nos échantillons. Des indents seront réalisés dans le sens longitudinal et transverse des échantillons (formant un quadrillage, figure é), à une profondeur d'indentation h imposée. Le choix de cette valeur doit permettre d'éviter des effets de surface liés au polissage, et aussi de limiter le volume de matière plastifié sous l'indent. En effet, la faible profondeur des indents permet la mesure d'une dureté très locale, permettant l'obtention de résultats au plus près de la surface traitée. Néanmoins, il est important de tenir compte de cette sphère plastique, générée au point d'indentation, pour éviter des valeurs de dureté erronées. Il est donc nécessaire de respecter une distance minimale correspondant au rayon r_c de la sphère plastique.

Pour connaître ce rayon r_c , il est important de connaître le type de pointe utilisée pour l'indentation, que ce soit une pointe Vickers, en forme de pyramide à quatre côtés, ou une pointe de Berkovich, en forme de pyramide à trois côtés.

Les essais de dureté, qui seront faits à l'IUT de Nîmes, utiliseront vraisemblablement une pointe de Berkovich (à vérifier). Pour déterminer le rayon de la sphère plastique r_c sous une pointe Berkovich, le modèle de "cavité en expansion", de Gao et al. [X.L. Gao, 1, 2006] [X.L. Gao, 2, 2006] [X.L. Gao et al., 2006] sera utilisé. La géométrie de la pointe Berkovich n'a aucune symétrie, ce qui ne facilite pas le calcul de l'aire projetée A et du rayon de la zone plastifiée r_c . Cependant, dans la plupart des modélisations éléments finis 2D de problèmes d'indentation avec une pointe Berkovich, cette dernière se retrouve modélisée sous la forme d'un cône équivalent de demi-angle au sommet $\Psi = 70,32^\circ$ [A. C. Fischer-Cripps, 2002] [J.L. Hay et al., 2000]. Cet angle permet de conserver la même loi de surface de contact projetée/profondeur de pénétration dans le cas d'une pointe conique qu'avec une pointe de Berkovich.

On obtient le système d'équation suivant :

Rayon de la zone de contact :

$$A = \pi \cdot h_t^2 \cdot \tan^2(\psi) \quad (mm^2)$$

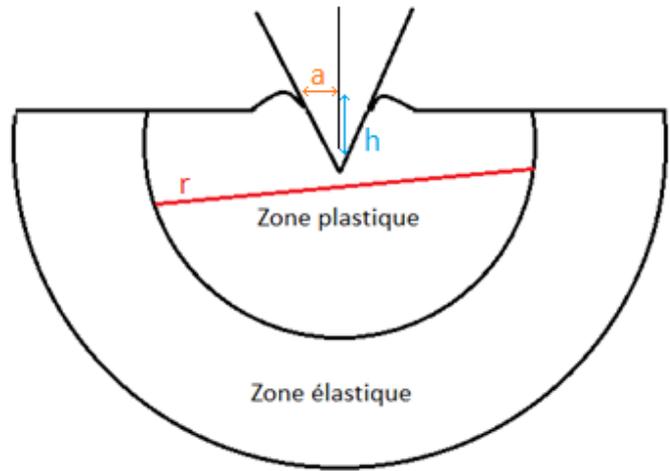
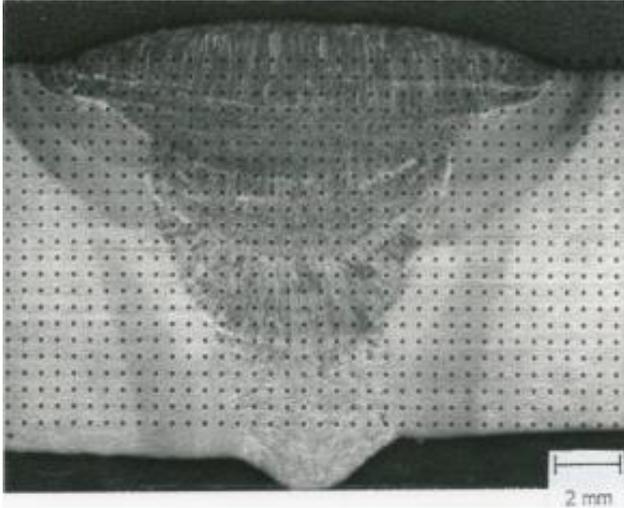
Aire projetée équivalente :

$$A = \pi \cdot h_t^2 \cdot \tan^2(\psi) \quad (mm^2)$$

Rayon de la sphère plastique :

$$r_c = a \cdot \left(\frac{E}{3\sigma_y} \cdot \cot(\psi) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (mm)$$

Avec : ψ le demi-angle équivalent ($70,32^\circ$), σ_y la limite d'élasticité (MPa), E le module d'Young (MPa), et h_c la profondeur d'indentation (nm)



Figures 38, 39: Indentation sur cordon de soudure [Moro et al.], et schématisation de la sphère plastique.

A partir de ces données, il nous sera donc possible d'effectuer les tests de dureté.

Ceux-ci nous serviront à caractériser l'impact thermique du procédé de soudage sur la dureté de la microstructure, dans la zone fondue et les zones thermiquement affectées.

IV-2 Discussion sur la suite des tests expérimentaux :

A cause de l'incendie de la halle mécatronique, les tests sont pour le moment à l'arrêt depuis la fin du mois de mai. Quand les opérations pourront reprendre, il sera alors possible de faire les échantillons à enrober pour effectuer la caractérisation de la microstructure et les tests de dureté.

Ces tests permettront d'obtenir des données supplémentaires, et de confronter les valeurs obtenues à celle trouvées lors des recherches bibliographiques.

En parallèle, les disques servant aux tests de perméation seront réalisés, permettant de progresser aussi sur ces expériences. Ils apporteront des résultats très utiles, notamment pour valider les programmes de la partie simulation.

Aussi, les échantillons cubiques envoyés au LASMIS permettront de d'obtenir des données sur l'impact du procédé SMAT sur le cordon de soudure.

Pour l'instant, difficile de comparer les résultats des différents articles dans la littérature, avec les nôtres.

Même si toutes les expériences ne seront pas réalisées avant la fin de mon stage, l'objectif est de reprendre la création d'échantillon le plus vite possible.

V Conclusion et perspectives

Ce rapport présente les résultats obtenus durant ce stage. L'objectif était de définir et comprendre l'impact d'un traitement SMAT sur le cordon de soudure d'un acier X80, et de déterminer l'intérêt de ce traitement quant à son utilisation définie en introduction.

Malheureusement, les quelques problèmes avec la halle mécatronique, n'ont pas permis de fournir des résultats expérimentaux.

Pendant, il est possible de commenter la partie simulation.

Les programmes, notamment celui traitant du cas multicouche, nous ont permis d'obtenir des résultats à quantifier.

Il est nécessaire de poursuivre la recherche bibliographique concernant la diffusion de l'hydrogène, les recherches sur les différentes couches provoquées par le traitement, notamment leurs caractéristiques (coefficient de diffusion, taille des couches, ...), pour consolider nos connaissances et améliorer les résultats du programme.

En se projetant sur la suite du stage, il reste encore un mois pour continuer le travail sur la partie simulation, mais aussi pour la réalisation des différents essais. La halle mécatronique devrait redevenir opérationnelle vers la fin du mois.

Il sera donc intéressant de compléter ce rapport, en ajoutant des résultats supplémentaires, commentant certains de ces résultats, et aussi de revenir sur certains résultats erronés déjà obtenus, en sachant d'où vient l'erreur.

Les essais sont donc toujours en cours pour répondre à la problématique du stage.

Annexe

Définitions

[1.] En science des matériaux, le concept d'atmosphère de Cottrell a été introduit par A. H. Cottrell et B. A. Bilby en 1949 pour expliquer comment les dislocations sont bloquées dans certains métaux par des sites interstitiels

Bibliographie

B

[Beachem, 1972] Beachem, C.D., 1972. *A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen "embrittlement")*. Metall. Mater. Trans. B 3 (2), 441–455.

[Ben Afia, 2016] S.Ben Afia, Influence d'un traitement mécanique de nanocristallisation superficielle (SMAT) sur l'oxydation à hautes températures de l'acier 316L, Thèse de doctorat, Université de Technologie de Troyes, 2016.

C

[Chateau et al., 2002 (1)] Chateau JP, Delafosse D, Magnin T, *Numerical simulations of hydrogen–dislocation interactions in fcc stainless steels.: part I: hydrogen–dislocation interactions in bulk crystals*, Acta Mater 2002;50:1507.

[Chateau et al., 2002 (2)] Chateau JP, Delafosse D, Magnin T, *Numerical simulations of hydrogen–dislocation interactions in fcc stainless steels.: part II: hydrogen effects on crack tip plasticity at a stress corrosion crack*, Acta Mater 2002;50:1523.

[Cialone 1988] Cialone H.J., Holbrook J.H. *Sensitivity of steels to degradation in gaseous hydrogen*. Hydrogen embrittlement: prevention and control ASTM STP 962 ; L.Raymond Ed. (1988): 134-152.

D

[Daban, 2022] R.Daban, *Etude et optimisation d'un acier de canalisation pour le transport du dihydrogène gazeux*, Stage CEA Saclay, 2022.

E

[K. Ebihara et al., 2021] K. Ebihara, Y. Sugiyama, R. Matsumoto, K. Takai, T. Suzudo, *Numerical Interpretation of Hydrogen Thermal Desorption Spectra for Iron with Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies*, Metall. Mater. Trans. A 52 (2021) 257.

F

[A. C. Fischer-Cripps, 2002] A. C. Fischer-Cripps, *Nanoindentation, Mechanical Engineering Series*, Springer, New York, 2002, ISBN 0 387 95394 9.

G



[X.L. Gao, 1, 2006] X.L. Gao, *New expanding cavity model for indentation hardness including strain-hardening and indentation size effects*, J. Mater. Res. (2006), 21 5 1317-1326.

[X.L. Gao et al., 2006] X.L. Gao, X.N. Jing, G. Subhash, *Two new expanding cavity models for indentation deformations of elastic strain-hardening materials*, Inter. J. Sol. and Stru. (2006), 43 2193-2208.

[X.L. Gao, 2, 2006] X.L. Gao, *An expanding cavity model incorporating strain-hardening and indentation size effects*, Inter. J. Sol. and Stru. (2006), 43 6615-6629.

H

[Hahn et al.] H. Hahn, P. Mondal, K.A. Padmanabhan, *Plastic deformation of nanocrystalline materials*, Nanostruct. Mater. (1997) 9 603-606.

[Hanyu Li et al., 2022] Hanyu Li, Ranming Niu, Wei Li, Hongzhou Lu, Julie Cairney, Yi-Sheng Chen, *Hydrogen in pipeline steels: Recent advances in characterization and embrittlement*, Journal of Natural Gas Science and Engineering, Volume 105, September 2022, 104709.

[Hardie 2006] Hardie D., Charles E.A., Lopez A.H. *Hydrogen embrittlement of high strength pipeline steels*. Corrosion Science 48 (2006): 4378-4385.

[J.L. Hay et al., 2000] J.L. Hay, G.M. Pharr, *Instrumented Indentation Testing*, ASM Handbook (2000) vol. 8 232-243.

L

[Xinfeng Li et al., 2016] Xinfeng Li, Jin Zhang, Yanfei Wang, Mingming Ma, Sicong Shen, Xiaolong Song, *The dual role of shot peening in hydrogen-assisted cracking of PSB1080 high strength steel*, Materials & Design, Volume 110, 15 November 2016, Pages 602-615

[Lu et al., 2001] Lu, G., Zhang, Q., Kioussis, N., Kaxiras, E., 2001. *Hydrogen-enhanced local plasticity in aluminum: an ab initio study*. Phys. Rev. Lett. 87 (9), 095501.

[K. Lu, J. Lu, 2002] K. Lu, J. Lu, *Surface nanocrystallization (SNC) of materials and its Effects on Mechanical Behavior*, Encyclopedia of Comprehensive Structural Integrity (CSI) (2002), vol.8 p. 1-35.].

[Luu, 2006] Luu T. T. *Déchirure ductile des aciers à haute résistance pour gazoducs (X100)*. Thèse de l'Ecole des Mines de Paris pour l'obtention du grade de docteur en Sciences des Métiers de l'Ingénieur, 2006.

[Lynch, 1988] Lynch, S., 1988, *Environmentally assisted cracking: overview of evidence for an adsorption-induced localised-slip process*, Acta Metall. 36 (10), 2639–2661.

[Lynch, 2011] Lynch, S., 2011. *Interpreting hydrogen-induced fracture surfaces in terms of deformation processes: a new approach*. Scripta Mater. 65 (10), 851–854.

M

[Matsui et al., 1979] Matsui H, Kimura H, Moriya S, *The effect of hydrogen on the mechanical properties of high purity iron I. Softening and hardening of high purity iron by hydrogen charging during tensile deformation*, Mater Sci Eng 1979;40:207.

[Moro, 2009] I.Moro, *Fragilisation par l'hydrogène gazeux d'un acier ferrito-perlitique de grade API X80*, Thèse de doctorat, Université Toulouse III, 2009.

[Moro et al.] I. Moro, L. Briottet, P. Lemoine, O. Doyen, *Fatigue crack growth in high pressure hydrogen of API X80 steel and associated weld*, Non publié.

N

[M. Nagumo, 2004] M. Nagumo, *Mater. Sci. Tech.* 20 (2004) 940.

[M. Nagumo et al., 2019] M. Nagumo, K. Takai, *The predominant role of strain-induced vacancies in hydrogen embrittlement of steels: Overview*, *Acta Mater.* 165 (2019) 722.

O

[Oriani, 1972] Oriani, R., 1972. *A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels*. *Ber. Bunsen Ges. Phys. Chem.* 76 (8), 848–857.

S

[K. Sakaki et al., 2006] K. Sakaki, T. Kawase, M. Hirato, M. Mizuno, H. Araki, Y. Shirai, M. Nagumo, *The effect of hydrogen on vacancy generation in iron by plastic deformation*, *Scr. Mater.* 55 (2006) 1031.

[Samih, 2014] Youssef Samih. *Traitements mécaniques et thermomécaniques de surfaces d'aciers austénitiques et effet induit sur la nitruration lors des traitements Duplex*. Other. Université de Lorraine, 2014; Arifvianto et al., 2011; Roland et al., 2007.

[Sommerday et al., 2008] Sommerday B, Sofronis P, Jones R, *Effects of hydrogen on materials*, In: Proc 2008 international hydrogen conference. Materials Park, OH: ASM, International; 2008. p. 779.

[J. Song, W.A. Curtin;2014] J. Song, W.A. Curtin, *Mechanisms of hydrogen-enhanced localized plasticity: An atomistic study using α -Fe as a model system*, *Acta Materialia*, Volume 68, 15 April 2014, Pages 61-69.

[Y. Sugiyama et al.,1, 2021] Y. Sugiyama, K. Takai, *Quantities and distribution of strain-induced vacancies and dislocations enhanced by hydrogen in iron*, *Acta Mater.* 208 (2021) 116663.

[Y. Sugiyama et al.,2, 2021] Yuri Sugiyama, Nami Kurihara, Yuya Matsumoto, Kenichi Takai, *The effects of interstitial hydrogen and carbon atoms and aging temperature on annihilation behavior of hydrogen-enhanced strain-induced vacancies in iron*, *Scripta Materialia*, Volume 202, September 2021, 114031.

T

[K. Takai et al., 2008] K. Takai, H. Shoda, H. Suzuki, M. Nagumo, *Lattice defects dominating hydrogen-related failure of metals*, *Acta Mater.* 56 (2008) 5158.

[Taketomi et al., 2010] Taketomi, S., Matsumoto, R., Miyazaki, N., 2010. *Atomistic study of the effect of hydrogen on dislocation emission from a mode II crack tip in alpha iron*. *Int. J. Mech. Sci.* 52 (2), 334–338.

[Trasatti 2005] Trasatti S.P., Sivieri E., Mazza F. *Susceptibility of a X80 to hydrogen embrittlement*. *Materials and Corrosion* 56 n°2 (2005): 111-117.

[Troiano, 1960] Troiano, A.R., 1960. *The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals*. *trans. ASM* 52, 54–80.

V

[Vlasov, Zaznoba, 1999] Vlasov NM, Zaznoba VA. Phys Solid State+ 1999;41:404

W

[Waltz, 2009] L. Waltz. *Comportement mécanique de structures multicouches obtenues par co-laminage de tôles nanostructurées : essais et simulation*. Thèse de doctorat. Université de Technologie de Troyes, 2009.

[Wang et al., 2020] Yanfei Wang, Honglin Xie, Zhiling Zhou, Xinfeng Li, Weijie Wu, Jianming Gong, *Effect of shot peening coverage on hydrogen embrittlement of a ferrite-pearlite steel*, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 45, Issue 11, 28 February 2020, Pages 7169-7184.

Y

[Yagodzinsky et al., 2005] Yagodzinsky Y, Hänninen H, *Hydrogen–dislocation interactions and their role in help mechanism of hydrogen embrittlement*, In: 11th International conference on fracture, Turin; 2005.

[Yinghao Sun, Y. Frank Cheng ; 2021] Yinghao Sun, Y. Frank Cheng, *Hydrogen permeation and distribution at a highstrength X80 steel weld under stressing conditions and the implication on pipeline failure*, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 46, Issue 44, 28 June 2021, Pages 23100-23112.

Z

[Zhiwei G. et al., 2021] Zhiwei Gao, Baoming Gong, Bingying Wang, Dongpo Wang, Caiyan Deng, Yang Yu, *Effect of fatigue damage on the hydrogen embrittlement sensitivity of X80 steel welded joints*, International Journal of Hydrogen Energy, Volume 46, Issue 77, 8 November 2021, Pages 38535-38550.

Système tridiagonal

Les matrices A et B étant tridiagonales, une implémentation efficace doit stocker seulement les trois diagonales, dans trois tableaux différents. On écrit donc le schéma de Crank-Nicolson sous la forme :

$$-a_m U_{m-1}^{n+1} + b_m U_m^{n+1} + c_m U_{m+1}^{n+1} = d_m U_{m-1}^n + e_m U_m^n + f_m U_{m+1}^n$$

Les coefficients du schéma sont ainsi stockés dans des tableaux à P éléments a, b, c, d, e, f . On remarque toutefois que les éléments a_0, c_{N-1}, d_0 et f_{N-1} ne sont pas utilisés.

Le système tridiagonal à résoudre à chaque pas de temps est :

$$-a_m U_{m-1} + b_m U_m + c_m U_{m+1} = R_m$$

où l'indice du temps a été omis pour alléger la notation. On calcule le second membre du système de la manière suivante :

$$R_0 = e_0 U_0 + f_0 U_1$$

$$R_m = d_m U_{m-1} + e_m U_m + f_m U_{m+1} \text{ pour } 1 \leq m \leq P - 2$$

$$R_{P-1} = d_{P-1} U_{P-2} + e_P U_{P-1}$$

Le système tridiagonal s'écrit :

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & & & \dots & & & & \\ a_1 & b_1 & c_1 & & & & & & \\ & a_2 & b_2 & c_2 & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & a_{P-1} & b_{P-1} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{P-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_0 \\ R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ R_{P-1} \end{pmatrix} \quad (1)$$

La méthode d'élimination de Gauss-Jordan permet de résoudre ce système de la manière suivante.

Les deux premières équations sont :

$$b_0 U_0 + c_0 U_1 = R_0$$

$$a_1 U_0 + b_1 U_1 + c_1 U_2 = R_1$$

b_0 est égal à 1 ou -1 suivant le type de condition limite. On divise la première équation par ce coefficient, ce qui conduit à poser :

$$\beta_0 = b_0$$

$$\gamma_0 = \frac{c_0}{\beta_0}$$

$$x_0 = \frac{R_0}{\beta_0}$$

La première élimination consiste à retrancher l'équation obtenue multipliée par a_1 à la seconde :

$$(b_1 - a_1)U_1 + c_1 U_2 = R_1 - a_1 x_0$$

On pose alors :

$$\beta_1 = b_1 - a_1 \gamma_0$$

$$\gamma_1 = \frac{c_1}{\beta_1}$$

$$x_1 = \frac{R_1 - a_1 x_0}{\beta_1}$$

On construit par récurrence la suite suivante :

$$\beta_k = b_k - a_k \gamma_{k-1} \quad (2)$$

$$\gamma_k = \frac{c_k}{\beta_k} \quad (3)$$

$$x_k = \frac{R_k - a_k x_{k-1}}{\beta_k} \quad (4)$$

Considérons la k ème équation réduite et la suivante :

$$U_k + \gamma_k U_{k+1} = x_k$$

$$a_{k+1} U_k + b_{k+1} U_{k+1} + c_{k+1} U_{k+2} = R_{k+1}$$

La réduction de cette dernière équation est :

$$(b_{k+1} - a_{k+1} \gamma_k) U_{k+1} + c_{k+1} U_{k+2} = R_{k+1} - a_{k+1} x_k$$

ce qui justifie la relation de récurrence définie plus haut.

Pour finir, voyons les deux dernières équations :

$$U_{p-2} + \gamma_{p-2} U_{p-1} = x_{p-2}$$

$$a_{p-1} U_{p-2} + b_{p-1} U_{p-1} = R_{p-1}$$

La dernière équation réduite donne :

$$(b_{p-1} - a_{p-1} \gamma_{p-2}) U_{p-1} = R_{p-1} - a_{p-1} x_{p-2}$$

c'est-à-dire :

$$U_{p-1} = x_{p-1}$$

Il reste à calculer les U_k en partant du dernier par la relation :

$$U_k = x_k - \gamma_k U_{k+1} \quad (5)$$

Les coefficients des diagonales sont stockés dans trois tableaux (à P éléments) a, b et c dès que les conditions limites et les pas sont fixés. Les tableaux β et γ (relations 2 et 3) sont calculés par récurrence avant le départ de la boucle d'itération. À chaque pas de l'itération (à chaque instant), on calcule par récurrence la suite x_k (relation 4) pour k variant de 0 à $N-1$, et enfin la suite U_k (relation 5) pour k variant de $N-1$ à 0.

Programmes Python

Modèle 1

```
7
8 import numpy as np
9 from matplotlib.pyplot import *
10
11 #Données numériques
12 e=0.001 #Epaisseur de la plaque en m
13
14 nx=100 #Nombre de tronçons
15 x=np.arange(nx)*e/nx
16 dx=e/nx #Longueur tronçons
17 dx2=dx**2
18 U=np.zeros(nx)
19 laplacien=np.zeros(nx)
20 dt = 0.001 #pas de temps
21 U[0]= 100 #CL x=0 en mol/m3
22 U[nx-1]=0 #CL x=1 en mol/m3
23 D=2e-8 #Coefficient de diffusion en m2/s
24
25
26 for i in range(20000):
27     for k in range(1,nx-1):
28         laplacien[k] = (U[k+1]-2*U[k]+U[k-1])/dx2
29     for k in range(1,nx-1):
30         U[k] += dt*D*laplacien[k]
31
32 figure()
33 plot(x,U)
34 xlabel("x [m]")
35 ylabel("U : Hydrogen Concentration [mol.m^{-3}]")
36 grid()
```

Modèle 2

-Diffusion1D.py

```
1 import numpy
2
3 https://www.f-legrand.fr/scidoc/docmml/numerique/diffusion/pydiffusion/pydiffusion.html
4 ## Les fonctions sont incluses dans une classe.
5 ## Le constructeur __init__ crée les différents tableaux.
6 ## Son unique argument est le nombre N de points sur le domaine [0,1].
7 ## La fonction config définit le schéma numérique avec les conditions limites.
8 ## Les tableaux a,b,c,d,e,f et s sont remplis dans cette fonction.
9
10 class Diffusion1D:
11     def __init__(self,N):
12         self.N = N
13         self.a = numpy.zeros(N)
14         self.b = numpy.zeros(N)
15         self.c = numpy.zeros(N)
16         self.d = numpy.zeros(N)
17         self.e = numpy.zeros(N)
18         self.f = numpy.zeros(N)
19         self.s = numpy.zeros(N)
20         self.alpha = numpy.zeros(N)
21         self.beta = numpy.zeros(N)
22         self.gamma = numpy.zeros(N)
23         self.x = numpy.zeros(N)
24
```

```
24
25  ## Les arguments de la fonction config sont :
26  ##  dt : pas de temps
27  ##  coef : frontières et coefficients de diffusion sous la forme [[x1,D1],[x2,D2],...[1,Dk]]
28  ##  type0 : type de la condition limite en x=0, "neumann" ou "dirichlet"
29  ##  lim0 : valeur de la condition limite en x=0
30  ##  type1 : type de la condition limite en x=1
31  ##  lim1 : valeur de la condition limite en x=1
32  ##  S : source, tableau numpy à N éléments
33
```

```
34
35  def config(self,dt,coef,type0,lim0,type1,lim1,S):
36      N = self.N
37      dx = 1.0/(N-1)
38      self.dt = dt
39      v = dt/(dx*dx)
40      i1 = 0
41      for k in range(len(coef)): # coefficients de diffusion
42          x = coef[k][0]
43          diff = coef[k][1]
44          i2 = int(x*N)
45          for i in range(i1,i2):
46              self.alpha[i] = diff*v
47          i1 = i2
48      for i in range(1,N-1): # Cranck-Nicolson
49          self.a[i] = -self.alpha[i]/2
50          self.b[i] = (1+self.alpha[i])
51          self.c[i] = self.a[i]
52          self.d[i] = self.alpha[i]/2
53          self.e[i] = 1-self.alpha[i]
54          self.f[i] = self.alpha[i]/2
55          self.s[i] = dt*S[i]
56      if len(coef)>1: # frontieres entre deux milieux differents
57          for k in range(len(coef)-1):
58              i = int(coef[k][0]*N)
59              self.a[i] = -coef[k][1]
60              self.b[i] = coef[k][1]+coef[k+1][1]
61              self.c[i] = -coef[k+1][1]
62              self.d[i] = 0
63              self.e[i] = 0
64              self.f[i] = 0
65              self.s[i] = 0
66      if type0=="dirichlet": # type de conditions limites utilisées : dirichlet ou neumann
67          self.b[0] = 1.0
68          self.c[0] = 0.0
69          self.e[0] = 0
70          self.f[0] = 0
71          self.s[0] = lim0
72      if type1=="dirichlet":
73          self.a[N-1] = 0
74          self.b[N-1] = 1.0
75          self.d[N-1] = 0
76          self.e[N-1] = 0
77          self.s[N-1] = lim1
```

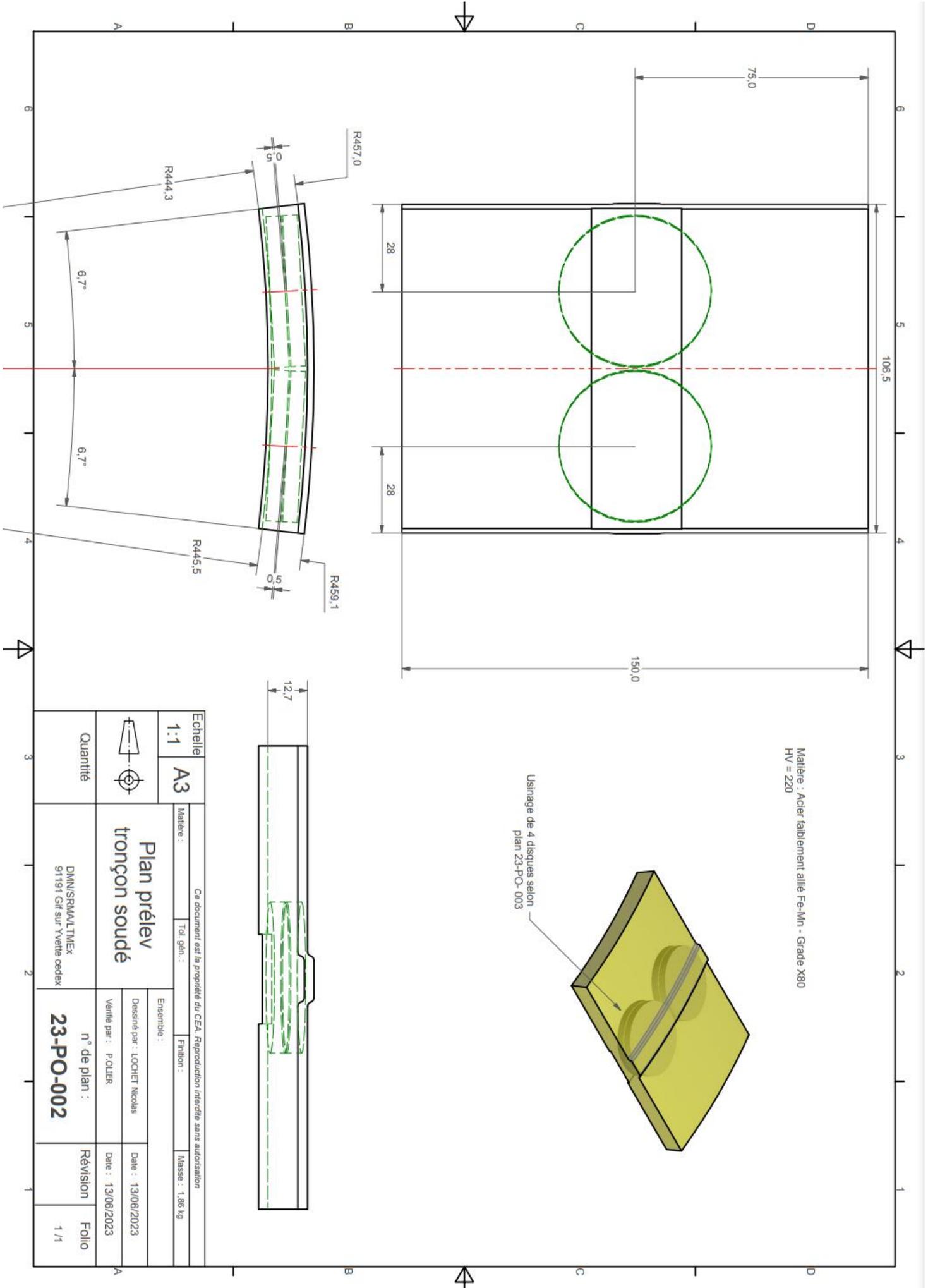
```
77 self.S[N-1] = lim1
78 if type0=="neumann":
79     self.b[0] = 1.0+self.alpha[0]
80     self.c[0] = -self.alpha[0]
81     self.e[0] = 1.0-self.alpha[0]
82     self.f[0] = self.alpha[0]
83     self.s[0] = -2*self.alpha[0]*lim0*dx+dt*S[0]
84 if type1=="neumann":
85     self.a[N-1] = -self.alpha[N-1]
86     self.b[N-1] = 1.0+self.alpha[N-1]
87     self.d[N-1] = self.alpha[N-1]
88     self.e[N-1] = 1.0-self.alpha[N-1]
89     self.s[N-1] = 2*self.alpha[N-1]*dx*lim1+dt*S[N-1]
90
91 self.beta[0] = self.b[0]
92 self.gamma[0] = self.c[0]/self.beta[0]
93 for k in range(1,N):
94     self.beta[k] = self.b[k]-self.a[k]*self.gamma[k-1]
95     if self.beta[k]==0:
96         raise Exception("Impossible de resoudre le systeme ligne "+str(k))
97     self.gamma[k] = self.c[k]/self.beta[k]
98
99 ## La fonction iterations implémente le schéma de Cranck-Nicolson. Ses arguments sont
100 ## U0 : tableau numpy à N éléments
101 ## ti : temps initial
102 ## tf : temps final
103 ## La fonction renvoie le tableau U et le dernier instant calculé.
104
105 def iterations(self,U0,ti,tf):
106     if U0.size!=self.N:
107         raise Exception("Taille de U incorrecte")
108     U = U0.copy()
109     t = ti
110     while t<tf:
111         self.x[0] = (self.e[0]*U[0]+self.f[0]*U[1]+self.s[0])/self.beta[0]
112         for k in range(1,self.N-1):
113             self.x[k] = (self.d[k]*U[k-1]+self.e[k]*U[k]+self.f[k]*U[k+1]+self.s[k]-self.a[k]*self.x[k-1])/self.beta[k]
114         k = self.N-1
115         self.x[k] = (self.d[k]*U[k-1]+self.e[k]*U[k]+self.s[k]-self.a[k]*self.x[k-1])/self.beta[k]
116         U[self.N-1] = self.x[self.N-1]
117         for k in range(self.N-2,-1,-1):
118             U[k] = self.x[k]-self.gamma[k]*U[k+1]
119         t += self.dt
120     return [U,t]
121
```

-Hydrogen.py

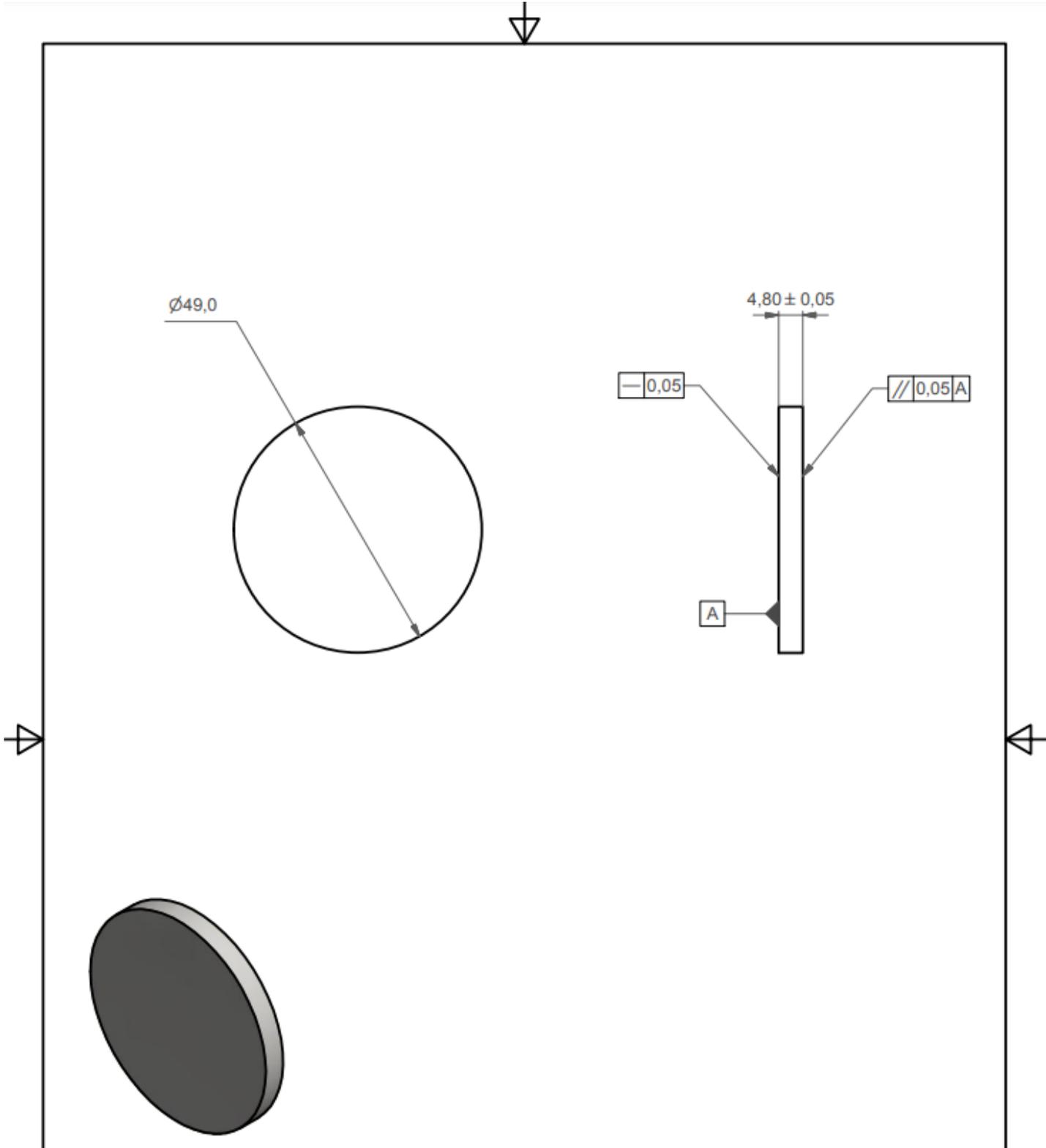
```
1 import numpy
2 from Diffusion1D import Diffusion1D
3 from matplotlib.pyplot import *
4
5 ## j'ai ajouté cette section pour déclarer quelques variables
6 Cini = 0.
7
8 ## j'ai ajouté le paramètre "thickness" pour modifier l'épaisseur de la tôle / tuyau ...
9 thickness = 0.001 ## in meter
10
11 N=50 # discretisation spatiale... attention au pas de temps dt qui dépend aussi du dx!
12
13 ## initialisation des vecteurs U et S
14 U = numpy.array([Cini]*N) ## initialisation de la temperature à t=0s
15 S = numpy.zeros(N) ## si pas de terme source de chaleur
16 ## S = numpy.array([100.]*N) ## si terme source de chaleur avec un coeff arbitraire de 100.
17
18 x=numpy.arange(N)*thickness/N
19
20 ## cas avec 1 seul milieu homogène
21 ## liere valeur: toujours 1 si milieu homogène
22 ## 2nde valeur = coefficient de diffusion
23 coef1 = [[0.3, 2e-11], [0.3, 2e-10], [1, 2e-8]] #à 2916 secondes
24 #coef2 = [[1, 2.78e-11]] #à 5595 secondes
25 #coef3 = [[1, 2.61e-11]] #à 6333 secondes
26 #coef4 = [[1, 2.43e-11]] #à 6838 secondes
27
28 ## cas avec 3 milieux différents
29 ## liere valeur: toujours entre 0 et 1 (coeff multiplicateur de la dimension spatiale)
30 ## 2nde valeur = coefficient de diffusion
31 #coef = [[0.025, 1.8e-11], [0.205, 1.8e-10], [1, 1.8e-09]]
32
33 ## problème de diffusion d'hydrogène à résoudre: flux entrant en Xmin et sortant en Xmax
34 ## flux fomulation modified in order to verify " D.du/dx = flux"
35 #concentration pour dirichlet
36 FXmin = 320. ## zone en contact avec de l'hydrogène en forte concentration ? signe - = entrant ici
37 FXmax = 0. ## zone en contact avec de l'air ? signe - = sortant ici ? erreur de programmation?
38
39 tini=0 ## instant initial
40
41 dx = (thickness/N)
42
43 dt = 10 ## pas de temps en seconde
44 print('Crank-nicholson scheme used for solving this 1D problem so unconditionnally stable (no criterion dt=f(dx))')
45
46 diffusion = Diffusion1D(N)
47
48 ## La fonction iterations implémente le schéma de Cranck-Nicolson. Ses arguments sont
49 ## U0 : tableau numpy à N éléments
50 ## ti : temps initial
51 ## tf : temps final
52
53 #Tinterval = 60 # in second
54 t1 = 100
55 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
56 [U1,tini1] = diffusion.iterations(U,tini,t1)
57
58 t2 = 1000
59 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
60 [U2,tini2] = diffusion.iterations(U1,tini1,t2)
61
62 t3 = 10000
63 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
64 [U3,tini3] = diffusion.iterations(U2,tini2,t3)
```

```
55 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
56 [U1,tini1] = diffusion.iterations(U,tini,t1)
57
58 t2 = 1000
59 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
60 [U2,tini2] = diffusion.iterations(U1,tini1,t2)
61
62 t3 = 10000
63 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
64 [U3,tini3] = diffusion.iterations(U2,tini2,t3)
65
66 t4 = 20000
67 diffusion.config(dt, thickness, coef1,"dirichlet", FXmin, "dirichlet", FXmax, S)
68 [U4,tini4] = diffusion.iterations(U3,tini3,t4)
69
70 ## ATTENTION PROBLEME en Xmas avec le flux sortant car je ne dois pas avoir une valeur
71 ## negative pour la concentration en H2 !!! condition à ajouter sur le calcul... dans "iterations" ?
72
73 figure(figsize=(8,6))
74 plot(x,U1, label=str(t1)+' s')
75 plot(x,U2, label=str(t2)+' s')
76 plot(x,U3, label=str(t3)+' s')
77 plot(x,U4, marker='s', label=str(t4)+' s')
78 legend(loc="upper right")
79 xlabel("x [m]")
80 ylabel("Hydrogen Concentration [mol.m^{-3}]")
81 ##axis([0, thickness, Cini, max(max(U1),max(U2),max(U3),max(U4))])
82 axis([0, thickness, min(min(U1),min(U2),min(U3),min(U4)), max(max(U1),max(U2),max(U3),max(U4))])
83 grid()
84 show()
85
```

Plans :



Echelle		Ce document est la propriété du CEA. Reproduction interdite sans autorisation	
1:1	A3	Matière :	Tol. gén. :
Quantité		Finition :	
Plan prélevé		Masse : 1,86 kg	
trçon soudé		Ensemble :	
DMN/SRM/L/TMEX		Dessiné par : LOCHET Nicolas	
91191 Gif sur Yvette cedex		Vérité par : P.OLLER	
n° de plan :		Date : 13/06/2023	
23-PO-002		Date : 13/06/2023	
Révision		Folio	
1 / 1		1 / 1	



Echelle		<i>Ce document est la propriété du CEA. Reproduction interdite sans autorisation</i>			
1:1	A4	Matière : Acier	Tol. gén. : 0.1	Finition : Ra : 1.6	Masse : 0.07 kg
		Disque d=49ep4.8			
		Ensemble :		Dessiné par : LOCHET Nicolas	
		Date : 13/06/2023		Vérifié par : P.OLIER	
Date : 13/06/2023		n° de plan :		Révision	Folio
Quantité		DMN/SRMA/LTMEx 91191 Gif sur Yvette cedex		23-PO-003	
					1 / 1

RESUME

Etat de l'art bibliographique permettant d'évaluer l'impact de la diffusion d'hydrogène dans les aciers, d'identifier les mécanismes de Fragilisation Par Hydrogène intervenant lors de la diffusion d'hydrogène dans l'acier X80, et de comprendre leurs fonctionnements.

Recherches sur les procédés de déformation plastique sévère (SPD), notamment le SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment), et l'impact de tels méthodes sur les aciers, en particulier l'acier X80. Diffusion d'hydrogène dans la partie soudée du pipeline.

Simulation de diffusion dans un matériau homogène (X80), puis dans un modèle dit multicouche, simulant l'effet du traitement SMAT sur le matériau (code python).

Réalisation des différents échantillons qui serviront aux tests de perméation, le procédé SMAT réalisé au LASMIS de l'Université de Technologie de Troyes (UTT), et les essais de perméation au CEA de Grenoble.

ABSTRACT

Literature review to assess the impact of hydrogen diffusion in steels, identify the hydrogen fracture mechanisms involved in hydrogen diffusion in X80 steel, and understand how they work.

Research into severe plastic deformation (SPD) processes, in particular SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment), and the impact of such methods on steels, in particular X80 steel.

Hydrogen diffusion in the welded section of a pipeline.

Simulation of diffusion in a homogeneous material (X80), then in a multilayer model simulating the effect of SMAT on the material (Python code).

Production of the various samples to be used in the permeation tests, the SMAT process carried out at LASMIS, Université de Technologie de Troyes (UTT), and the permeation tests at CEA Grenoble.