

**Université PARIS 13**  
Institut Galilée

**THESE**

Présentée pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PARIS XIII**  
**SORBONNE PARIS CITÉ**

*Discipline : Mécanique des Matériaux*

**Tuan Hung NGUYEN**

**Développement d'outils numériques pour la prise en compte du  
couplage hydrogène-plasticité dans un code éléments finis ;  
application à l'essai de pliage en U**

*Soutenue le 16 juillet 2014*

MEMBRES DU JURY

M. Rafael ESTEVEZ	Rapporteur
M. Nicolas SAINTIER	Rapporteur
M. Michel CORET	Examineur
M. Jia LI	Examineur
Mme Monique GASPÉRINI	Directrice de thèse
M. Yann CHARLES	Co-directeur de thèse

Thèse préparée à:  
Université Paris 13, Sorbonne Paris Cité,  
Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux, CNRS, (UPR 3407)  
F-93430, Villetaneuse, France



# TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION .....</b>	<b>5</b>
BIBLIOGRAPHIE .....	7
<b>I. INTERACTIONS HYDROGENE-PLASTICITE-DIFFUSION D'HYDROGENE .....</b>	<b>9</b>
I. 1. LES INTERACTIONS ENTRE L'HYDROGENE ET LES MATERIAUX METALLIQUES .....	9
I. 1. a. Pénétration de l'hydrogène dans un matériau.....	9
I. 1. b. Diffusion et piégeage de l'hydrogène dans un métal.....	11
I. 1. c. Interaction hydrogène-plasticité .....	14
I. 1. d. Dislocations et hydrogène.....	16
I. 1. e. Rupture assistée par l'hydrogène.....	17
I. 2. MODELISATION DES INTERACTIONS HYDROGENE-PLASTICITE.....	18
I. 2. a. Modélisation de la diffusion et du piégeage .....	19
I. 2. b. Interactions entre le comportement mécanique et l'hydrogène.....	23
I. 2. c. Modélisation de la fragilisation par l'hydrogène .....	23
I. 3. SIMULATIONS NUMERIQUES DU COUPLAGE HYDROGENE-MATERIAU .....	24
I. 3. a. Simulations numériques dans le cadre du comportement isotrope .....	24
I. 3. b. Simulations numériques et hydrogène à l'échelle du polycristal .....	32
I. 4. CONCLUSION .....	36
BIBLIOGRAPHIE .....	37
<b>II. STRATEGIE ET MISE EN ŒUVRE DE L'IMPLEMENTATION DU COUPLAGE DIFFUSION-CHAMPS MECANIQUES .....</b>	<b>43</b>
II. 1. L'OUTIL NUMERIQUE : LE CODE ELEMENT FINIS ABAQUS.....	43
II. 1. a. Présentation du code .....	43
II. 1. b. Schémas de résolution .....	45
II. 1. c. Développement de procédures utilisateur .....	45
II. 1. d. Moyens de calculs.....	46
II. 2. RESOLUTION D'UN PROBLEME PAR ELEMENTS FINIS.....	46
II. 2. a. Forme de la solution sur un élément finis (EF).....	47
II. 2. b. Intégration numérique .....	48
II. 2. c. Problème mécanique.....	49
II. 2. d. Problème de diffusion de chaleur [5].....	53
II. 2. e. Résolution éléments finis d'un problème couplé mécanique-diffusion.....	55
II. 3. PRESENTATION DES PROCEDURES UTILISATEURS .....	57
II. 3. a. La procédure UMAT : .....	57
II. 3. b. La procédure UMATHHT.....	58
II. 3. c. La procédure UEL .....	59
II. 4. STRATEGIES D'IMPLEMENTATION DU PROBLEME COUPLE : BIBLIOGRAPHIE .....	59
II. 4. a. Fissuration en fatigue sous atmosphère d'hydrogène .....	59
II. 4. b. Prédiction de la fissuration assistée par l'hydrogène dans un acier 25%Cr.....	61
II. 4. c. Localisation de la plasticité induite par l'hydrogène.....	62
II. 4. d. Fragilisation dans les alliages d'aluminium 7xxx.....	63
II. 4. e. Implémentation de l'équation couplée de transport de l'hydrogène [15].....	64
II. 5. IMPLEMENTATION DU PROBLEME COUPLE MECANIQUE-DIFFUSION .....	65
II. 5. a. Algorithme de résolution des problèmes mécanique et de diffusion .....	66
II. 5. b. Quelques précision du développement de la procédure UMATHHT.....	67

II. 6.	CALCUL DU GRADIENT DE LA PRESSION HYDROSTATIQUE .....	68
II. 6. a.	<i>Algorithme de calcul</i> .....	68
II. 6. b.	<i>Validation du calcul du gradient de la pression hydrostatique</i> .....	70
II. 7.	CONCLUSION.....	72
	BIBLIOGRAPHIE .....	72
<b>III.</b>	<b>INTERACTION HYDROGENE-ELASTOPLASTICITE ISOTROPE .....</b>	<b>75</b>
III. 1.	DEVELOPPEMENT DES PROCEDURES UMAT ET UMATHT .....	75
III. 1. a.	<i>Comportement élastoplastique isotrope</i> .....	76
III. 1. b.	<i>Comportement élastoplastique à écrouissage isotrope et endommagement ductile</i> .....	77
III. 1. c.	<i>Validation des UMATs</i> .....	80
III. 1. d.	<i>Développement des procédures UMATHT</i> .....	81
III. 2.	VALIDATION DE L'IMPLEMENTATION DU COUPLAGE CHAMPS MECANQUES-DIFFUSION.....	82
III. 2. a.	<i>Couplage diffusion-champ de contrainte plasticité isotrope</i> .....	82
III. 2. b.	<i>Couplage diffusion-champ de contrainte-piégeage</i> .....	89
III. 2. c.	<i>Exemple de couplage hydrogène-plasticité isotrope et endommagement ductile</i> .....	94
III. 3.	CONCLUSION .....	96
	BIBLIOGRAPHIE .....	96
<b>IV.</b>	<b>APPLICATION A LA SIMULATION D'UN ESSAI DE PLIAGE EN 2D .....</b>	<b>98</b>
IV. 1.	PRESENTATION DE L'ESSAI.....	98
IV. 2.	SIMULATION DE L'ESSAI DE PLIAGE .....	99
IV. 2. a.	<i>Conditions de chargement</i> .....	99
IV. 2. b.	<i>Maillage</i> .....	100
IV. 2. c.	<i>Matériau</i> .....	100
IV. 3.	INFLUENCE DES PARAMETRES GEOMETRIQUES SUR LES CHAMPS MECANQUES .....	101
IV. 3. a.	<i>Influence du rayon du rouleau R</i> .....	101
IV. 3. b.	<i>Influence de la position du boulon de serrage (L)</i> .....	103
IV. 3. c.	<i>Influence de l'écart entre les appuis (D)</i> .....	104
IV. 3. d.	<i>Conclusion</i> .....	105
IV. 4.	ETUDE PARAMETRIQUE SUR LA DIFFUSION ET LE PIEGEAGE DE L'HYDROGENE.....	105
IV. 4. a.	<i>Influence de R</i> .....	106
IV. 4. b.	<i>Influence de l'écrouissage sur la quantité d'hydrogène absorbé</i> .....	108
IV. 4. c.	<i>Influence des condition limites en hydrogène</i> .....	117
IV. 4. d.	<i>Influence du lien entre <math>C_L</math> et <math>C_T</math></i> .....	120
IV. 4. e.	<i>Conclusion</i> .....	120
	BIBLIOGRAPHIE .....	121
<b>V.</b>	<b>INTERACTION HYDROGENE-PLASTICITE DANS UN POLYCRISTAL.....</b>	<b>122</b>
V. 1.	COMPORTEMENT D'UN MONOCRISTAL .....	122
V. 1. a.	<i>Notions sur la plasticité cristalline</i> .....	122
V. 1. b.	<i>Loi de comportement du monocristal</i> .....	124
V. 1. c.	<i>Paramètres mécaniques</i> .....	125
V. 1. d.	<i>Paramètres de diffusion</i> .....	126
V. 2.	DEFINITION D'UN VER .....	126
V. 2. a.	<i>Définition d'un VER</i> .....	126
V. 2. b.	<i>Identification du comportement moyen d'un VER</i> .....	129
V. 3.	COUPLAGE DIFFUSION-PLASTICITE DANS UN VOLUME POLYCRISTALLIN .....	137
V. 3. a.	<i>Conditions de calcul</i> .....	138
V. 3. b.	<i>Résultats</i> .....	139



V. 4. APPLICATION A L'ESSAI DE PLIAGE EN 3D .....	142
<i>V. 4. a. Stratégie de calcul</i> .....	142
<i>V. 4. b. Pliage en U - calcul 3D homogène</i> .....	143
<i>V. 4. c. Mise en place de la simulation de l'essai du pliage en U à l'échelle du polycristal.</i> .....	144
<i>V. 4. a. Résultats</i> .....	146
V. 5. CONCLUSION.....	150
BIBLIOGRAPHIE .....	151
<b>CONCLUSION ET PERSPECTIVES.....</b>	<b>154</b>
ANNEXE A : ALGORITHME DE NEWTON-RAPHSON .....	158
ANNEXE B : INTEGRATION EXPLICITE ET IMPLICITE DU COMPORTEMENT NON LINEAIRE.....	160



## Introduction

Le développement de l'économie globale ainsi que la croissance rapide de la population mondiale demande une consommation d'énergie importante, ce qui nécessite de diversifier les sources d'énergies. De plus, dans une demande de développement durable, on a besoin de trouver des sources d'énergie renouvelable. L'hydrogène grâce à son abondance dans la nature suscite un intérêt grandissant comme vecteur d'énergie, car on peut le stocker et le transporter plus facilement que l'électricité.

Cependant, le stockage et transport de l'hydrogène sont confrontés au problème de Fragilisation Par l'Hydrogène (FPH, figure 1) qui peut produire la rupture prématurée des structures (notamment métalliques) et pose ainsi des enjeux importants de sécurité. La FPH a été observée depuis longtemps (vers 1875).



Figure 1. La rupture dans un tube exposé à l'hydrogène [1]

Depuis, de nombreuses études ont été effectuées pour tenter de comprendre les mécanismes de ce phénomène, de les modéliser afin de le prévoir et pouvoir l'éviter. Ainsi, à partir de travaux expérimentaux (essais mécaniques, observations microscopiques,...), il a été établi que l'hydrogène peut diffuser ou être piégé dans le matériau, les défauts microstructuraux (inclusions, joints de grains, dislocations, lacunes,...) jouant un rôle primordial dans l'amorçage ou la propagation de fissures. Différents mécanismes locaux ont été proposés et modélisés. Cependant, l'utilisation de ces modèles, ou même leur validation expérimentale, est souvent difficile, et de nombreux problèmes restent ouverts, compte-tenu notamment de la diversité des matériaux et des sollicitations étudiés.

A l'échelle plus macroscopique, le dimensionnement des structures exposées à l'hydrogène, ainsi que leur fiabilité, peuvent espérer bénéficier des capacités des simulations numériques par la méthode des éléments finis. Pour être performants, les calculs doivent alors prendre en compte les interactions hydrogène-matériau. Dans le cadre de la thermomécanique des milieux continus, l'équation de diffusion de l'hydrogène assistée par le champ de pression hydrostatique est une première étape de couplage mécanique-diffusion. La diffusion fickienne est cependant insuffisante pour traduire le piégeage de l'hydrogène par les défauts microstructuraux. De plus, en présence de déformation plastique, les conséquences des interactions hydrogène-dislocations doivent également être considérées. Des formulations généralisées de l'équation de diffusion décrivant de façon phénoménologique l'effet de la déformation plastique sont ainsi disponibles dans la littérature [2].

Dans le domaine de la mise en forme des matériaux métalliques, le matériau peut être soumis à des chargements mécaniques complexes jusqu'à de grandes déformations plastiques cumulées, ce qui est notamment le cas dans les structures destinées au transport ou au stockage de l'hydrogène (réservoirs, pipelines,..). La modélisation des structures en présence

d'hydrogène nécessite alors de tenir compte de l'interaction entre la diffusion de l'hydrogène et la plasticité. Afin de simuler des structures macroscopiques complexes, tout en tenant compte de manière phénoménologique de mécanismes représentatifs à l'échelle microscopique (interactions dislocation ou impureté-hydrogène par exemple), l'échelle du polycristal semble pertinente, car elle permet de décrire partiellement les hétérogénéités microstructurales et de prendre en compte l'anisotropie de comportement. Les simulations numériques par éléments finis à cette échelle mésoscopique, développées depuis de nombreuses années pour le comportement plastique des agrégats polycristallins, commencent ainsi à se développer dans le contexte de prise en compte d'environnement hydrogène, bien que le couplage diffusion-contrainte-plasticité soit rarement traité dans sa globalité, les simulations numériques mécanique-diffusion étant souvent menées de façon séquentielle, et/ou appliqués à des sollicitations simples [3-5].

Dans ce contexte, l'objectif de ce travail consiste à développer dans le cadre de la modélisation par éléments finis dans un code commercial (Abaqus©), des outils numériques fiables qui permettent de simuler le couplage de la diffusion de l'hydrogène et des champs mécaniques pour les structures macroscopiques soumises à des chargements complexes, tout en considérant les mécanismes microstructuraux et leur interaction avec la diffusion de l'hydrogène à l'échelle du polycristal. Il s'agit des premiers développements numériques dans ce domaine au LSPM, qui visent notamment à mettre au point les moyens numériques nécessaires pour des confrontations expérimentales (en cours de développement au laboratoire).

Ce manuscrit s'organise en cinq chapitres. Le premier chapitre concerne une étude bibliographique. On présente les principales étapes de pénétration et de diffusion de l'hydrogène dans le métal. Ensuite, une brève revue sur les études expérimentales qui illustrent les interactions de l'hydrogène avec les caractéristiques mécaniques, puis les modèles d'interactions entre le matériau et l'hydrogène sont présentés. Les études numériques utilisant ces modèles sont aussi révisées pour positionner le présent travail et justifier le choix du couplage entre l'hydrogène et les champs mécaniques.

La deuxième partie est dédiée à la présentation des outils numériques utilisés dans la simulation du couplage mécanique-diffusion. On rappelle également les principes du développement numérique dans Abaqus. On justifie ensuite le choix de la stratégie d'implémentation de ce couplage. Le schéma de résolution est par la suite détaillé.

La troisième partie est consacrée au développement et la validation de procédures utilisateur (UMAT dans Abaqus) pour de différents comportements mécaniques. Ensuite, une procédure pour la diffusion (UMATHHT) est développée. La combinaison de ces 2 procédures permet de résoudre le couplage mécanique- diffusion. Cette résolution est validée en comparant avec les études de la littérature.

Dans la quatrième partie, les outils numériques développés sont appliqués pour simuler un test de fragilisation par l'hydrogène : l'essai de pliage en U. La simulation s'effectue en 2D.

La dernière partie consiste à étendre la résolution du couplage mécanique-diffusion à l'échelle d'un polycristal virtuel en 3D. Les outils développés dans la partie précédente sont transposés à cette échelle. Les conditions de calcul du couplage mécanique-diffusion sont d'abord mises au point en chargement uniaxial, puis la simulation couplée est appliquée par « submodeling » à un polycristal soumis aux conditions de chargement de l'essai de pliage en U.

## ***Bibliographie***

- [1] T.-G. Kim, *Failure of piping by hydrogen attack*. Engineering Failure Analysis, 2002. **9**(5): p. 571-578.
- [2] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.
- [3] B. Ali, *Caractérisation et modélisation micromécanique de la propagation de fissures fragiles par l'effet de l'hydrogène dans les alliages AA7xxx*. Thèse doctorat. Ecole de Mines Saint-Etienne, 2011.
- [4] D.C. Ahn, P. Sofronis, et R.H. Dodds, *On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence*. International Journal of Hydrogen Energy, 2007. **32**(16): p. 3734-3742.
- [5] Y. Liang, P. Sofronis, et N. Aravas, *On the effect of hydrogen on plastic instabilities in metals*. Acta Materialia, 2003. **51**: p. 2717–2730.



# I. Interactions hydrogène-plasticité-diffusion d'hydrogène

Dans un premier temps, sont abordés les aspects généraux sur les interactions hydrogène-matériau.

Ensuite, une revue de travaux expérimentaux est faite, portant sur les interactions entre la plasticité, les champs mécaniques, et la diffusion de l'hydrogène dans les matériaux. Les mécanismes de fragilisation par l'hydrogène (FPH) sont ensuite considérés.

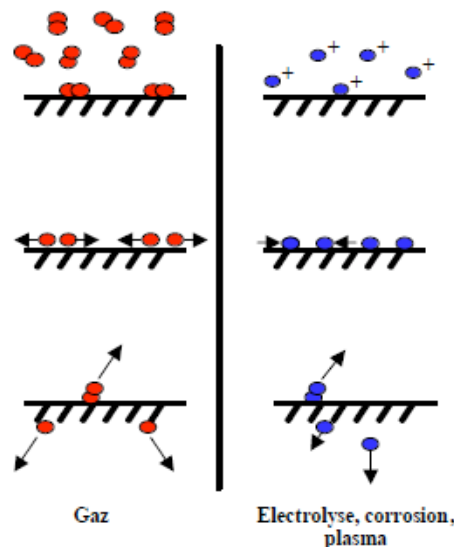
L'état de l'art de la modélisation des interactions entre plasticité, contrainte et diffusion de l'hydrogène est ensuite présenté, suivi des applications de ces modèles de la littérature, avec un intérêt particulier pour les travaux basés sur l'utilisation de la méthode des éléments finis, qui concernent directement ce travail de thèse.

## I. 1. Les interactions entre l'hydrogène et les matériaux métalliques

### I. 1. a. Pénétration de l'hydrogène dans un matériau

La pénétration de l'hydrogène dans un métal se fait par étapes successives (voir figure I.1.1 pour l'hydrogène gazeux et l'hydrogène cathodique) [1] :

- adsorption sur la surface du matériau. Cette étape correspond à la réaction chimique qui amène l'atome ou la molécule d'hydrogène sur la surface ;
- dissolution, lorsque ces molécules ou atomes passent sous la surface, dans le volume du matériau ;
- diffusion en volume, correspondant au déplacement des atomes à l'intérieur du matériau.



**Figure I.1.1.** Représentation des étapes de la pénétration de l'hydrogène gazeux et électrolytique dans le métal [2].

La réaction d'adsorption dépend de l'environnement hydrogène (gazeux ou cathodique). Dans le cas gazeux, les molécules de di-hydrogène se dissocient d'abord sur la surface de métal. Ensuite, une liaison physico-chimique entre l'hydrogène et la surface du matériau se forme. Cette réaction d'adsorption est schématisée par :



Pour un environnement cathodique, l'hydrogène est adsorbé en surface grâce à la polarisation cathodique :



Dans ce cas, l'adsorption s'accompagne d'une recombinaison partielle des molécules H<sub>2</sub> selon la réaction :



La cinétique de l'adsorption de l'hydrogène sur la surface d'un matériau dépend fortement des conditions de l'expérience, et en particulier de l'état, de la structure et de la composition de la surface, ainsi que de l'émergence des dislocations dues à la plasticité [5]. Cette cinétique est généralement assez rapide sur une surface propre (sans contaminant) de métaux comme le Nickel ou le Fer, mais elle est assez lente lorsque se forme une couche d'oxyde sur la surface du matériau : la pénétration de l'hydrogène est alors ralentie à cause de la cinétique lente de dissociation de la molécule [1]. Pour le Nickel, Winkler et al. [6] ont montré que pour une surface orientée (111), un petit changement dans la structure de la surface, ou une petite quantité de contaminant, peut influencer considérablement la cinétique de l'adsorption.

Les atomes d'hydrogène adsorbés pénètrent ensuite dans le métal (absorption). L'absorption est décrite par l'équation :



De manière phénoménologique, pour quantifier la quantité d'hydrogène adsorbée en surface, on définit un taux de recouvrement d'hydrogène  $\theta$ , qui représente le rapport entre le nombre total de sites d'adsorption d'hydrogène en surface, et ceux qui sont remplis. Ce taux de recouvrement peut être relié à la concentration d'hydrogène absorbé  $C$  dans le volume en dessous de la surface par la relation [3]

$$\theta = \frac{C}{C + \exp(-\Delta g_b^0 / RT)} , \quad (I.1.6)$$

où  $\Delta g_b^0$  représente la différence d'énergie libre de Gibbs entre la surface et le volume.

Dans le cas de l'hydrogène gazeux, et sous des hypothèses de solution diluée et de taux de recouvrement faible, la solubilité de l'hydrogène  $S$  (c'est-à-dire la concentration maximale d'hydrogène qui peut être introduite dans le réseau cristallin du métal) peut être reliée à la pression de di-hydrogène gazeux et à la température par la loi de Sieverts [4] :

$$S = S_0 \sqrt{P} \exp\left(\frac{-\Delta H_s}{RT}\right) , \quad (I.1.7)$$

où  $\Delta H_s$  est l'enthalpie de dissolution,  $P$  est la pression d'hydrogène gazeux et  $T$  est la température.  $S_0$  est un facteur pré-exponentiel.

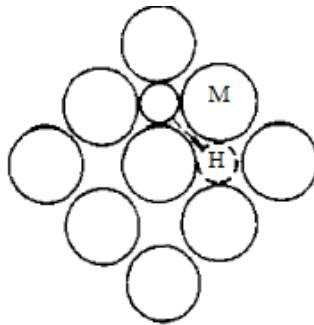


### *I. 1. b. Diffusion et piégeage de l'hydrogène dans un métal*

Une fois que l'hydrogène est absorbé, il commence à diffuser et à interagir avec les atomes du métal. Lors de cette diffusion, les atomes d'hydrogène se déplacent d'un site interstitiel à l'autre. Ils peuvent également rencontrer un site de piégeage, et ne plus pouvoir se déplacer.

#### i. Diffusion de l'hydrogène et influence du champ de contrainte

Grâce à leur petite taille, les atomes d'hydrogène diffusent dans le solide via les sites interstitiels (figure I.1.2) de la structure cristalline du métal.

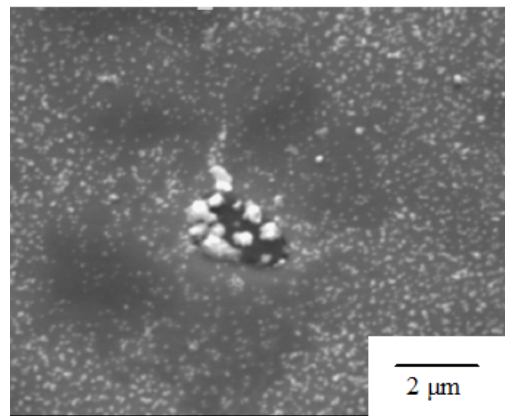


**Figure I.1.2.** Mouvement d'un atome d'hydrogène dans les sites interstitiels d'un réseau cristallin [7].

Lorsque le réseau est dilaté (sous l'action d'un champ mécanique), la diffusion de l'hydrogène est facilitée, et sa solubilité augmente.

#### ii. Interaction avec les défauts

L'hydrogène diffusant dans le réseau cristallin peut se retrouver piégé localement et ne plus pouvoir diffuser. Ces pièges peuvent être des joints de grains, des précipités, des dislocations générées par la déformation plastique, des lacunes, etc... La présence d'un site de piégeage diminue le potentiel chimique de l'hydrogène.



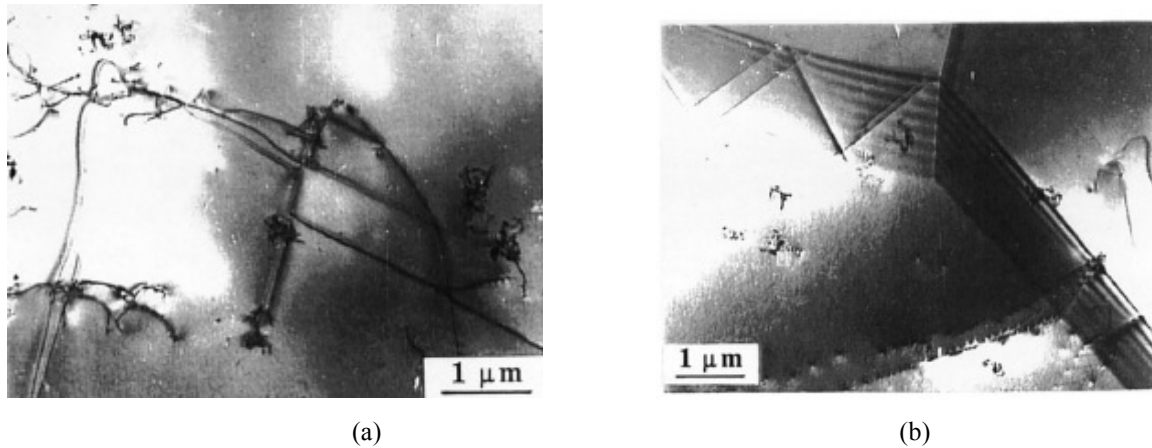
**Figure I.1.3.** Autoradiographie du tritium pour détecter le piégeage de l'hydrogène dans les précipités MnS [11].

On distingue :

- les pièges irréversibles, qui sont caractérisés par une énergie de piégeage forte ; pour le cœur de dislocation dans Fe, cette énergie est de l'ordre de 60kJ/mol [8] ;
- les pièges réversibles représentés par des énergies de piégeage faibles : l'atome d'hydrogène peut s'échapper de ce piège à condition qu'on lui fournisse une énergie suffisamment grande (par exemple, en augmentant la température). Pour les dislocations dans Fe, cette énergie est de l'ordre 26 kJ/mol [9].

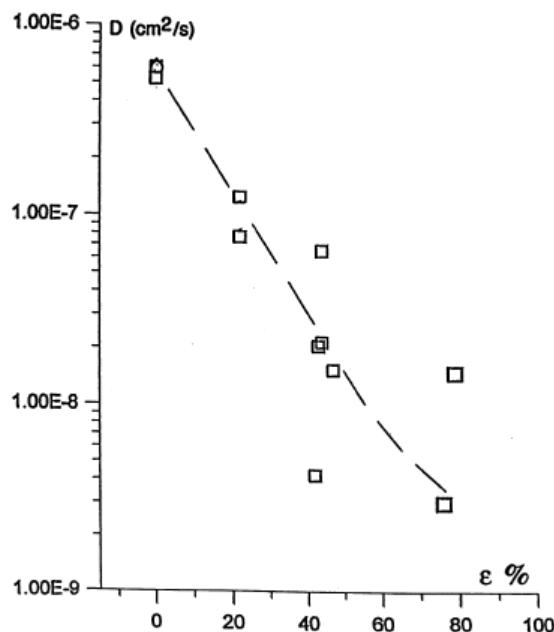
Le piégeage de l'hydrogène a été mis en évidence par des techniques d'autographie du tritium (un isotope de l'hydrogène) ou par de l'imagerie MEB ou MET.

La méthode d'autoradiographie du tritium consiste à analyser la distribution de monocristaux d'argent qui se forment par émulsion nucléaire sous l'action de  $\beta$ -particules émises par le tritium [10]. Cette méthode a permis de mettre en évidence le piégeage de l'hydrogène autour de précipités MnS dans une matrice de Fe- $\alpha$  [11] : sur la figure I.1.3, on peut observer la densité des particules d'Argent, qui caractérise la présence de tritium autour des précipités MnS, et donc, l'hydrogène piégé.



**Figure I.1.4.** Mise en évidence du piégeage de l'hydrogène par autoradiographie du tritium dans l'acier 304L (a) au niveau des dislocations (b) au niveau du joint de grain [12].

Cette technique a également permis de mettre en évidence le piégeage de l'hydrogène autour des dislocations et des joints de grains dans un acier 304L à 293 K [12]. Sur la figure I.1.4, la grande densité de particules d'argent autour des dislocations indique une grande concentration d'hydrogène autour de celle-ci.



**Figure I.1.5.** Rôle de la pré-déformation sur le coefficient de diffusion à 293K dans un acier haute résistance 4120 [12].

Le piégeage modifie la vitesse de diffusion apparente de l'hydrogène dans les matériaux, comme illustré par la figure I.1.5, qui montre la diminution du coefficient de diffusion en

fonction de la déformation appliquée sur des éprouvettes en acier [12]. Ceci est attribuée au piégeage de l'hydrogène par les dislocations et les autres défauts, qui augmentent avec la prédéformation.

### iii. Transport de l'hydrogène par les dislocations

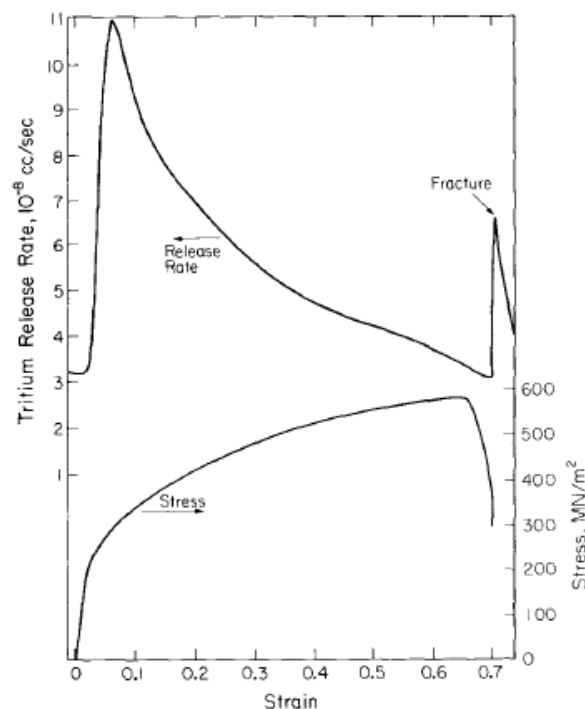
L'hydrogène piégé au voisinage de dislocations mobiles peut suivre leur déplacement, créant un flux supplémentaires d'hydrogène. Ce transport de l'hydrogène par les dislocations joue un rôle important dans la diffusion.

Pour que l'hydrogène ne se dépiège pas lors de ce transport, il faut que la vitesse des dislocations ne dépasse pas une vitesse critique  $V_C$ , qui s'écrit en fonction de l'énergie de piégeage  $\Delta W_B$  dans les dislocations, du coefficient de diffusion de l'hydrogène  $D_L$ , de la température et de la longueur du vecteur de Burger  $b$  comme suit [10] :

$$V_C = \frac{D_L \Delta W_B}{RT \ 30b}. \quad (I.1.8)$$

Le transport de l'hydrogène par dislocation peut conduire localement à des surconcentrations d'hydrogène dans le matériau, par exemple au niveau des obstacles qui bloquent le mouvement des dislocations, ce qui peut favoriser l'amorçage de fissures.

Ce transport a été mis en évidence et quantifié par la mesure de la désorption du tritium lors d'un essai de traction, sur des échantillons d'acier 304L préalablement chargés jusqu'à la saturation en tritium [13]. Le flux de tritium désorbé en surface des échantillons est mesuré, et est supposée proportionnel à la quantité de tritium transportée par les dislocations du cœur de l'éprouvette jusqu'à la surface (figure I.1.6).



**Figure I.1.6.** Courbe contrainte-déformation et taux de désorption du tritium-déformation dans l'acier 304L [13].

Le taux de tritium désorbé n'est pas modifié dans le domaine élastique, puis augmente brusquement au voisinage de la limite élastique, et continue à augmenter jusqu'à atteindre un maximum, avant de décroître jusqu'à sa valeur initiale. Ces résultats sont interprétés par le

transport du tritium par les dislocations mobiles, émises en grand nombre lors du début de la déformation plastique, et dont la mobilité se ralentit avec l'érouissage.

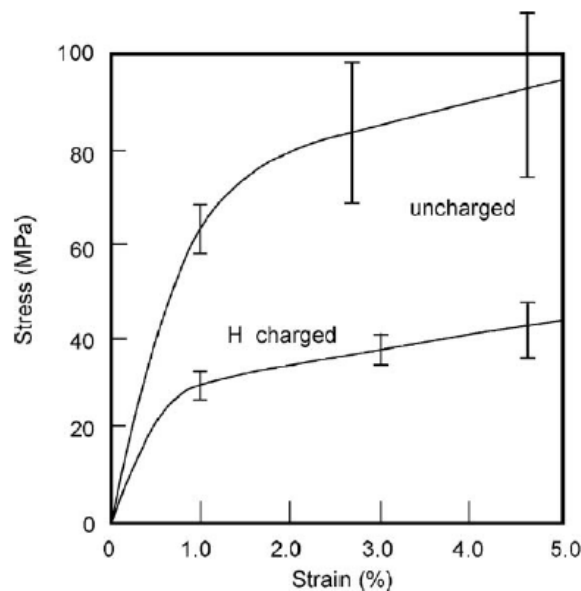
Par des essais identiques, effectués sur des éprouvettes monocristallines de superalliage à base nickel, Chêne et Brass [14] ont également conclu à la possibilité du transport d'hydrogène par dislocations mobiles.

### *I. 1. c. Interaction hydrogène-plasticité*

Le graphique I.1.5 illustre que la plasticité joue un rôle très important dans la diffusion de l'hydrogène ; de manière inverse, la diffusion de l'hydrogène peut modifier le mouvement des dislocations, et donc l'érouissage macroscopique.

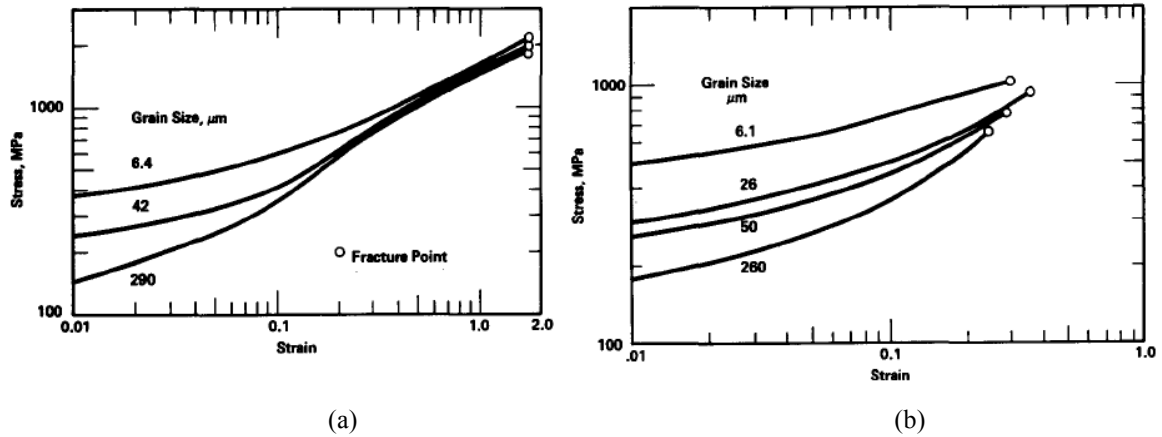
La comparaison d'essais de traction sur des éprouvettes préalablement chargées ou non en hydrogène est la méthode la plus directe pour caractériser l'influence de l'hydrogène sur la plasticité, en fonction du mode de chargement en hydrogène et de la vitesse de déformation. Les résultats de ces essais dans la littérature sont cependant souvent contradictoires.

Zeides (cité dans [15]) observe une diminution de la contrainte d'écoulement d'éprouvettes en aluminium sur des éprouvettes chargées en hydrogène à  $2 \cdot 10^{-3}$  H/M (atome d'hydrogène par atome de métal) par polarisation cathodique (figure I.1.7).



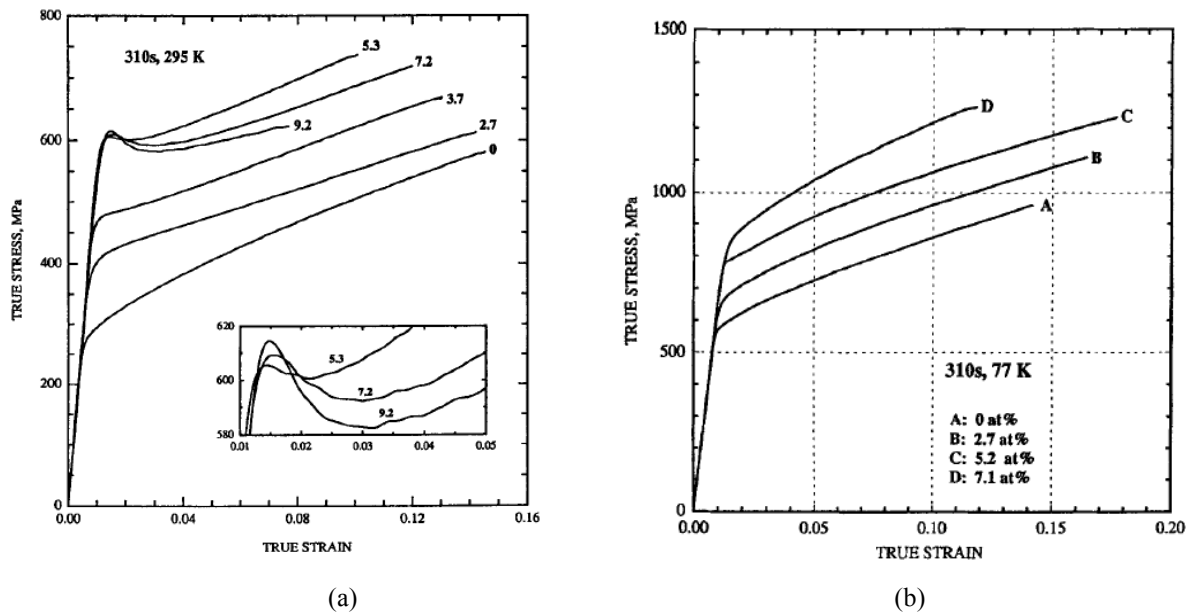
**Figure I.1.7.** Courbe déformation-contrainte pour des échantillons d'Aluminium pur à 99,999% avec et sans hydrogène. Chaque courbe est la moyenne de 25 essais [15].

Caskey et al. [16] ont testé, quant à eux, des échantillons d'acier inoxydable 304L, avec des tailles de grains différents. Dans ces essais, les éprouvettes sont préchargées jusqu'à saturation en deutérium, puis déformées avec des vitesses de déformation de l'ordre de  $10^{-4}$  s<sup>-1</sup>. Ils ont constaté que sous ces conditions, la limite élastique augmente avec la concentration en hydrogène (figure I.1.8).



**Figure I.1.8.** Courbe contrainte-déformation pour le 304L avec différentes tailles de grains (a) non exposé à l'hydrogène et (b) exposé à l'hydrogène [16].

Les résultats d'essais de traction effectués sur des éprouvettes d'acier 310S, avec des températures variant de 77 K à 295 K et des vitesses variant de  $10^{-3}$  à  $10^{-6}$  s $^{-1}$ , montrent que la conséquence macroscopique des interactions locales entre hydrogène et plasticité dépend des conditions d'essais [17] (voir figure I.1.9). L'augmentation de la teneur en hydrogène tend à augmenter la limite d'élasticité, tant à température ambiante qu'à basse température, et peut également s'accompagner à température ambiante de l'apparition d'un pic de limite d'élasticité à partir d'une teneur en hydrogène suffisante (ce qui est attribué au blocage des dislocations par les atmosphères de Cottrell).



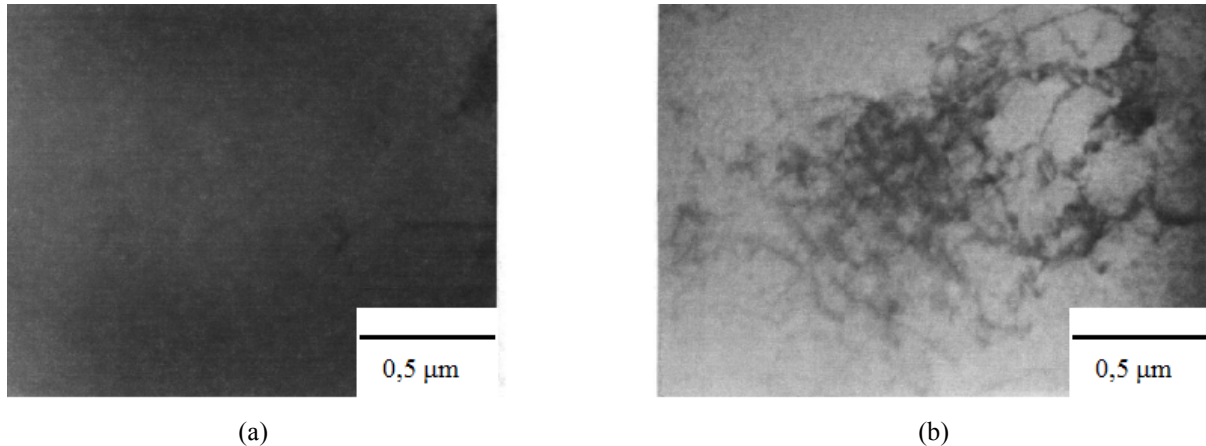
**Figure I.1.9.** Courbes contrainte-déformation de l'acier 310S pour différentes teneurs en hydrogène à (a) T=295 K et (b) T=77 K [17].

Dans le cas d'un acier haute performance soumis à de la traction (vitesse de déformation de  $8,3 \times 10^{-5}$  s $^{-1}$ ), simultanément à un chargement électrolytique en hydrogène [18], l'introduction de l'hydrogène entraîne une diminution importante de la contrainte d'écoulement pour une température supérieure à 190 K, tandis que pour une température inférieure, la tendance s'inverse et le matériau se durcit. Les auteurs relient cette inversion aux interactions entre les dislocations vis et l'hydrogène, et à la baisse de la diffusivité de l'hydrogène à basse température.

La compréhension des interactions hydrogène-plasticité nécessite ainsi des études à l'échelle des dislocations et basées sur des observations MET, ce qui dépasse largement le cadre de ce travail : on se limite ici à quelques illustrations de la littérature mettant en évidence expérimentalement l'influence de l'hydrogène sur les dislocations.

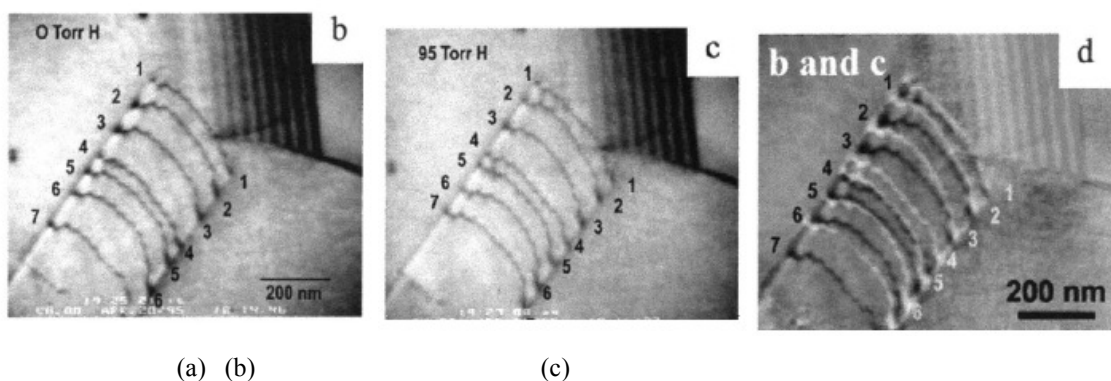
#### *I. 1. d. Dislocations et hydrogène*

Les premiers résultats portant sur l'influence de l'hydrogène sur le mouvement et l'émission des dislocations ont été publiés par Robertson et Birnbaum [19]. Dans ces travaux, des essais de traction, sur des éprouvettes de Nickel, ont été effectués in situ dans un microscope électronique à haute tension équipé d'une cellule environnementale (HVEM).



**Figure I.1.10.** micrographie HVEM de l'échantillon Nickel (a) déformé sous vide et (b) après ajout d'hydrogène à  $7.10^3$  Pa [20].

Ces conclusions ont été confirmées par des essais de traction sur des éprouvettes de Nickel effectuées dans la même cellule HVEM que précédemment [20] ; l'essai est d'abord effectué sans hydrogène, puis la charge est maintenue constante tandis que l'on introduit dans la cellule de l'hydrogène gazeux jusqu'à une pression de  $7.10^3$  Pa. On observe alors une plus grande densité de dislocation, ce qui suggère que l'hydrogène facilite leur mouvement (figure I.1.10).



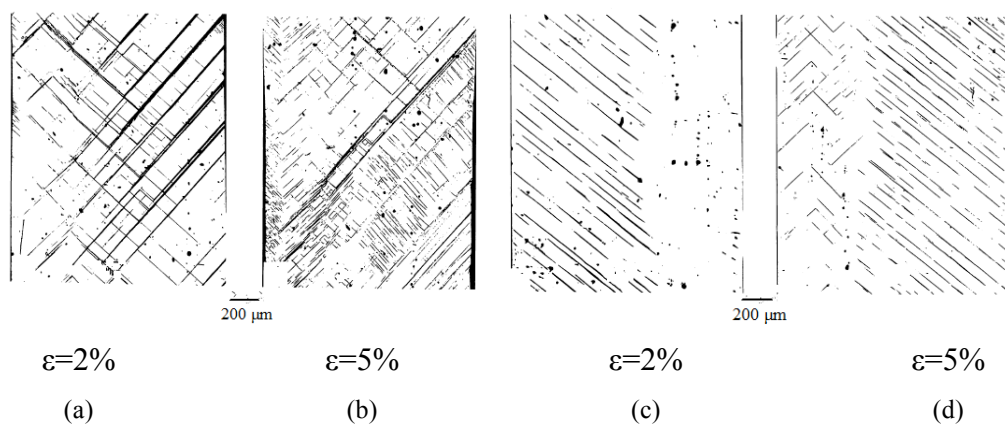
**Figure I.1.11.** (a) Empilement de dislocations à la fin du chargement mécanique dans l'acier en absence d'hydrogène, (b) évolution de cet empilement en présence d'hydrogène et (c) superposition des deux images (a) et (b) [21].

L'effet de l'hydrogène absorbé sur les interactions entre dislocations a été directement observé par Ferreira et al. [21], qui ont effectué des essais de traction sous vide au MET sur des échantillons en acier 310S, puis ont observé l'évolution d'empilements de dislocations

sous l'effet de l'introduction d'hydrogène gazeux, jusqu'à une pression de  $1,3 \cdot 10^4$  Pa (figure I.1.11).

Ces observations permettent de mettre en évidence l'écrantage des interactions élastiques entre les dislocations par les atomes d'hydrogènes piégés, ce qui permet le rapprochement entre dislocations de l'empilement.

A l'échelle de la microscopie optique, Brass et Chêne [12] ont comparé les lignes de glissement sur les faces (100) d'éprouvettes de monocristaux d'un super alliage à base Nickel, soumis à de la traction (jusqu'à une déformation de 2 ou 5 %) sous air ou sous hydrogène. Sous air sont visibles simultanément deux familles de traces de glissement dans une même zone, alors qu'une seule émerge sous hydrogène. Le glissement dévié n'est perceptible que lors de la traction sous air, et les lignes sont globalement moins nombreuses sous hydrogène, ce qui suggère une plus grande localisation de la plasticité en présence d'hydrogène (figure I.1.12).



**Figure I.1.12.** (a,b) Observation microscopique d'éprouvettes déformées avant et (c,d) après chargement de l'hydrogène [12].

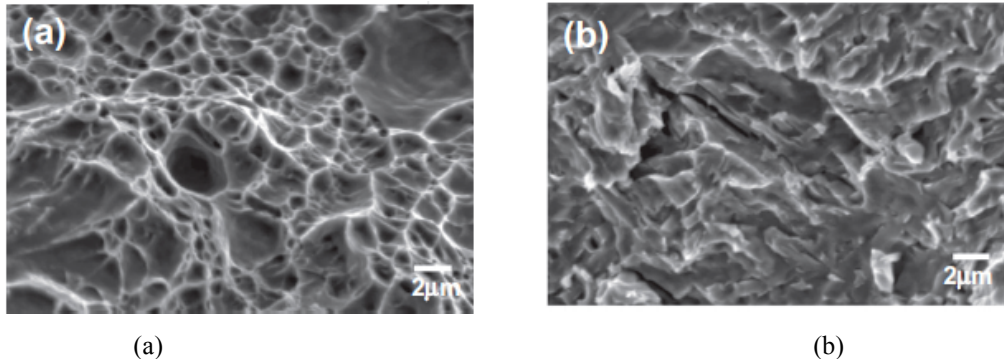
### *I. 1. e. Rupture assistée par l'hydrogène*

Une fois l'hydrogène est adsorbé, absorbé et diffusé dans le matériau, on peut alors assister à une rupture de la structure.

Différents chargements mécaniques sont utilisés pour étudier le phénomène FPH. Outre les essais classiques de traction ou de fatigue en sollicitation uniaxiale sous chargement cathodique, largement utilisés pour l'étude de l'effet de l'hydrogène sur le comportement mécanique, on rencontre également des essais spécifiques sous chargement plus complexe, permettant de caractériser la rupture différée, ou sous haute pression d'hydrogène gazeux :

- les essais sous chargement statique pour évaluer la durée de vie du matériau à une charge constante et exposé au milieu hydrogéné comme essai de pliage en U [23] ;
- les essais sous chargement dynamique comme l'essai de disque développé par J.P. Fidelle [24] ou les essais de traction [22]. Dans l'essai de disque [25], la comparaison des pressions de rupture d'un disque métallique mince sous pression d'hydrogène gazeux ou de gaz neutre est utilisée comme indice phénoménologique de FPH. Ces essais permettent notamment de sélectionner les matériaux selon leur sensibilité à l'hydrogène.

Pour identifier l'origine de la rupture causée par FPH dans ces essais, on observe souvent les faciès de rupture. Dans les essais de traction d'une éprouvette entaillée préchargée en hydrogène cathodique pour l'acier X80, Neeja et al. [26] ont observé des faciès quasi-clivage, alors qu'un faciès ductile a été constaté pour la même éprouvette mais en absence de l'hydrogène (figure I.1.13).



**Figure I.1.13.** (a) Rupture ductile observée dans l'éprouvette X80 en traction non chargée en hydrogène et (b) rupture en quasi-clivage observée dans l'éprouvette X80 préchargée en hydrogène [26].

On peut dégager trois mécanismes principaux permettant d'expliquer l'endommagement par l'hydrogène :

1. rupture par la formation d'hydrure [27,28] : des hydrures se forment dans le voisinage d'une concentration de contrainte en présence d'hydrogène (réaction chimique), et se cassent lorsque le champ de contrainte est suffisant. La fissure, dans ce cas, s'amorce et se propage de manière fragile au travers des hydrures ou entre les hydrures et la matrice. Ce mécanisme a été observé lors d'essais de traction effectués sur des éprouvettes de Niobium pur à basse température, dans un environnement d'hydrogène gazeux [27]. Dans un premier temps, les auteurs observent la formation d'hydrures NbH en amont la fissure, puis une propagation à travers cette couche d'hydrures ;
2. la rupture par décohésion du matériau [29] : cette rupture est possible dans la mesure où les atomes d'hydrogènes diminuent les énergies de cohésions entre atomes, et favorisent ainsi la rupture (par clivage) ;
3. la rupture par localisation de la plasticité [30] : comme évoqué ci-dessus, la mobilité des dislocations est augmentée en présence d'hydrogène, et conduit à la formation de bandes localisées de déformation plastique en pointe de fissure, ce qui accélère la propagation de la fissure. Ce type d'endommagement a été par exemple observé pour des essais de traction sur des éprouvettes en Ti- $\alpha$  dans un environnement H<sub>2</sub> [28].

## ***I. 2. Modélisation des interactions hydrogène-plasticité***

Dans ce chapitre, sont présentés les modèles de la littérature pour les interactions entre l'hydrogène et les matériaux, avec une attention particulière pour les couplages entre diffusion, plasticité, et contrainte.



### I. 2. a. Modélisation de la diffusion et du piégeage

Dans un premier temps, les principaux éléments permettant d'aboutir à l'équation de diffusion de l'hydrogène dans un milieu soumis à un champ mécanique (contrainte, déformation) sont rappelés, ainsi que la prise en compte phénoménologique du piégeage de l'hydrogène.

#### i. Diffusion de l'hydrogène assisté par le champ de contrainte

Phénomène thermiquement activé, la diffusion des atomes d'hydrogène se fait de la zone de plus forte concentration vers les zones de plus faible concentration, comme décrit par une loi de Fick :

$$\mathbf{J} = -D_L \nabla C, \quad (I.2.1)$$

où  $C$  est la concentration locale d'hydrogène diffusif et  $\nabla$  l'opérateur Nabla,  $\mathbf{J}$  est le flux de diffusion ( $\text{molécules} \times \text{s}^{-1} \times \text{m}^{-2}$ ).  $D_L$  est le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans le métal, qui varie selon une loi d'Arrhenius [1] :

$$D_L = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_m}{RT}\right). \quad (I.2.2)$$

$\Delta H_m$  est l'enthalpie de migration de l'atome d'hydrogène dans le réseau cristallin.

Cependant, la formulation I.2.1 stipule que l'équilibre est atteint lorsque la concentration devient spatialement homogène, et ne décrit pas la sensibilité de la concentration d'hydrogène avec le champ de contrainte, plus particulièrement l'effet de la contrainte moyenne  $\sigma_m = \text{tr } \boldsymbol{\sigma} / 3$  (ou de la « pression hydrostatique »  $P_H = -\sigma_m$ ). En effet, la valeur élevée du volume molaire partiel de l'hydrogène provoque une dilatation du réseau cristallin lors de l'introduction de l'hydrogène, ce qui cause la dépendance de la solubilité de l'hydrogène à la pression hydrostatique [1,31]. De ce fait, la solubilité est plus élevée là où le réseau est localement dilaté ( $P_H$  négatif) où il est comprimé ( $P_H$  positif) [1].

Pour prendre en compte cet effet dans la diffusion de l'hydrogène, la loi de Fick peut être reformulée à l'aide des conditions thermodynamique de l'équilibre, et en considérant que la diffusion de l'hydrogène s'arrête quand son potentiel chimique est le même partout [32].

Li et al. [33] ont postulé l'existence d'un potentiel chimique d'un composant M (par exemple l'hydrogène) dans une entité de matériau en présence d'une pression hydrostatique. Ce potentiel est déterminé par :

$$\mu = \mu_M^0 + \bar{w} - W, \quad (I.2.3)$$

où  $\mu_M^0$  est le potentiel chimique du composant en absence de contrainte,  $\bar{w}$  est l'énergie de déformation de l'entité causée par l'ajout d'une mole de composant M.  $W$  est le travail total effectué sur l'entité par l'ajout d'une mole du composant. Sous l'application de la pression hydrostatique  $P = P_H$ , ces énergies sont calculées selon [33]

$$W = -\bar{V}_M P \quad \text{et} \quad \bar{w} = - \int_{\bar{V}_M(P=0)}^{\bar{V}_M(P=P_H)} P d\bar{V}_M, \quad (I.2.4)$$

où  $\bar{V}_M$  est le volume molaire partiel du composant M, défini par  $\bar{V}_M = \Delta v N_A$ .  $\Delta v$  représente le changement de volume du matériau par l'introduction d'un atome M dans la solution et  $N_A$  représente le nombre d'Avogadro [34].

En remplaçant (I.2.4) dans (I.2.3) et appliquant une intégration par parties, on obtient

$$\mu = \mu_M^0 + \int_0^{P_H} \bar{V}_M dP. \quad (I.2.5)$$

Basé sur l'équation I.2.5, le potentiel chimique de l'hydrogène en présence d'un champ de pression  $P_H$  et pour une concentration  $C$  s'écrit alors [33] en considérant  $\bar{V}_H$  constant indépendant de  $P_H$

$$\mu_H(C) = \mu_H^0(C) + \bar{V}_H P_H, \quad (I.2.6)$$

où  $\mu_H^0$  est le potentiel chimique de l'hydrogène en absence de contrainte et  $\bar{V}_H$  le volume molaire partiel de l'hydrogène.  $\mu_H^0$  s'écrit en fonction de  $C$  par

$$\mu_H^0 = \mu_0 + RT \ln\left(\frac{C}{C_0}\right), \quad (I.2.7)$$

$\mu_0$  est le potentiel chimique de référence de l'hydrogène (pour une concentration de référence  $C_0$ ).  $R$  est la constant des gaz parfait et  $T$  est la température. L'équation (I.2.6) peut alors se réécrire comme :

$$\mu_H = \mu_0 + RT \ln\left(\frac{C}{C_0}\right) + \bar{V}_H P_H. \quad (I.2.8)$$

Le flux d'hydrogène devient alors

$$\mathbf{J} = -M_L C \nabla \mu_H, \quad (I.2.9)$$

où  $M_L$  est la mobilité de l'hydrogène dans le réseau cristallin (sites interstitiels). En remplaçant (I.2.8) dans (I.2.9), et en posant  $D_L = M_L RT$ , le flux d'hydrogène devient

$$\mathbf{J} = -D_L \nabla C - \frac{D \bar{V}_H}{RT} C \nabla P_H. \quad (I.2.10)$$

## ii. Prise en compte du piégeage de l'hydrogène

Afin de prendre en compte de manière phénoménologique le piégeage de l'hydrogène par des défauts de la microstructure (comme illustré ci-dessus, figure I.1.4), on suppose alors que la population d'hydrogène se décompose en une partie piégée  $C_T$  et une partie diffusif  $C_L$ , avec  $C = C_L + C_T$ . En reprenant les travaux d'Oriani [35], qui suppose que les deux populations sont toujours en équilibre, on peut écrire une relation entre les quantités d'hydrogène piégé et diffusif

$$\frac{\theta_T}{1 - \theta_T} = \frac{\theta_L}{1 - \theta_L} K_T, \quad (I.2.11)$$

où  $\theta_T$  est le taux d'occupation des pièges et  $\theta_L$  est le taux d'occupation des sites interstitiels, et en considérant que  $C_L = N_L \theta_L$  et  $C_T = N_T \theta_T$ .  $N_L$  et  $N_T$  représentent respectivement le nombre de site interstitiels et sites de piégeage par unité de volume du matériau.  $K_T$ , enfin, représente la constante d'équilibre de la réaction de piégeage (supposée instantanée), telle que

$$K_T = \exp(-W_B/RT). \quad (I.2.12)$$

$W_B$  est alors l'énergie de piégeage.

Si l'on considère que la concentration de l'hydrogène interstitiel est faible, c'est-à-dire  $\theta_L \ll 1$  [35], alors l'équation (I.2.11) peut se réécrire comme

$$\frac{\theta_T}{1 - \theta_T} = \theta_L K_T, \quad (I.2.13)$$

et donc, la concentration d'hydrogène dans les sites de piégeage peut être exprimée comme une fonction de la concentration dans les sites interstitiels

$$C_T = \frac{K_T N_T C_L}{N_L + K_T C_L}. \quad (I.2.14)$$

Considérant un volume  $V$  avec la surface  $S$ , la conservation de masse postule que le taux de changement de l'hydrogène dans le volume  $V$  est égal au flux de l'hydrogène passant par  $S$ , c'est-à-dire

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (C_L + C_T) dV + \int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (I.2.15)$$

En reprenant l'équation (I.2.10) pour une diffusion ne concernant que l'hydrogène diffusif  $C_L$ , l'équation I.2.15 devient

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -D_L \nabla C_L + \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) = 0. \quad (I.2.16)$$

Pour prendre en compte l'effet de la déformation plastique sur le piégeage, via l'évolution des sites de piégeage (comme suggéré par les études expérimentales de Kunnick et Johnson sur le fer c.c [8]), on peut écrire, en supposant que le nombre de sites de piégeage peut être exprimé en fonction de la déformation plastique équivalente  $\bar{\epsilon}_p$  [36]

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \frac{\partial C_T}{\partial C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t}, \quad (I.2.17)$$

soit, en utilisant l'équation (I.2.14)

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \frac{C_T(1 - \theta_T)}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t}. \quad (I.2.18)$$

On obtient ainsi l'équation réagissant la diffusion de l'hydrogène dans les sites interstitiels, en prenant en compte le champ de contrainte et le piégeage par les dislocations

$$\frac{C_T(1 - \theta_T) + C_L}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -D_L \nabla C_L - \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t} = 0. \quad (I.2.19)$$

En posant un coefficient de diffusion effectif

$$D_{eff} = \frac{D_L}{\frac{C_T(1 - \theta_T) + C_L}{C_L}} \quad (I.2.20)$$

l'équation devient

$$\frac{D_L}{D_{eff}} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -D_L \nabla C_L - \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t} = 0 . \quad (I.2.21)$$

$D_{eff}$  correspond au coefficient de diffusion apparent de l'hydrogène dans un matériau ; plus  $C_T$  est grand, plus ce coefficient est faible.

Le terme  $\frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t}$  permet de prendre en compte l'influence sur la diffusion de la variation locale du nombre de site de piégeage avec la déformation plastique équivalente.

### iii. Expression de $N_T$

La détermination de la densité de sites de piégeage  $N_T$  peut s'effectuer expérimentalement à partir du dosage de l'hydrogène sur des échantillons déformés plastiquement [8,10], pour obtenir la concentration de l'hydrogène piégé  $C_T$  à différents niveaux de déformation.  $\theta_T$  est déterminé (équation I.2.13) si on connaît le coefficient d'équilibre  $K_T$  ( $W_B$ ) et  $\theta_L$ , et  $N_T$  est déduit de la relation  $C_T = N_T \theta_T$ . A partir de données discrètes de  $N_T$  en fonction de la déformation, des expressions analytiques pour  $N_T$  en fonction de la déformation plastique ont été proposées.

Basé sur les résultats expérimentaux de Kumnick et Johnson [8] pour fer pur, Sofronis et McMeeking [37] ont proposé une expression qui relie densité de sites de piégeage  $N_T$  et la déformation plastique équivalente :

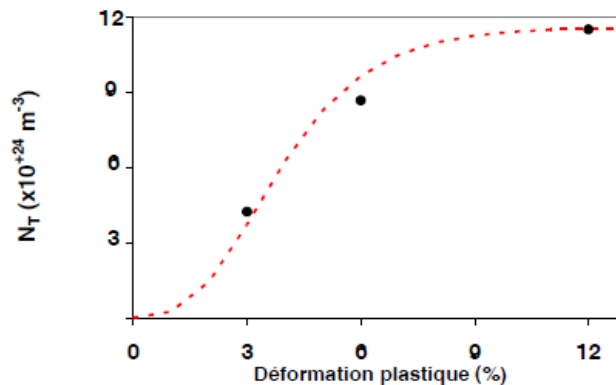
$$N_T = 10^{(23,26 - 2,33e^{-5,5\bar{\epsilon}_p})} . \quad (I.2.22)$$

Cette expression correspond à l'énergie de piégeage  $W_B = -60$  kJ/mol.

Moro [10] a estimé pour l'acier X80 la valeur de  $N_T$  en considérant deux énergies de piégeage :  $W_B = -40$  kJ/mol (figure I.2.1) correspondant au piégeage au cœur de dislocations coin et  $W_B = -20$  kJ/mol pour le piégeage dans l'atmosphère de Cottrell d'une dislocation coin. Les expressions de  $N_T$  sont données respectivement pour 2 valeurs de  $W_B$  :

$$N_T = 10^{(25,06 - 2,06e^{-60,8\bar{\epsilon}_p})} , \quad (I.2.23)$$

$$N_T = 10^{(27,87 - 5,876e^{-90,93\bar{\epsilon}_p})} . \quad (I.2.24)$$



**Figure I.2.1.** L'évolution de  $N_T$  avec la déformation plastique pour  $W_B = -40$  kJ/mol ; en noir les points expérimentaux et en pointillé la fonction  $N_T$  [10].

### I. 2. b. Interactions entre le comportement mécanique et l'hydrogène

Sofronis et al. [34], pour fournir une description continue de l'effet d'adoucissement « local » basé sur la mobilité de dislocation induite par l'hydrogène, ont proposé d'introduire dans la loi l'écroutissage du matériau la variation de la limite d'élasticité avec la concentration en l'hydrogène

$$\sigma_y = \sigma_0^H(C) \left( 1 + \frac{\bar{\varepsilon}_p}{\varepsilon_0} \right)^{1/n}, \quad (I.2.25)$$

où  $\sigma_0^H(C)$  est la limite élastique avec une concentration  $C$  d'hydrogène.  $\varepsilon_0$  et  $n$  sont des paramètres d'écroutissage. La limite d'élasticité est liée à la concentration d'hydrogène par

$$\sigma_0^H = \phi(C)\sigma_0, \quad (I.2.26)$$

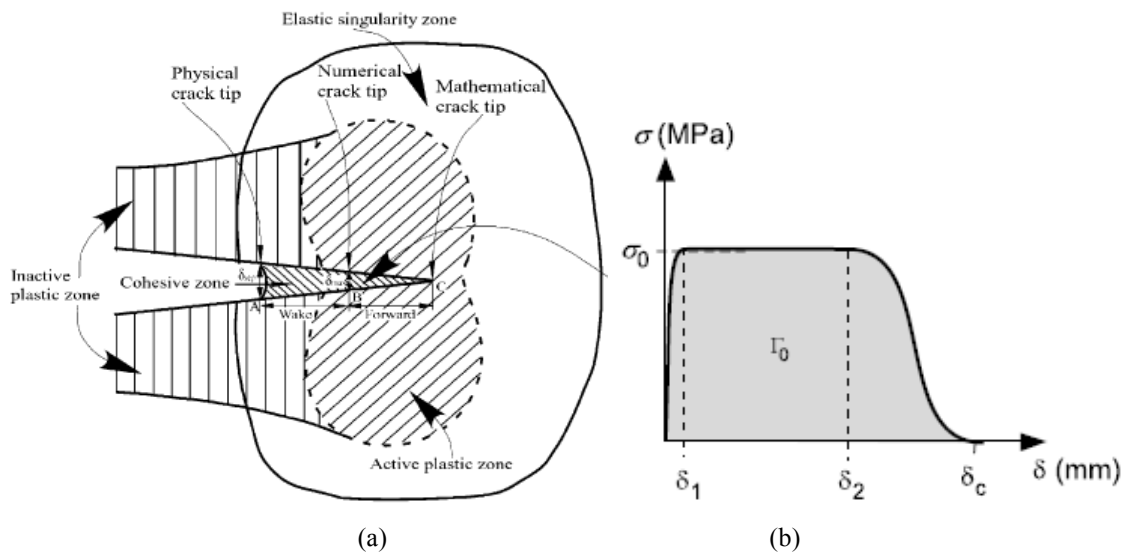
où  $\sigma_0$  est la limite élastique en l'absence d'hydrogène, et  $\phi(C)$  est postulé comme une fonction linéaire décroissante de la concentration de l'hydrogène telle que [34]

$$\phi(C) = (\xi - 1)C + 1. \quad (I.2.27)$$

$\xi$  est un paramètre phénoménologique [38] caractérisant la réduction maximale de limite élastique due à la présence d'hydrogène

Ce modèle est à la connaissance de l'auteur le seul proposé dans la littérature qui permet de prendre en compte l'influence de l'hydrogène sur la limite d'élasticité à l'échelle du milieu continu.

### I. 2. c. Modélisation de la fragilisation par l'hydrogène



**Figure I.2.2.** (a) « Process zone » cohésive [44] et (b) exemple de loi traction-séparation pour une rupture ductile [45].

Pour modéliser le phénomène de fragilisation par l'hydrogène, et en particulier dans les simulations éléments finis, il est nécessaire de disposer d'outils permettant d'introduire l'amorçage et la propagation de fissures dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Cela peut donc concerner les solutions analytiques pour un problème de fissuration en élasticité apportées par Westergaard [39], les modèles micromécaniques, le modèle de Gurson

(pour la rupture ductile) [40] ; ou les modèles de zone cohésive [41-43], largement utilisés dans la littérature pour modéliser la fragilisation.

Les modèles cohésifs offrent la possibilité de modéliser l'amorçage et la propagation de fissures dans des modèles éléments finis. Ce sont des éléments finis surfaciques, insérés entre deux éléments standard, dont la loi de comportement est celle d'un ressort (très rigide) endommageable (figure I.2.2.b) qui conditionne l'ouverture de l'interface  $\delta$  (figure I.2.2.a).

La surface sous la courbe  $\sigma$ - $\delta$  représente l'énergie de création d'une surface de fissure unitaire  $\Gamma_0=(2\gamma)_0$ , qui est égale au taux de restitution d'énergie critique  $G_c$  nécessaire à la création de la fissure [46]. En fonction du problème traité, les lois cohésives peuvent être bilinéaire, polynômiale, etc...[44,47].

Cette approche a été utilisée pour modéliser différents problèmes de fragilisation par l'hydrogène (par exemple [3,25,48-50]). Dans tous ces travaux, la loi de comportement cohésive est modifiée par la concentration locale en hydrogène, et plus particulièrement la valeur de la contrainte de cohésion maximale  $\sigma_0$ .

### ***1. 3. Simulations numériques du couplage hydrogène-matériau***

De nombreux travaux [37,51] ont utilisé des configurations modèles pour traiter les interactions entre la diffusion et les champs mécaniques, que le but soit de tester numériquement des modèles théoriques, ou pour évaluer des grandeurs nécessaires à la prédiction de la fiabilité de structures plus complexes. Les simulations numériques faisant intervenir le couplage entre diffusion et champ mécanique sur des structures macroscopiques (généralement des éprouvettes d'essais mécaniques) concernent souvent des problèmes de rupture et utilisent des éléments cohésifs, dont la loi de comportement dépend de l'hydrogène, et qui ne seront ici que brièvement abordés. On considère d'abord les simulations effectuées avec un comportement isotrope, puis celles qui prennent en compte l'aspect cristallin. On s'intéresse notamment à la manière dont a été prise en compte le couplage entre diffusion et champs mécaniques dans ces simulations. Selon les problèmes traités, la plasticité est soit uniquement confinée en fond d'entaille, soit concerne l'ensemble de la structure considérée.

#### *1. 3. a. Simulations numériques dans le cadre du comportement isotrope*

##### *i. Small Scale Yielding (plasticité confinée)*

La plus utilisée de ces configurations permet d'étudier les phénomènes en pointe de fissure soumise à un facteur d'intensité des contraintes contrôlé. Cette configuration, appelée 'small scale yielding' (SSY), confine les zones de forte déformation au voisinage de la pointe de fissure, considérée comme une entaille de rayon très petit. La configuration d'un problème 'SSY' est présentée figure I.3.1. La structure est un demi-disque entaillé chargé en déplacement, et avec des conditions de symétrie sur un rayon (en déplacement et flux d'hydrogène).

Le déplacement imposé est fonction du facteur d'intensité des contraintes que l'on souhaite imposer au voisinage de l'entaille, dont les dimensions caractéristiques sont bien inférieures à celle du demi-disque. Sur les bords de l'entaille, de même que sur les bords extérieurs du demi-disque, la concentration en hydrogène imposée dépend du problème traité ; il en est de même pour les conditions initiales.

ii. Couplage diffusion-champs mécaniques en SSY

En 1989, Sofronis et McMeeeking [37] ont étudié la diffusion de l'hydrogène assistée par la pression hydrostatique et la déformation plastique (à travers le piégeage) au voisinage d'une pointe de fissure émoussée (figure I.3.1).

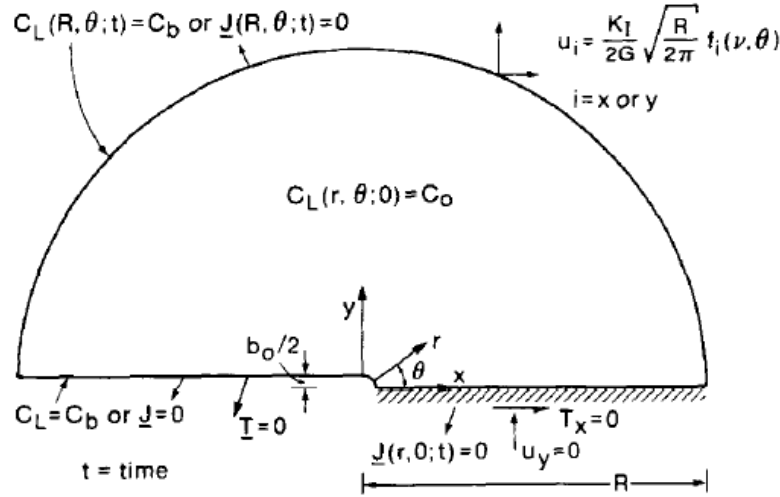


Figure I.3.1. La géométrie et les conditions aux limites utilisées [37].

Sur les bords extérieurs et les lèvres de la fissure, on impose une concentration d'hydrogène diffusif  $C_0$ , ou un flux nul d'hydrogène.

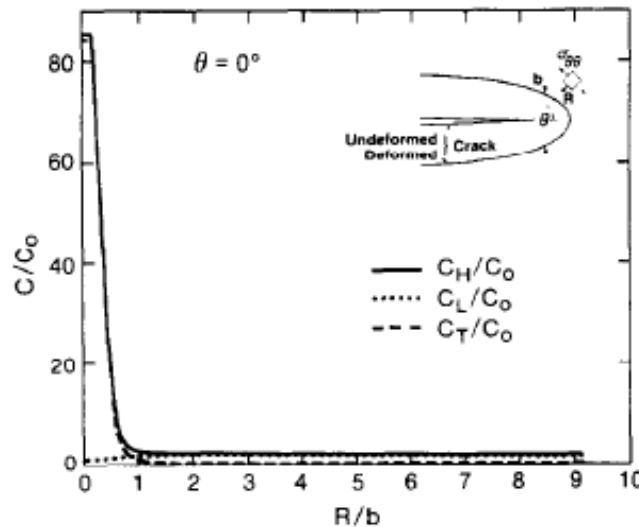


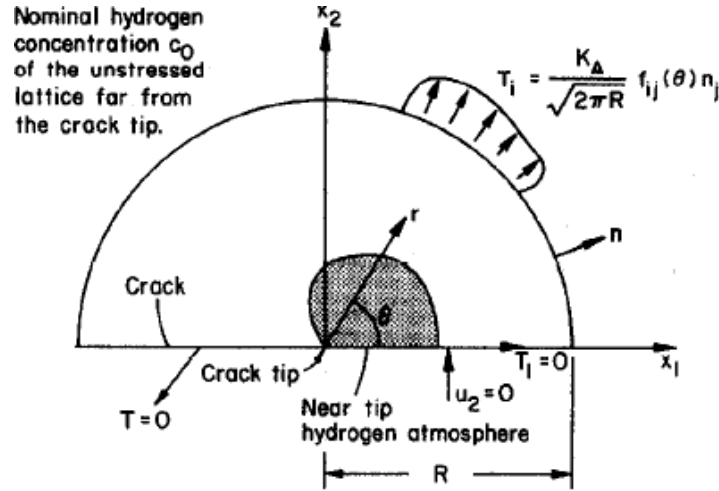
Figure I.3.2. Répartition de l'hydrogène diffusif normalisé  $C_L/C_0$ , de l'hydrogène piégé  $C_T/C_0$  et de l'hydrogène total  $C/C_0$  en avant de la fissure ( $R=0$  correspond à la pointe de l'entaille) [37].

La concentration totale de l'hydrogène est ici décomposée en la concentration de l'hydrogène diffusif  $C_L$  et celle de l'hydrogène piégé  $C_T$ . La concentration de l'hydrogène diffusif est fonction de la pression hydrostatique. L'équation qui caractérise la diffusion de  $C_L$  est similaire à l'équation I.2.19, mais le terme  $\theta_r \frac{dN_T}{d\epsilon_p} \frac{\partial \epsilon_p}{\partial t}$  donnant l'évolution de la densité de

pièges  $N_T$  avec la déformation plastique est négligé. La résolution de ce problème a été effectuée grâce un code élément finis développé par les auteurs.

Les résultats ont montré la prédominance de l'hydrogène piégé par rapport à l'hydrogène diffusif. Ceci est prévisible comme la concentration de l'hydrogène piégé dépend de la densité de piège  $N_T$  reprise dans l'équation I.2.19.

En 1996, Lufrano et al. [51] ont utilisé une configuration SSY pour analyser le couplage entre hydrogène et déformation en pointe de fissure (figure I.3.3).



**Figure I.3.3.** Schématisation du problème de la répartition de l'hydrogène autour d'une fissure semi-infinie soumise à un mode I ( $K_A$  représente le facteur d'intensité en mode I) [51].

L'hydrogène est supposé créer une déformation résiduelle dans le matériau. Le taux de cette déformation est formulé par :

$$D_{ij}^H = \delta_{ij} d \left\{ \ln \left[ 1 + (c\Delta v) / 3\Omega \right] \right\} / dt . \quad (I.3.1)$$

où  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecher,  $c$  est la concentration totale de l'hydrogène mesuré en H/M,  $\Delta v$  est le changement du volume par l'introduction d'un atome d'hydrogène et  $\Omega$  le volume moyen d'un atome métallique.

L'hydrogène modifie les paramètres mécaniques tels que le module de cisaillement  $G$  et le module d'élasticité isostatique  $K$ . Ces paramètres sont supposés varier en fonction de la concentration d'hydrogène  $c = (C_T + C_L) / N_L$  (mesuré H/M, cette notation est gardée dans la suite) comme suit (unité en GPa)

$$G = -9,8c + 40,9 ; \quad (I.3.2)$$

$$K = 169,6 + 10,4c. \quad (I.3.3)$$

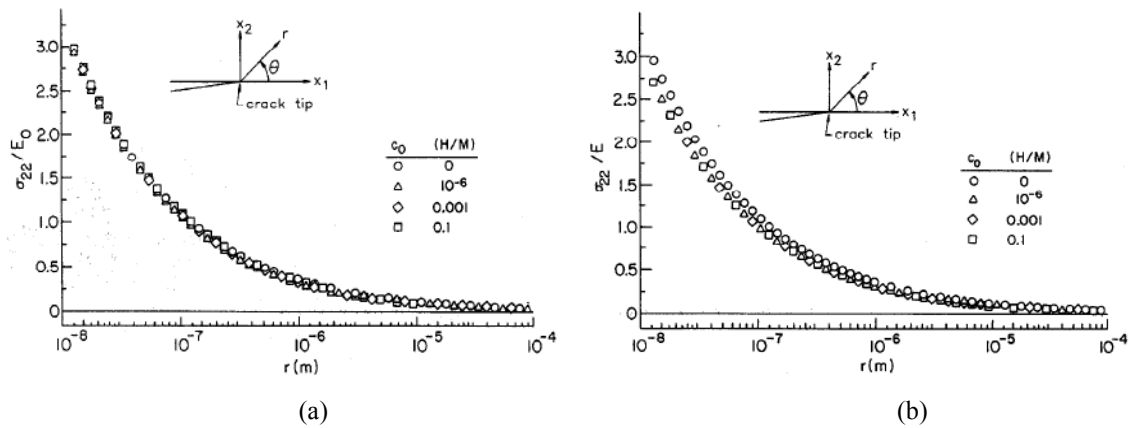
Le matériau considéré est le niobium, dont le comportement est supposé élastique isotrope. La concentration initiale de l'hydrogène est  $c_0$  (H/M) partout.

La diffusion de l'hydrogène est considérée en régime permanent, et la concentration locale d'hydrogène est calculée en utilisant la forme statistique de Fermi-Dirac [52] qui permet d'obtenir l'évolution du taux d'occupation  $\theta_L$  en fonction de sa valeur initiale  $\theta_L^0$  et du chargement mécanique local

$$\frac{\theta_L}{1 - \theta_L} = \frac{\theta_L^0}{1 - \theta_L^0} \exp \left( - \frac{P_H \bar{V}_H}{RT} \right). \quad (I.3.4)$$

Ce problème a été résolu dans un code élément fini développé par les auteurs.

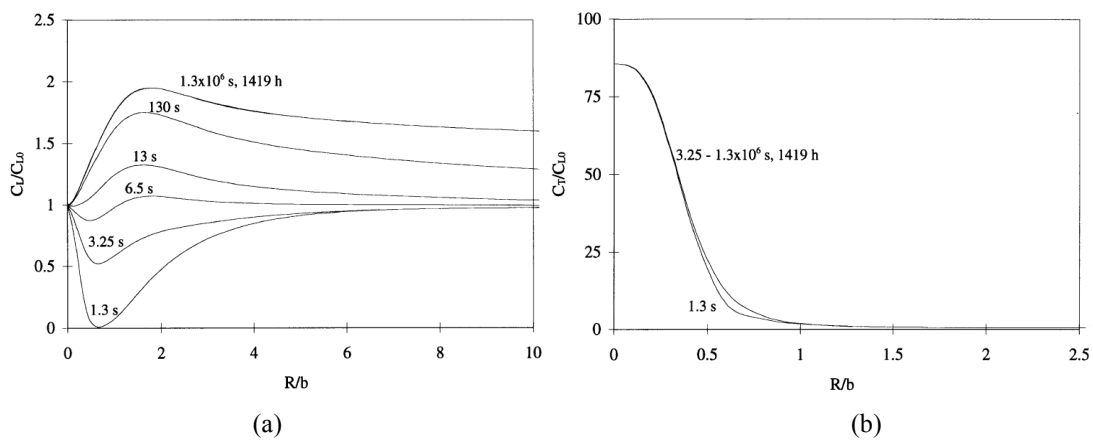




**Figure I.3.4.** Variation de la contrainte  $\sigma_{22}$  en fonction de la distance  $r$  devant la fissure à  $\theta=0$ , pour  $K_A=1000 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$  (a) sans et (b) avec effet de l'hydrogène sur le module élastique.

Deux séries de calculs ont été effectuées,  $G$  et  $K$  étant considérés ou non indépendants de  $c$ . Les résultats ont montré que, si  $G$  et  $K$  sont pris indépendants de  $c$ , le champ de contrainte obtenu devant la fissure est indépendant de la concentration initiale d'hydrogène  $c_0$  (figure I.3.4a). Si  $G$  et  $K$  sont pris dépendants de  $c$ , on observe une saturation de l'hydrogène devant la fissure. Le champ de contrainte devant la fissure diminue à cause de l'adoucissement du module  $G$  (figure I.3.4b) en présence d'hydrogène : en effet, quand le module  $G$  varie, l'intégrale  $J$  varie aussi [53] et donc le facteur d'intensité de contrainte local  $K_t$  dans la zone saturée en hydrogène.

Le travail de Sofronis [37] a été repris et amélioré en 1999 par Krom et al. [36], qui ont inclus dans les calculs SSY de  $N_T$  la variation avec la déformation plastique.



**Figure I.3.5.** La répartition de (a) l'hydrogène diffusif et (b) de l'hydrogène piégé normalisés pour différentes vitesses de chargement [36].

La configuration et les conditions limites sont identiques à de Sofronis. Ce problème a été traité dans le code éléments finis MSC.Marc [54].

Les résultats ont permis de conclure que l'augmentation de la vitesse de déformation réduit la concentration de l'hydrogène interstitiel mais n'affecte quasiment pas la concentration en hydrogène piégé (voir figure I.3.5).

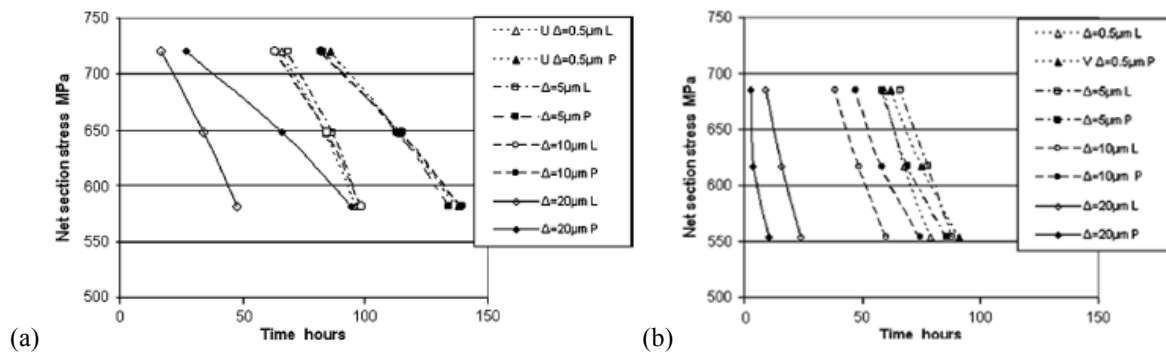
Les travaux de Oh et al. [55] ont pour but d'implémenter la résolution de l'équation I.2.19 dans le code d'éléments finis Abaqus. Le problème de Krom [36] a été repris pour la validation de l'implémentation.

iii. Fissuration dans des éprouvettes entaillées

Olden et al. [49] ont analysé l'endommagement induit par l'hydrogène dans des éprouvettes entaillée en U et V (« U-V notch tensile test ») d'acier duplex à 25% Cr, soumise à un essai de traction. Le comportement du matériau est élastoplastique. Une concentration de 1 ppm-masse (partie par million massique) d'hydrogène est imposée dans le volume de l'éprouvette, et de 10 ppm-masse est imposée sur les bords externes.

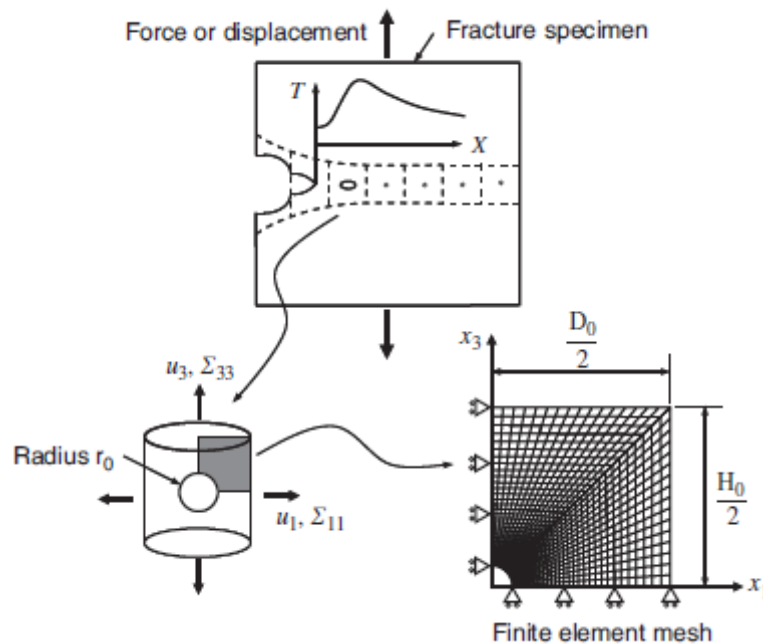
Dans ce travail, l'auteur ne considère pas le piégeage de l'hydrogène, mais seulement la pression hydrostatique dans l'équation de diffusion (équation I.2.3). L'initiation de la rupture est décrite en utilisant un modèle de zone cohésive, avec une contrainte critique  $\sigma_c(\theta)$  dépendante du taux de recouvrement d'hydrogène  $\theta$ .

La simulation est effectuée dans le code élément finis Abaqus. Les résultats sur le temps nécessaire à l'amorçage de fissure sont montrés sur la figure I.3.6.



**Figure I.3.6.** Temps à l'initiation de la fissure en fonction du niveau de contrainte pour (P) une loi traction-séparation polynômiale et (L) linéaire et pour différentes taille d'éléments  $\Delta$ , avec (a) une éprouvette entaillée en U et (b) une éprouvette entaillée en V [49].

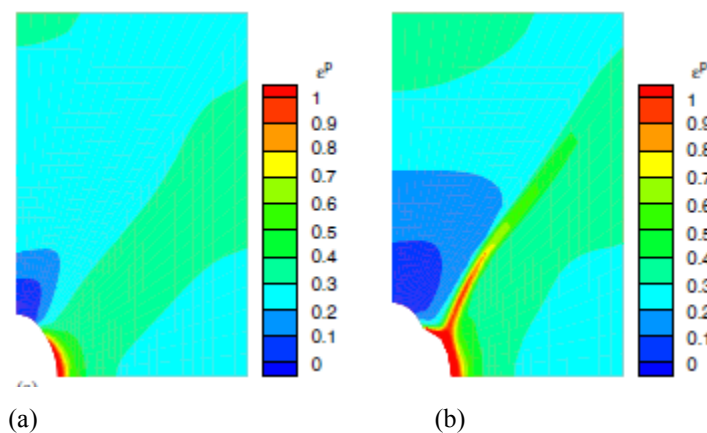
iv. Couplage diffusion-champs mécaniques dans une cellule unitaire avec cavité sphérique.



**Figure I.3.7.** Configuration et les conditions aux limites pour le problème [58].

Ahn et al. [58] ont étudié par la simulation l'effet de l'hydrogène sur la localisation de la plasticité durant la croissance et coalescence de vides pour l'acier A 533 B. La configuration simulée constitue une cellule unitaire axisymétrique contenant une cavité sphérique, comme illustré dans la figure I.3.7. Le chargement est contrôlé pour avoir une triaxialité  $T$  (rapport entre la contrainte équivalente et la contrainte moyenne) fixée.

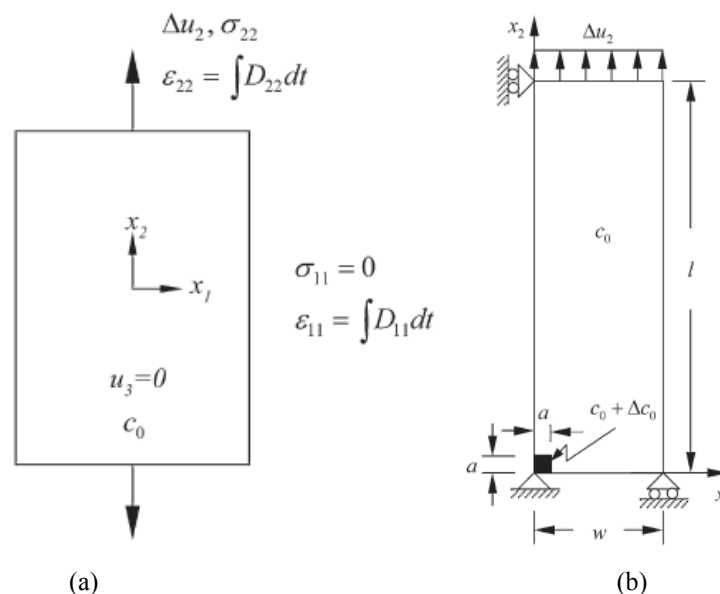
Le comportement du matériau est supposé élastoplastique isotrope, avec une limite élastique qui dépend de la concentration de l'hydrogène (équations I.2.25-27). La dilatation du matériau par l'hydrogène est décrite dans l'équation (I.3.1). La concentration de l'hydrogène est déterminée en utilisant la forme Fermi-Dirac (équation I.3.4). La résolution du problème a été implémentée dans une procédure UMAT du code éléments finis Abaqus. Les résultats obtenus ont montré la localisation d'une bande de plasticité pour la triaxialité  $T=1$  (figure I.3.8). Par contre, pour la triaxialité  $T=3$ , aucune localisation de la plasticité n'a été observée.



**Figure I.3.8.** Distribution de la déformation plastique équivalente pour la déformation macroscopique  $E_e=0,3$  pour la triaxialité  $T=1$  (a) en absence de l'hydrogène et (b) pour la concentration d'hydrogène  $c_L^0$  initiale  $2,4637 \times 10^{-8}$  H/M [58].

Liang et al. [59] ont effectué une étude similaire pour le niobium.

#### v. Couplage hydrogène-champs mécaniques traction

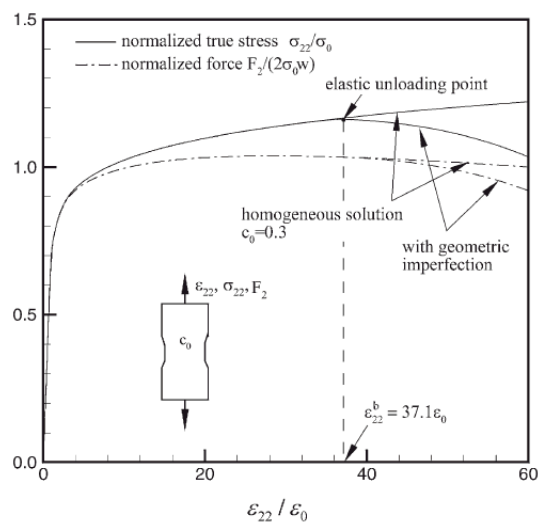


**Figure I.3.9.** Configurations étudiées : (a) échantillon avec une concentration initiale d'hydrogène diffusif homogène et (b) échantillon avec une répartition initiale d'hydrogène perturbé dans une petite zone [60].

Liang et al. [60] se sont intéressés à l'influence de l'hydrogène sur l'apparition de la striction dans un échantillon en traction préchargé en hydrogène, avec ou sans hétérogénéité initiale de concentration d'hydrogène (figure I.3.9).

L'effet de l'hydrogène sur l'adoucissement de limite d'élasticité est pris en compte (équations I.2.25 à I.2.27) et la dilatation volumique par l'hydrogène (équation I.3.1) est considérée. La diffusion de l'hydrogène est déterminée en régime permanent et la concentration de l'hydrogène est calculée par une statistique de Fermi-Dirac (équation I.3.4). Le problème est implémenté dans une procédure UMAT du code de calcul par éléments finis Abaqus.

Les résultats montrent que la présence d'hydrogène diminue le module d'écroutissage et rend plus précoce l'instabilité plastique, et que la présence d'une surconcentration localisée d'hydrogène facilite davantage l'apparition de la striction (figure I.3.10).



**Figure I.3.10.** La contrainte macroscopique normalisée et la force normalisée en fonction de la déformation macroscopique pour la configuration homogène et pour la configuration perturbée [60].

Miresmaeli et al. [61] ont traité le même problème, en reprenant le modèle de Liang et al. [60], mais en négligeant la déformation de dilatation (équation I.3.1) due à l'hydrogène, et en considérant une diffusion d'hydrogène en régime transitoire. Ils ont ensuite observé l'évolution des distributions d'hydrogène total ou piégé avec le développement de la striction. Cette étude a été réalisée dans le code éléments finis MSC.Marc.

#### vi. Couplage diffusion-pression hydrostatique dans un tube fissuré

Takayama et al. [62] ont analysé l'effet de la diffusion de l'hydrogène dans un tuyau pré-fissuré soumis à une pression interne (figure I.3.11). Une concentration d'hydrogène constante ou un flux d'hydrogène nul est prescrit comme conditions aux limites.

Dans cette étude, l'adoucissement du matériau assisté par l'hydrogène (équations I.2.25 à I.2.27) est négligé. L'équation de diffusion de l'hydrogène est l'équation I.2.19. La résolution de ce problème est effectuée dans le code d'élément finis MARC. La diffusion de l'hydrogène est considérée en régime permanent.

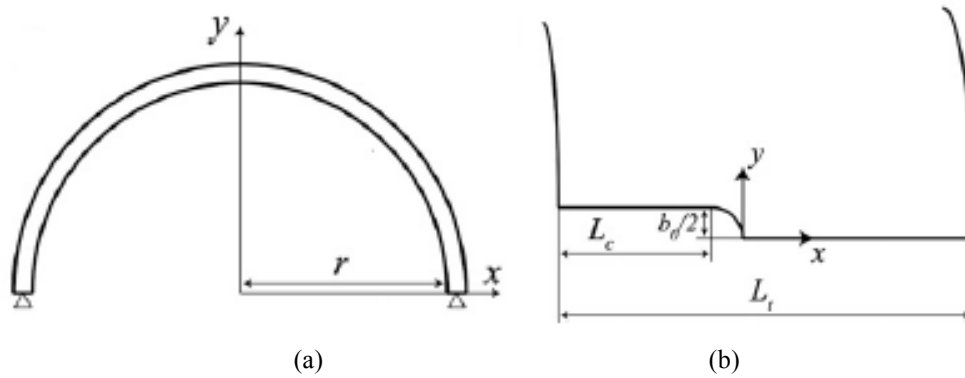


Figure I.3.11. (a) La géométrie du tuyau et (b) agrandissement de la zone préfissurée [62].

La figure I.3.12 montre le profil de la concentration de l'hydrogène diffusif dans le cas d'une pression  $P=40$  MPa, avec un flux nul d'hydrogène imposé sur les bords. Ce profil de la concentration de l'hydrogène correspond bien à la distribution de la pression hydrostatique, ce qui est attendu, car la diffusion de l'hydrogène est pilotée par celle-ci.

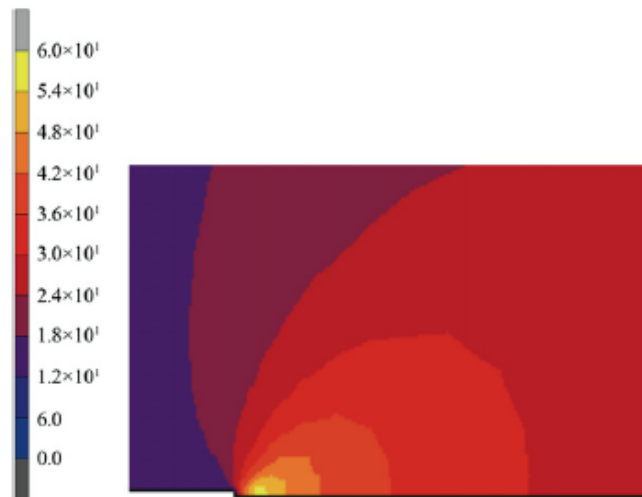


Figure I.3.12. Distribution de la concentration d'hydrogène diffusif normalisée par la concentration initiale d'hydrogène  $C_1/C_0$  [62].

vii. Simulation de l'essai de disque jusqu'à rupture

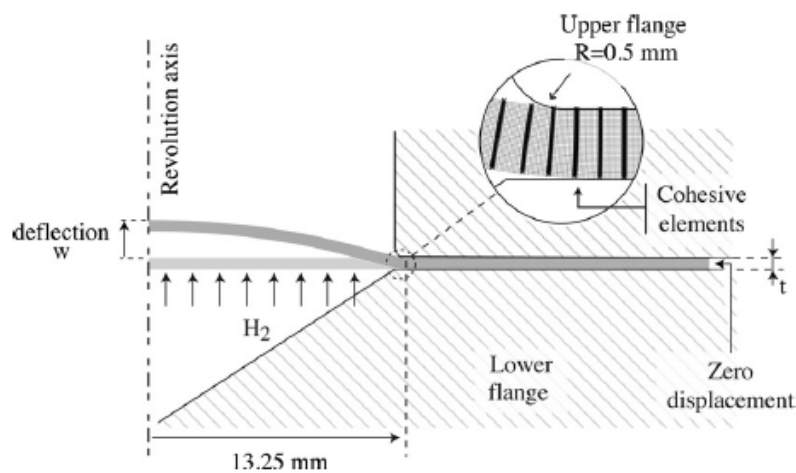
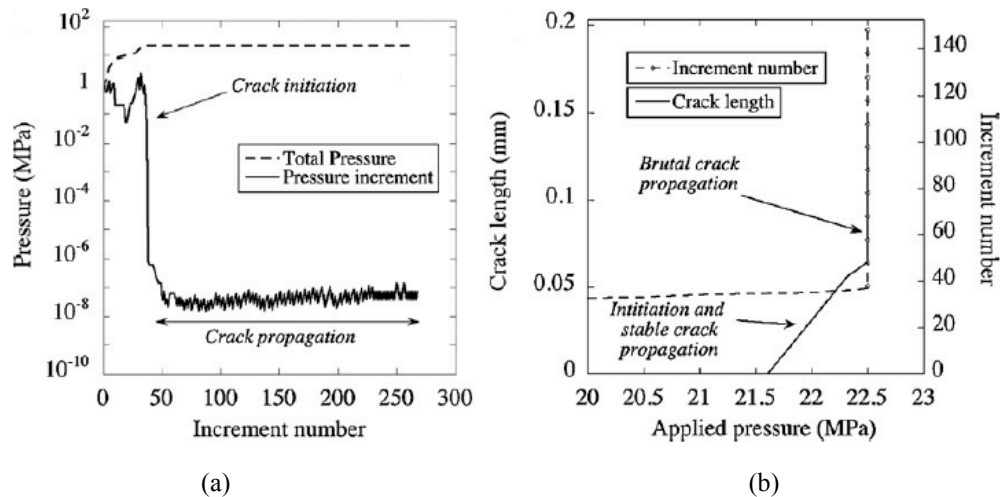


Figure I.3.13. (a) Configuration, conditions aux limites dans la simulation de l'essai de disque [25].

Charles et al. [25] ont étudié la fissuration induit par l'hydrogène par la simulation de l'essai de disque (figure I.3.13). L'éprouvette en acier ou Inconel est déformée par la pression de l'hydrogène gazeux jusqu'à la fissuration.

La diffusion de l'hydrogène dans ce travail est décrite par la loi de Fick (équation I.2.1). Le comportement de matériau est élastoplastique avec une loi d'écrouissage de Voce. Un modèle de zone cohésive est utilisé pour modéliser l'initiation et la propagation de la fissure dans l'éprouvette. Dans ce modèle, la contrainte critique  $\sigma_c(\theta)$  est rendue dépendante linéairement du taux de recouvrement de l'hydrogène  $\theta$ .

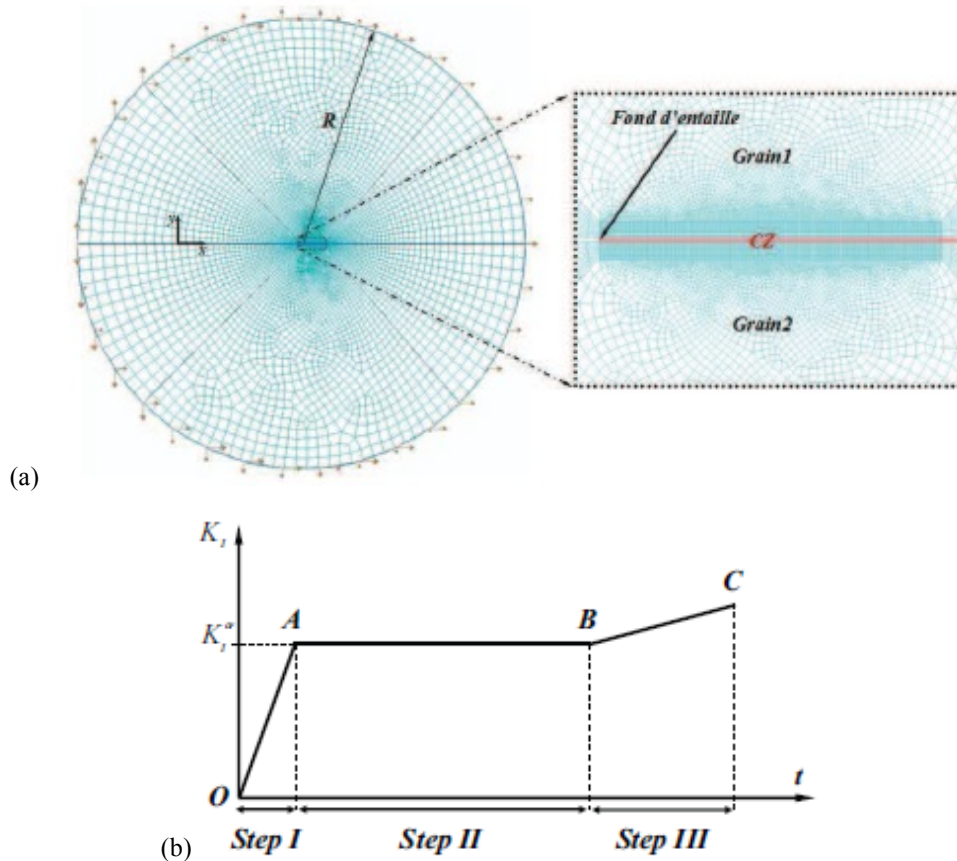
L'initiation et la propagation de la fissure sont montrées sur la figure I.3.14.



**Figure I.3.14.** (a) Détection de l'initiation de la fissure et (b) position de la pointe de fissure en fonction de la pression d'hydrogène appliquée.

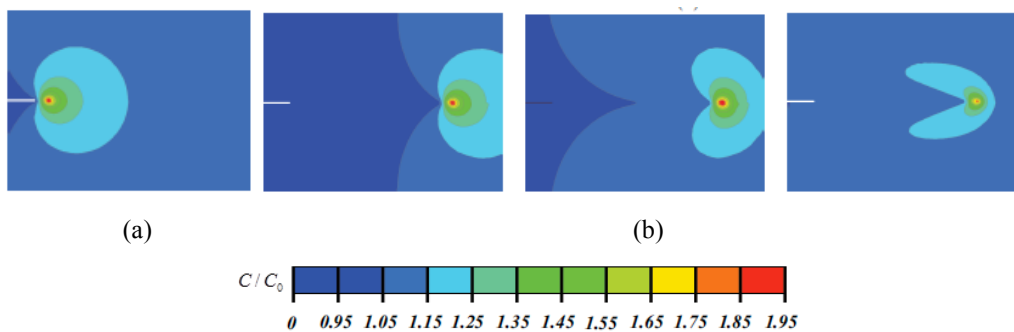
### I. 3. b. Simulations numériques et hydrogène à l'échelle du polycristal

Ben Ali en 2011 [56] a étudié la fissuration fragile assistée par l'hydrogène dans un alliage d'aluminium de la série 7000, et plus particulièrement, la compétition entre la vitesse de la propagation de la fissure et la diffusion de l'hydrogène, en considérant une rupture intergranulaire. Ce travail a la particularité d'intégrer dans un calcul SSY le fait qu'il y ait plusieurs grains (deux grains), et donc réalise un couplage hydrogène-champ mécanique à l'échelle d'un polycristal. Le comportement des grains est supposé élastique. Des éléments cohésifs sont utilisés en amont de l'entaille (ligne rouge dans figure I.3.15), afin de permettre une propagation de fissure [57] : un chargement mécanique est imposé jusqu'à l'amorçage de la fissure  $K_I = K_I^{cr}$  (step I). Ensuite, le chargement mécanique est maintenu pour que la concentration de l'hydrogène se stabilise (à l'équilibre, step II). Dans l'étape III, on augmente  $K_I$  en contrôlant la vitesse de la propagation de fissure par  $\dot{K}_I$  jusqu'à ce que la pointe de la fissure parcoure la longueur d'une zone cohésive (après un temps  $t_{cz}$ ). Les champs mécaniques issus d'un calcul de propagation sont ensuite utilisés pour analyser la diffusion de l'hydrogène assistée par la pression hydrostatique; l'auteur ne distingue pas ici la concentration d'hydrogène diffusif de celle d'hydrogène piégé.



**Figure I.3.15.** (a) Configuration étudiée d'une fissure intergranulaire (b) chargement mécanique [56]. Le trait rouge noté 'CZ' représente une ligne cohésive.

La répartition de l'hydrogène est présentée dans la figure I.3.16 pour différentes vitesses de propagation de fissure. Les résultats montrent que plus la vitesse de la propagation de fissure est importante, plus la concentration de l'hydrogène diminue en pointe de fissure.

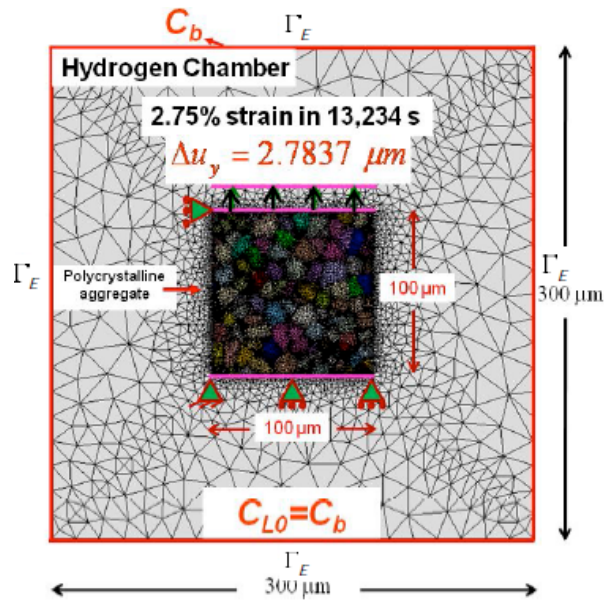


**Figure I.3.16.** Répartition de l'hydrogène (a) à l'équilibre (fin step II) et (b) à la fin du step III pour des vitesses de propagation de fissure de  $10^{-6}$ ,  $15 \cdot 10^{-4}$  et  $75 \cdot 10^{-4}$  mm/s [57].

Cela est dû à la compétition entre le temps nécessaire pour que la diffusion de l'hydrogène soit en régime permanent, et le temps  $t_{cz}$ . Plus la vitesse de fissuration est importante, moins la rupture est assistée par l'environnement car la concentration d'hydrogène est moins importante en pointe de fissure.

Miresmaeli et al. [63] ont effectué une étude numérique sur l'influence du champ mécanique sur la diffusion de l'hydrogène dans une structure cristalline virtuelle, censée représenter un acier austénite 316L. La structure retenue est une partition de Voronoi 2D. Les conditions aux limites imposées sont présentées dans la figure I.3.17.

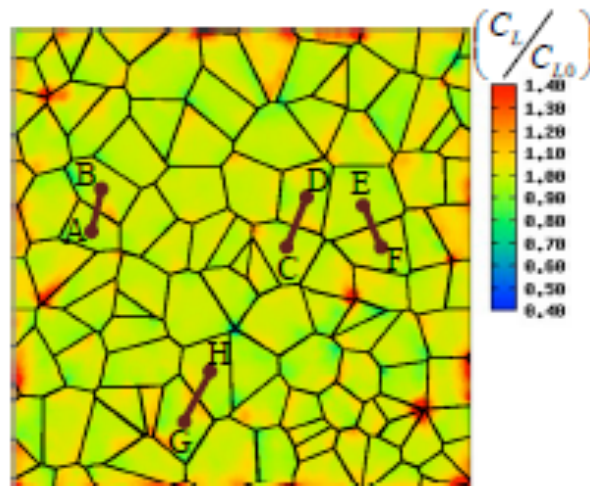




**Figure I.3.17** Configuration et conditions aux limites du problème [63].

Un modèle de plasticité cristalline basé sur la formulation de l'écroutissage proposé par Cailletaud [64] a été utilisé pour le comportement du matériau; ce comportement est implémenté dans le code élément fini Zebulon.

L'équation I.2.19 est utilisée pour analyser la diffusion de l'hydrogène. L'interaction entre la plasticité et la diffusion de l'hydrogène a été introduite en effectuant le calcul mécanique, puis en utilisant les champs mécaniques calculés pour effectuer un calcul de diffusion couplé dans un code élément fini développé par les auteurs.



**Figure I.3.18.** La concentration de l'hydrogène diffusif dans la structure polycristalline [63].

La figure I.3.18 montre la concentration de l'hydrogène diffusif à la fin du chargement mécanique. On remarque que l'hydrogène diffusif s'accumule au voisinage des joints de grains, à cause d'un champ de contrainte important lié aux concentrations de contraintes et aux incompatibilités de déformation entre grains.

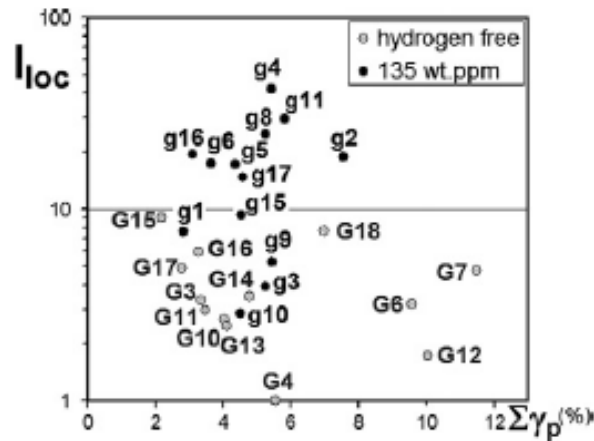
Afin d'étudier le lien entre plasticité cristalline et hydrogène, Aubert et al. [65] ont étudié la localisation de la plasticité dans un acier 316L, déformé en traction (jusqu'à 3,5 %) sans et en présence d'hydrogène, défini à 135 ppm-masse en préchargement. Une mesure par un microscope à force atomique (AFM) a permis d'obtenir la hauteur de bandes de glissement en



surface, et la distance entre ces bandes dans chaque grain. Les moyennes de ces hauteurs  $h_g$  et de ces surfaces  $s_g$  sont utilisées pour déterminer un critère de localisation de la plasticité :

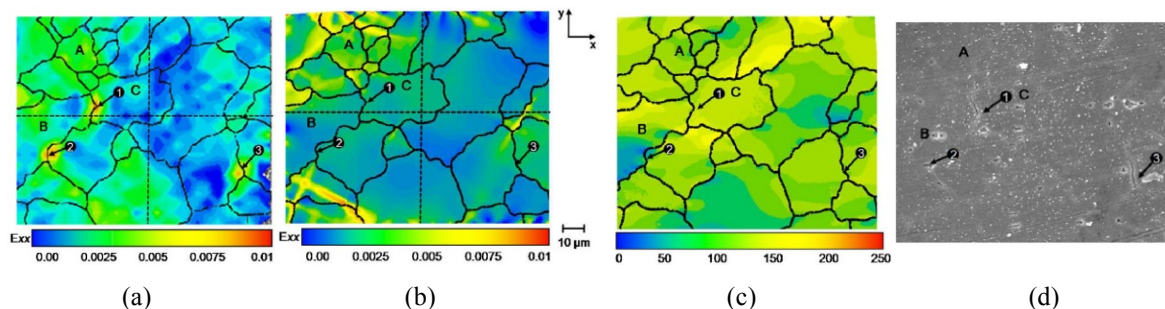
$$I_{loc} = \frac{h_g s_g}{(h_g s_g)_{\min}}, \quad (I.3.5)$$

où  $(h_g s_g)_{\min}$  est la valeur minimale de  $h_g s_g$  dans l'agrégat. Plus  $I_{loc}$  est grand, plus la localisation de la plasticité est importante.



**Figure I.3.19.**  $I_{loc}$  en fonction du glissement cumulé  $\gamma$  en absence et en présence d'hydrogène [65].

Le glissement cumulé  $\gamma$  du système de glissement le plus actif est calculé dans chaque grain par une simulation éléments finis basée sur un modèle de plasticité cristalline, mais sans prendre en compte la diffusion de l'hydrogène. La microstructure est modélisée à partir d'une image EBSD. Ces valeurs  $\gamma$  et celles de l'indice  $I_{loc}$ , pour chaque grain, sont corrélées afin d'estimer l'influence du glissement plastique  $\gamma$  sur la localisation de la plasticité. Les résultats ont montré que, pour une même valeur de  $\gamma$ , les valeurs de  $I_{loc}$  dans les grains de l'échantillon hydrogéné sont de 3 à 10 fois plus grandes que celles dans l'échantillon sans l'hydrogène (figure I.3.19), ce qui montre que l'hydrogène favorise la localisation de la plasticité.



**Figure I.3.20.** (a) Observation et (b) simulations du champs de déformation axiale  $\varepsilon_{xx}$  dans la direction  $x$ . (c) Champs de contrainte calculé pour 0,45 % de déformation macroscopique et (d) micrographie de la zone étudiée (avec indication des fissures) [66].

Pouillier et al. [66] ont étudié l'influence de la plasticité sur l'amorçage de la fissure intergranulaire en présence d'hydrogène dans un alliage d'aluminium. Des essais de traction ont été effectués sur des échantillons préchargés en hydrogène. Le champ de déformation a été obtenu par corrélation d'image. Ensuite, une simulation par éléments finis a été effectuée avec un modèle de plasticité cristalline basé sur la mécanique des densités de dislocations [67], avec une microstructure modélisée à partir de l'image EBSD, puis validée par comparaison avec les mesures.

Le champ de contrainte calculé sur les joints de grains où les fissures sont observées permet d'estimer que la fissuration est due à une traction normale au joint de grains de l'ordre de 120 MPa.

Dans les exemples cités précédemment [65,66] les techniques expérimentales sont souvent utilisées pour étudier l'influence de l'hydrogène sur la déformation plastique calculée par les simulations utilisant la plasticité cristalline. Il n'existe pas vraiment une implémentation complète du couplage diffusion de l'hydrogène-champs mécaniques et encore moins la résolution simultanée de ce couplage.

#### ***1. 4. Conclusion***

Dans ce chapitre, a été fait un aperçu de résultats expérimentaux concernant les interactions entre l'hydrogène et les comportements du matériau, particulièrement entre la plasticité et la diffusion de l'hydrogène. Quelques grandes lignes en sont déduites :

- l'hydrogène s'introduit dans le matériau par le chargement gazeux ou chargement cathodique. Une fois absorbé, on peut distinguer deux populations d'hydrogène : l'hydrogène diffusif et l'hydrogène piégé, de manière irréversible ou non, dans les défauts du matériau comme les dislocations;
- l'hydrogène dilate le réseau cristallin et donc interagit avec la pression hydrostatique. L'hydrogène se diffuse préférentiellement vers les sites interstitiels en état de contrainte moyenne positive (de pression hydrostatique négative). L'hydrogène diffuse dans les sites interstitiels par le gradient de la concentration d'hydrogène et de pression hydrostatique;
- l'hydrogène facilite le mouvement de dislocations et les dislocations peuvent transporter l'hydrogène.

Les modèles de diffusion de l'hydrogène disponibles dans la littérature sont tous basés sur la même équation générale, dans lequel la concentration d'hydrogène diffusif est pilotée par son gradient de concentration et par celui de la pression hydrostatique. De plus, une partition de la concentration d'hydrogène dans le matériau entre hydrogène diffusif et hydrogène piégé est considérée, basée sur l'hypothèse d'équilibre thermodynamique entre ces deux populations. Ce modèle de diffusion a été retenu pour le présent travail.

Différentes études numériques par éléments finis implémentant ce modèle ont été publiées, que ce soit pour le comportement homogène isotrope du matériau ou pour des comportements anisotropes du matériau cristallin. Les études à l'échelle macroscopique où le matériau est considéré homogène et de comportement isotrope concernent surtout des cas de plasticité confinée en fond d'entaille (« small scale yielding », SSY), ainsi que la précocité de la striction en présence de l'hydrogène, et sont basées sur l'équation de diffusion 1.2.19 et la description d'adoucissement du matériau par l'équation 1.2.25 pour différents matériaux dans différents contextes. Quelques études sur l'influence de l'hydrogène sur comportement du matériau à l'échelle cristalline sont abordées en accompagnement de techniques expérimentales, sans calcul complet de couplage diffusion-comportement du matériau à cette échelle. Dans tous les cas, le chargement mécanique global est essentiellement uniaxial.

Ce travail de thèse s'inscrit dans le contexte de développement au laboratoire LSPM de l'étude des effets de fragilisation par l'hydrogène dans des problèmes de mise en forme des matériaux métalliques polycristallins. Dans ce cas, le matériau est susceptible de subir de

grandes déformations plastiques sous des chargements mécaniques souvent complexes. L'objectif est donc d'utiliser le modèle présenté dans la section I.2 de la prise en compte de l'interaction diffusion de l'hydrogène-plasticité pour des structures et chargement variés.

Il s'agit d'abord de développer des outils numériques dans le code d'élément finis utilisé (Abaqus©) pour prendre en compte la variation simultanée du champ mécanique et la concentration de l'hydrogène à l'échelle macroscopique. L'implémentation de la loi de diffusion couplée (équation I.2.19) est essentielle pour améliorer les calculs existants (dans les travaux de Charles et al. [25] la diffusion n'est prise en compte que sous la forme fickienne). Il est important de noter ici que ces outils sont développés de manière à être modulaires, donc flexibles dans le sens qu'on peut modifier chaque partie (comme la loi d'écroutissement du matériau) de façon indépendante. Ces outils seront étendus à l'échelle de l'agrégat. Ils serviront ensuite pour simuler la distribution de l'hydrogène d'une structure à l'échelle macroscopique et à l'échelle microscopique dans des essais de corrosion, par exemple, l'essai de pliage en U [68]. Ces développements numériques constituent les premiers pas pour le laboratoire LSPM dans ce domaine. Ils serviront dans l'avenir à la confrontation avec des essais en cours au laboratoire sur des polycristaux réels.

## ***Bibliographie***

- [1] J. Chêne, *L'hydrogène dans les matériaux métalliques en relation avec les interactions plasticité-environnement*. PlastOx 2007, 2009: p. 131-145.
- [2] J. Chêne, *Exposé "l'hydrogène dans les matériaux métalliques"* Colloque PlastOx 2007.
- [3] S. Serebrinsky, E.A. Carter, et M. Ortiz, *A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004. **52**(10): p. 2403-2430.
- [4] A. Sieverts, G. Zapf, et H. Moritz, *Solubility of hydrogen, deuterium, and nitrogen in iron*. Z. phys. Chem, 1938. **19**: p. i83A.
- [5] X. Feugas, et al., *Influence d'un état mécanique sur la réactivité de surface en milieux aqueux des métaux c.f.c.* PlastOx 2007, 2009: p. 221-236.
- [6] A. Winkler et K.D. Rendulic, *Adsorption kinetics for hydrogen adsorption on nickel and coadsorption of hydrogen and oxygen*. Surface Science, 1982. **118**: p. 19-31.
- [7] D.A. Porter et K.E. Easterling, *Phase transformations in metal and alloy*, C. Hall, Editor. 1992.
- [8] A.J. Kumnick et H.H. Johnson, *Deep trapping states for hydrogen in deformed iron*. Acta Metallurgica, 1980. **28**(1): p. 33-39.
- [9] W.Y. Choo et J. Lee, *Hydrogen trapping phenomena in carbon steel*. Journal of Materials Science, 1982. **17**(7): p. 1930-1938.
- [10] I. Moro, *Fragilisation par l'hydrogène gazeux d'un acier ferrito-perlitique de grade API X80*. Thèse doctorat. Université Toulouse 3, 2009.

- [11] T. Otsuka et T. Tanabe, *Hydrogen diffusion and trapping process around MnS precipitates in  $\alpha$ Fe examined by tritium autoradiography*. Journal of Alloys and Compounds, 2007. **446-447**(0): p. 655-659.
- [12] A.M. Brass et J. Chene, *Influence of deformation on the hydrogen behavior in iron and nickel base alloys: a review of experimental data*. Materials Science and Engineering: A, 1998. **242**(1-2): p. 210-221.
- [13] J. Donovan, *Accelerated evolution of hydrogen from metals during plastic deformation*. Metallurgical Transactions A, 1976. **7**(11): p. 1677-1683.
- [14] J. Chêne et A.M. Brass, *Hydrogen transport by mobile dislocations in nickel base superalloy single crystals*. Scripta Materialia, 1999. **40**(5): p. 537-542.
- [15] I.M. Robertson, H.K. Birnbaum, et P. Sofronis, *Chapter 91 Hydrogen Effects on Plasticity*, dans *Dislocations in Solids*, J.P. Hirth and L. Kubin, Editors. 2009, Elsevier. p. 249-293.
- [16] G.R. Caskey Jr, *Effect of hydrogen on work hardening of type 304L austenitic stainless steel*. Scripta Metallurgica, 1981. **15**(11): p. 1183-1186.
- [17] D. Abraham et C. Altstetter, *The effect of hydrogen on the yield and flow stress of an austenitic stainless steel*. Metallurgical and Materials Transactions A, 1995. **26**(11): p. 2849-2858.
- [18] H. Matsui, H. Kimura, et S. Moriya, *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*. Materials Science and Engineering, 1979. **40**(2): p. 207-216.
- [19] I.M. Robertson et H.K. Birnbaum, *An HVEM study of hydrogen effects on the deformation and fracture of nickel*. Acta Metallurgica, 1986. **34**(3): p. 353-366.
- [20] T. Matsumoto, J. Eastman, et H.K. Birnbaum, *Direct observations of enhanced dislocation mobility due to hydrogen*. Scripta Metallurgica, 1981. **15**(9): p. 1033-1037.
- [21] P.J. Ferreira, I.M. Robertson, et H.K. Birnbaum, *Hydrogen effects on the interaction between dislocations*. Acta Materialia, 1998. **46**(5): p. 1749-1757.
- [22] C. Lionel, B. Anne-Marie, et C. Jacques, *Fragilisation des aciers par l'hydrogène : étude et prévention*. Techniques de l'ingénieur Corrosion et vieillissement: phénomènes et mécanismes, 2000 (ref. article : m175).
- [23] Y. Toji, et al., *Evaluation of Hydrogen Embrittlement for High Strength Steel Sheets*. Materials Science Forum, 2009. **638-642**: p. 3537-3542.
- [24] J. Fidelle, *On Disk Pressure Selection of Materials and Hydrogen Environments*. Current Solutions to Hydrogen Problems in Steels, 1982: p. 449-453.
- [25] Y. Charles, et al., *Numerical modeling of the Disk Pressure Test up to failure under gaseous hydrogen*. Journal of Materials Processing Technology, 2012. **212**(8): p. 1761-1770.

- [26] T. Neeraj, R. Srinivasan, et J. Li, *Hydrogen embrittlement of ferritic steels: Observations on deformation microstructure, nanoscale dimples and failure by nanovoiding*. Acta Materialia, 2012. **60**(13–14): p. 5160-5171.
- [27] M.L. Grossbeck et H.K. Birnbaum, *Low temperature hydrogen embrittlement of niobium II—Microscopic observations*. Acta Metallurgica, 1977. **25**(2): p. 135-147.
- [28] D.S. Shih, I.M. Robertson, et H.K. Birnbaum, *Hydrogen embrittlement of  $\alpha$  titanium: In situ tem studies*. Acta Metallurgica, 1988. **36**(1): p. 111-124.
- [29] R.A. Oriani et P.H. Josephic, *Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels*. Acta Metallurgica, 1974. **22**(9): p. 1065-1074.
- [30] C.D. Beachem, *A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen “embrittlement”)*. Metallurgical Transactions, 1972. **3**(2): p. 441-455.
- [31] D. Delafosse, *9 - Hydrogen effects on the plasticity of face centred cubic (fcc) crystals, dans Gaseous Hydrogen Embrittlement of Materials in Energy Technologies*, R.P. Gangloff and B.P. Somerday, Editors. 2012, Woodhead Publishing: p. 247-285.
- [32] J. Toribio, *Role of hydrostatic stress in hydrogen diffusion in pearlitic steel*. Journal of Materials Science, 1993. **28**(9): p. 2289-2298.
- [33] J.C.M. Li, R.A. Oriani, et D.L. S., *The Thermodynamics of Stressed Solids*. Zeitschrift fur hysikalische Chemie, 1966. **49**.
- [34] P. Sofronis, Y. Liang, et N. Aravas, *Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys*. European Journal of Mechanics A/Solids, 2001. **20**(6): p. 857-872.
- [35] R.A. Oriani, *The diffusion and trapping of hydrogen in steel*. Acta Metallurgica, 1970. **18**(1): p. 147-157.
- [36] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.
- [37] P. Sofronis et R.M. McMeeking, *Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1989. **37**(3): p. 317-350.
- [38] R. Miresmaeili, L. Liu, et H. Kanayama, *A possible explanation for the contradictory results of hydrogen effects on macroscopic deformation*. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 2012. **99–100**(0): p. 34-43.
- [39] H. Westergaard, *Stresses at a crack, size of the crack and the bending of reinforced concrete*. Proceedings of the American Concrete Institute, 1934. **30**: p. 93-102.
- [40] Gurson, *Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I—Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Materials*. Journal of Engineering Materials and Technology, 1977. **99**: p. 2–15.

- [41] D.S. Dugdale, *Yielding of steel sheets containing slits*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1960. **8**(2): p. 100-104.
- [42] G.I. Barenblatt, *The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture*. Advances in applied mechanics, 1962. **7**(1): p. 55-129.
- [43] X.P. Xu et A. Needleman, *Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1994. **42**(9): p. 1397-1434.
- [44] N. Chandra, et al., *Some issues in the application of cohesive zone models for metal-ceramic interfaces*. International Journal of Solids and Structures, 2002. **39**(10): p. 2827-2855.
- [45] I. Scheider et W. Brocks, *Cohesive elements for thin-walled structures*. Computational Materials Science, 2006. **37**(1-2): p. 101-109.
- [46] A.A. Griffith, *The Phenomena of Rupture and Flow in Solids*. Philosophical Transactions Mathematical Physical & Engineering Sciences, 1921. **221**(582): p. 163-198.
- [47] I. Scheider et W. Brocks, *Simulation of cup-cone fracture using the cohesive model*. Engineering Fracture Mechanics, 2003. **70**(14): p. 1943-1961.
- [48] C. Moriconi, *Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques*. Thèse doctorat. 2012.
- [49] V. Olden, et al., *Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25%Cr duplex stainless steel*. Engineering Fracture Mechanics, 2008. **75**(8): p. 2333-2351.
- [50] W. Brocks, R. Falkenberg, et I. Scheider, *Coupling aspects in the simulation of hydrogen-induced stress-corrosion cracking*. Procedia IUTAM, 2012. **3**(0): p. 11-24.
- [51] J. Lufrano et P. Sofronis, *Numerical analysis of the interaction of solute hydrogen atoms with the stress field of a crack*. International Journal of Solids and Structures, 1996. **33**(12): p. 1709-1723.
- [52] J.P. Hirth et B. Carnahan, *Hydrogen adsorption at dislocations and cracks in Fe*. Acta Metallurgica, 1978. **26**(12): p. 1795-1803.
- [53] J.R. Rice, *A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks*. Journal of Applied Mechanics, 1968. **35**(2): p. 379-386.
- [54] *MSC.Marc*. disponible sur: <http://www.mscsoftware.com>.
- [55] C.-s. Oh, Yun-Jae, et K.-B. Yoon, *Couple analysis of hydrogen transport using Abaqus*. Journal of solid mechanic and materials engineering, 2010. **4**: p. 908-917.
- [56] N. Ben Ali, *Caractérisation et modélisation micromécanique de la propagation de fissures fragiles par l'effet de l'hydrogène dans les alliages AA7xxx*. Thèse doctorat. Ecole des Mines de Saint-Etienne, 2011.

- [57] *Abaqus Analysis Users's Manual 2011*.
- [58] D.C. Ahn, P. Sofronis, et R.H. Dodds, *On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence*. International Journal of Hydrogen Energy, 2007. **32**(16): p. 3734-3742.
- [59] Y. Liang, et al., *Effect of hydrogen trapping on void growth and coalescence in metals and alloys*. Mechanics of Materials, 2008. **40**: p. 115-132.
- [60] Y. Liang, P. Sofronis, et N. Aravas, *On the effect of hydrogen on plastic instabilities in metals*. Acta Materialia, 2003. **51**: p. 2717–2730.
- [61] R. Miresmaeili, et al., *A coupled elastoplastic-transient hydrogen diffusion analysis to simulate the onset of necking in tension by using the finite element method*. International Journal of Hydrogen Energy, 2010. **35**(3): p. 1506-1514.
- [62] K. Takayama, et al., *Hydrogen diffusion analyses of a cracked steel pipe under internal pressure*. international journal of hydrogen energy, 2011. **36**: p. 1037-1045.
- [63] R. Miresmaeili, et al., *One-Way Coupled Crystal Plasticity-Hydrogen Diffusion Simulation on Artificial Microstructure*. Journal of Computational Science and Technology, 2010. **4**(2): p. 105-120.
- [64] G. Cailletaud, *Une approche micromécanique du comportement des polycristaux*. Rev. Phys. Appl. (Paris), 1988. **23**(4): p. 353-365.
- [65] I. Aubert, N. Saintier, et J.-M. Olive, *Crystal plasticity computation and atomic force microscopy analysis of the internal hydrogen-induced slip localization on polycrystalline stainless steel*. Scripta Materialia, 2012. **66**(9): p. 698-701.
- [66] E. Pouillier, et al., *A study of intergranular fracture in an aluminium alloy due to hydrogen embrittlement*. International Journal of Plasticity, 2012. **34**(0): p. 139-153.
- [67] K.-S. Cheong et E.P. Busso, *Effects of lattice misorientations on strain heterogeneities in FCC polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2006. **54**(4): p. 671-689.
- [68] ASTM, *Standard Practice for Making and Using Stress-Corrosion Test Specimen*, in G30-97. 2003.





## II. Stratégie et mise en œuvre de l'implémentation du couplage diffusion-champs mécaniques

Ce chapitre est consacré aux outils numériques utilisés pour la simulation du couplage mécanique-diffusion d'hydrogène. Ce travail sera effectué à l'aide du code par éléments finis Abaqus.

Dans un premier temps, on rappellera brièvement les équations qui permettent la résolution d'un problème éléments finis pour les problèmes mécanique ou de diffusion. On abordera ensuite les principes de l'implémentation des différentes procédures utilisateurs Abaqus qu'il a fallu développer pour résoudre ce problème.

Enfin, la stratégie d'implémentation du couplage diffusion-champs mécanique, et le schéma de résolution de ce couplage dans les procédures numériques seront présentés. Dans cette résolution, le terme du gradient de la pression hydrostatique pilote en partie la diffusion de l'hydrogène et doit être calculé. La dernière partie du chapitre est consacrée au calcul de ce terme.

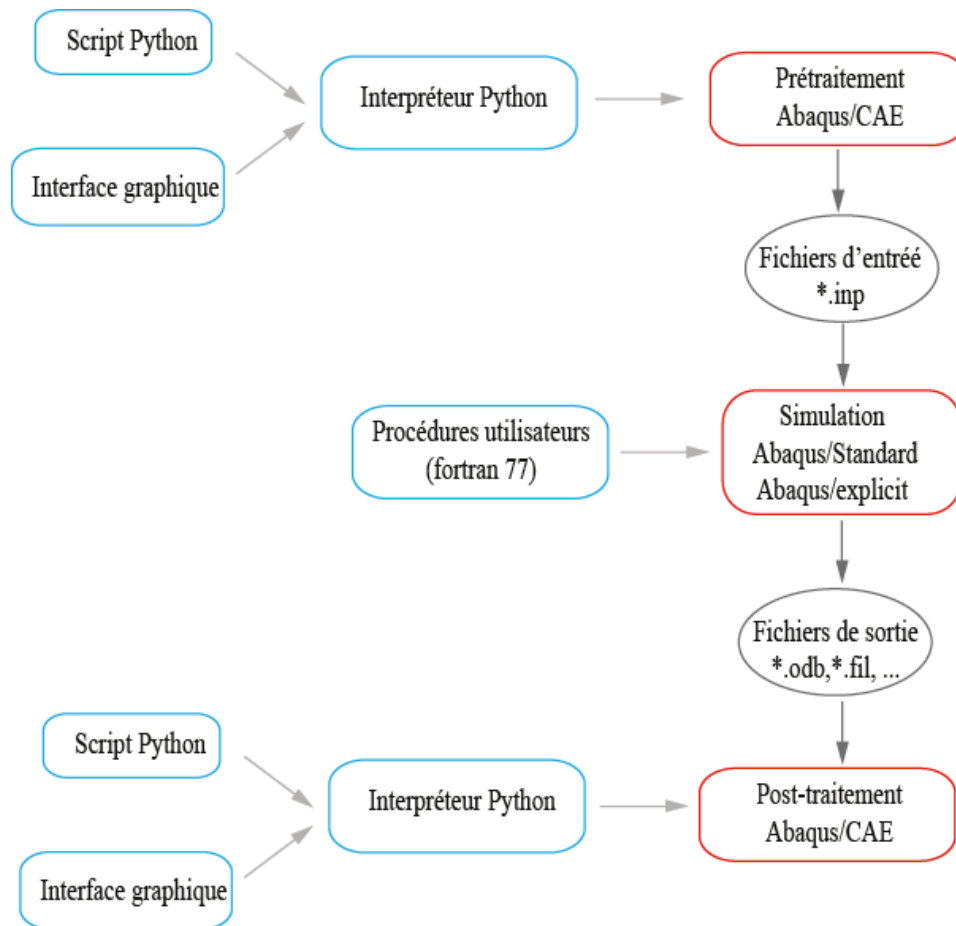
### II. 1. L'outil numérique : le code élément finis Abaqus

Abaqus est un ensemble de programme de simulation utilisant la méthode des éléments finis. Il permet de résoudre de nombreux problèmes, simples ou complexes, linéaires ou non-linéaires.

#### II. 1. a. Présentation du code

Une analyse par Abaqus est généralement composée de 3 étapes, comme montré dans la figure II.1.1.

Dans l'étape de prétraitement, on doit définir le modèle et créer le fichier d'entrée du calcul (fichier \*.inp), qui contient toutes les données du problème et du schéma de résolution. Pour définir un modèle dans Abaqus/CAE, il y a 2 façons de procéder. La méthode la plus simple est d'utiliser l'interface graphique fournie par Abaqus/CAE, ou l'entrée directe par fichier \*.inp. L'autre est l'utilisation d'un script en langage Python. Cette méthode est plus compliquée mais plus flexible dans la création du modèle. Elle permet de définir des géométries complexes ou des conditions aux limites « non-standard » dans l'interface graphique. Le modèle créé, quelle que soit la méthode utilisée, sera interprété par un compilateur de langage Python pour générer le fichier d'entrée (.inp), qui contient toutes les informations nécessaires à la définition d'un problème élément fini : les nœuds, les éléments, les comportements, les conditions limites, le schéma de résolution et les paramètres de convergence. Ces divers éléments sont repérés grâce à des mots clefs précédé d'un astérisque «\*».



**Figure II.1.1** Schéma de résolution d'un problème par Abaqus.

Le problème numérique est ensuite résolu par le solveur Abaqus : Abaqus/Standard pour les problèmes quasi-statiques et Abaqus/Explicit pour les problèmes dynamiques. Le choix du solveur dépend du problème posé. Un ensemble de fichiers sont alors générés, dont :

- le fichier \*.log, qui regroupe les informations sur les licences disponibles, et l'échec ou le succès du calcul (une erreur dans le fichier \*.inp est donné comme échec de calcul) ;
- le fichier \*.dat, qui reprend les mots clefs du fichier \*.inp et indique également les erreurs potentielles sur l'utilisation des mots-clés ;
- le fichier \*.msg, qui donne les informations sur les incréments de calcul. Il rappelle également les paramètres de convergence ;
- le fichier \*.sta, qui synthétise les caractéristiques des incréments (pas de temps, nombre d'itérations....) ;
- le fichier \*.odb, dans lequel sont écrites les variables calculées lors de la résolution du problème.

Mis à part ce dernier fichier, tous les autres sont des fichiers texte.

Les résultats obtenus (fichier \*.odb) sont ensuite visualisés et traités dans Abaqus/CAE, et éventuellement post-traités par des scripts en Python.

**Tableau II.1.1.** Procédures de calculs dans Abaqus.

Static analysis	Problèmes quasi-statiques
Explicit dynamic analysis	Problèmes dynamiques avec effets d'inertie
Mass diffusion	Diffusion de matière assistée par un champ mécanique
Uncoupled heat transfer	Diffusion thermique
Coupled temp-displacement	Résolution couplée de problèmes mécanique et thermique

### II. 1. b. Schémas de résolution

Abaqus permet de nombreux types d'analyses comme illustré dans le tableau II.1.1, et brièvement présentées dans ce qui suit

- la procédure « static » : cette procédure est utilisée quand les effets d'inertie peuvent être négligés (hypothèse quasi-statique). Elle permet de prendre en compte les non-linéarités géométriques (causé par les grands déplacements) ou du matériau, et également l'influence de la vitesse de chargement, ou des couplages avec un champ de température (dont les variations spatiales et temporelles sont données en conditions initiales) ;
- la procédure « explicit dynamic » : elle permet d'analyser les problèmes en considérant les effets d'inertie. Pour cette procédure, le déplacement et la vitesse sont calculés au début de chaque incrément. Par conséquent, on n'a pas besoin de former et d'inverser la matrice de raideur globale comme dans la procédure « implicit dynamic ». Le cout du calcul est moins important mais la procédure est conditionnellement stable (la taille d'incrément est limité) ;
- la procédure de « mass-diffusion » : il s'agit d'une procédure qui permet de modéliser en régime permanent ou transitoire la diffusion de la température ou la diffusion de matière dans une structure (dans les deux cas, le numéro du degré de liberté utilisé par Abaqus est le même : c'est le 11<sup>ème</sup> sur chaque nœud). Il permet de prendre en compte l'influence de la pression hydrostatique sur la diffusion de matière, mais pour un champ de contrainte fixé, et donné en condition initiale ;
- la procédure « uncoupled heat transfer » : cette procédure est utilisé pour modéliser la conduction thermique (en transitoire ou non) dans une structure ;
- la procédure « temp-displacement » : cette procédure permet de résoudre un problème couplé mécanique-thermique en régime transitoire ou non. Le comportement mécanique peut être modifié par le champ de température, mais l'inverse n'est pas possible : la diffusion de la température suit une loi de Fourier.

### II. 1. c. Développement de procédures utilisateur

Le code Abaqus permet en plus à l'utilisateur de définir un certain nombre de données du calcul et ses propres éléments de modèle, grâce à des procédures utilisateurs. Ces procédures

sont écrites en langage Fortran 77 ou C, compilées par le code et incluent dans le modèle au début d'analyse. Les procédures les plus utilisées incluent :

- DLOAD : cette procédure définit un chargement mécanique non-uniforme comme la pression et la force volumique ;
- ORIENT : définition d'un repère local en chaque point du matériau (en chaque point d'intégration d'un élément fini) ;
- UEL : cette procédure définit un élément fini dans Abaqus/Standard (VUEL pour des calculs en dynamique) ;
- UMAT : définition d'une loi de comportement mécanique dans Abaqus/Standard (VUMAT pour des calculs en dynamique) ;
- UMATHT : définition d'un flux de matière ou de chaleur ;
- USDFLD : récupération des champs convergés en tout point d'intégration du modèle.

Pour pouvoir traiter le problème de diffusion assistée par les champs mécaniques, qui n'est pas implémenté dans Abaqus, un certain nombre de ces procédures ont été développés dans ce travail. Avant de les présenter, la section suivante décrit le principe de résolution des problèmes mécanique et de diffusion par la méthode des éléments finis, afin de préciser où, quand et comment le code Abaqus fait appel à ces procédures utilisateurs.

#### *II. 1. d. Moyens de calculs*

Les simulations ont été effectuées sur un cluster de calcul qui comprend 3 nœuds soient :

- 1 nœud, comprenant 2 processeurs à 4 cœurs, à 2,93 GHz 68 Go de RAM ;
- 2 nœuds, comprenant chacun 4 processeurs à 6 cœurs, 2,66 GHz, 96 Go de RAM.

Les simulations sont effectuées avec le code Abaqus v6.11.

### ***II. 2. Résolution d'un problème par éléments finis***

La méthode des éléments finis permet de résoudre un problème complexe (mécanique, diffusion...), défini par un système d'équation en tout point d'un volume, grâce à la formulation faible de ce problème [1]. Cette formulation faible est une fonctionnelle dont on cherche la solution (sous la forme, par exemple dans les problèmes mécaniques, d'un champ de déplacement).

Une fois cette formulation obtenue, le volume est discrétisé en éléments finis (le maillage) sur lesquels on postule la forme de la solution (linéaire, quadratique) ; chaque élément fini est défini par un ensemble de point, les nœuds. Cela permet de transformer cette formulation faible continue en un problème matriciel, le champ continu inconnu devenant un champ discret, constitué de degrés de libertés, décrit par un vecteur dont les composantes sont la solution du problème aux nœuds du maillage, généralement aux sommets des éléments finis.

Dans tout ce qui suit, les matrices et les tenseurs seront notés en gras, que même que les vecteurs. La double contraction est notée par ':', telle que  $\mathbf{X}:\mathbf{X}=\sum_{ij}X_{ij}X_{ji}$ . Enfin, le produit

tensoriel est noté  $\otimes$ , et  $X \otimes Y = X_i Y_j$ .  $q_u$  et  $q_\theta$  représentent respectivement les vecteurs déplacement et température aux nœuds d'un élément (vecteur degré de liberté, ddl).

## II. 2. a. Forme de la solution sur un élément finis (EF)

La méthode d'éléments finis consiste à résoudre un système d'équations différentielles dans leurs domaines en discrétisant ce domaine en petites régions, ou « sous-domaines », de géométrie simple, appelées « éléments finis » (EF). L'ensemble des éléments finis est appelé maillage (figure II.2.1).

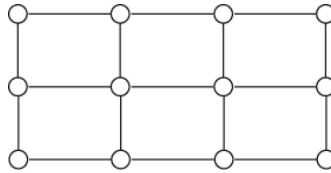


Figure II.2.1 Exemple d'un maillage rectangulaire.

Cette méthode a pour origine la méthode des résidus pondérés [2], qui consiste à affaiblir un système d'équations pour permettre sa résolution. Elle est basée sur la définition d'un résidu, la pondération du résidu par une fonction test et l'intégration du résidu pondéré sur le domaine.

Pour la méthode EF, la solution en un point quelconque à l'intérieur d'un élément est approchée par des fonctions d'interpolations  $N_i$ , telles que  $N_i(x_j) = \delta_{ij}$ , et les solutions aux nœuds.  $N_i$  est la fonction d'interpolation n<sup>o</sup>i et  $x_j$  la coordonnée du j<sup>ième</sup> nœud ;  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kroneker tel que  $\delta_{ij} = 1$  si  $i=j$ , et 0 sinon.

Les fonctions d'interpolation assurent le passage du problème continu au problème discret. Elles sont souvent choisies sous forme de polynôme linéaire ou quadratique.

Si l'on considère un élément 1D à 2 nœuds, le champ  $q$  inconnu (par exemple, le déplacement dans une direction de l'espace) est supposé varier linéairement le long de cet élément (figure II.2.2.a). On a donc, en tout point de l'élément

$$q = \frac{(1-\xi)}{2} q_1 + \frac{(1+\xi)}{2} q_2 = N_1(\xi) q_1 + N_2(\xi) q_2, \quad (\text{II.2.1})$$

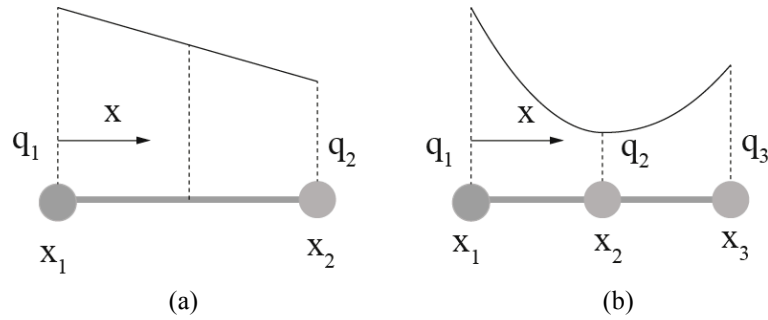
où  $q_i$  représente la valeur de  $q$  sur le nœud  $i$ .  $\xi \in [-1,1]$  est la coordonnée locale des points dans l'élément fini, en notant que la coordonnée globale  $x$  des points dans l'élément fini isoparamétrique est telle que  $x = N_1(\xi) x_1 + N_2(\xi) x_2$ . Le vecteur de ddl pour cet élément est

$\mathbf{q} = \{q_1, q_2\}$ .

Dans cas d'un élément 1D quadratique à 3 nœuds, le champ  $q$  varie de manière parabolique (figure II.2.2.b). On a donc, en tout point de l'élément

$$q = \frac{1}{2} \xi(1-\xi) q_1 - (\xi+1)(\xi-1) q_2 + \frac{1}{2} \xi(1+\xi) q_3 = N_1(\xi) q_1 + N_2(\xi) q_2 + N_3(\xi) q_3. \quad (\text{II.2.2})$$

On a dans ce cas là  $q(\xi=1) = q_3$ ,  $q(\xi=0) = q_2$  et  $q(\xi=-1) = q_1$ . Le vecteur ddl pour cet élément est  $\mathbf{q} = \{q_1, q_2, q_3\}$ .



**Figure II.2.2** Interpolation dans (a) un élément linéaire et (b) un élément quadratique.

Il existe plusieurs types d'éléments finis, et le choix de ce type d'élément dépend du problème traité. En 2D, les plus utilisés sont

- les éléments quadrilatéraux linéaires à 4 nœuds, ou quadratiques à 8 nœuds ;
- les éléments triangulaires linéaires à 3 nœuds, ou quadratiques à 6 nœuds.

En fonction du problème traité, certains éléments sont plus adaptés que d'autre (tableau II.2.1).

**Tableau II.2.1** Synthèse pour l'utilisation des éléments [3].

Type de problème	Meilleur choix	Éléments à éviter
Contact	QU4, TR3, HE8	Éléments du 2ème ordre
Flexion dans le plan	QU8, TR6, HE20 Éléments à modes incompatibles	Éléments du 1er ordre
Contact avec flexion dans le plan	Éléments à modes incompatibles	Tous les autres
Concentration de contraintes	Éléments du 2ème ordre	Éléments du 1er ordre
Matériau quasi-incompressible (ex. : plastique)	Éléments du 1er ordre Éléments du 2ème ordre avec intégration réduite	Éléments du 2ème ordre avec intégration normale
Matériau incompressible (ex. caoutchouc $\nu = 0,5$ )	Éléments hybrides	Tous les autres
Géométrie très « torturée »	Éléments du 1er ordre	Tous les autres

### II. 2. b. Intégration numérique

La méthode des éléments finis se ramène au final à résoudre le système suivant pour trouver la solution (le vecteur ddl  $\mathbf{q}$ )

$$\mathbf{K}(\mathbf{q})\mathbf{q} = \mathbf{F}. \quad (\text{II.2.3})$$

La matrice  $\mathbf{K}$  et le vecteur  $\mathbf{F}$  sont des intégrales complexes qu'on ne peut pas toujours déterminer analytiquement. Pour cette raison, on doit recourir à une méthode numérique de calcul d'intégrale, comme la quadrature de Gauss.

Dans cette méthode, l'intégrale  $\int_{-1}^1 f(x)dx$  est remplacé par  $\sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i)$ , où les point  $x_i$  (appelés point de Gauss - PG) et leurs poids  $\omega_i$  sont pré-déterminés (tableau II.2.2). Cette méthode permet d'intégrer exactement sans erreur un polynôme de degré  $2n-1$  avec seulement  $n$  points d'intégration.

On a donc besoin d'un seul point de Gauss pour l'élément 1D linéaire et 2 point de Gauss pour l'élément quadratique. Si moins de  $n$  points d'intégration sont utilisés pour un polynôme de degré  $2n-1$ , l'intégration est dite réduite.

**Tableau II.2.2** Quadrature de Gauss pour une fonction scalaire  $f$  intégrée sur  $[-1,1]$ .

Nombre de PG	Poids ( $\omega_i$ )	Points $x_i \in [-1,1]$
1	2	0
2	1, 1	$-\sqrt{1/3}, \sqrt{1/3}$
3	5/9, 8/9, 5/9	$-\sqrt{3/5}, 0, \sqrt{3/5}$
4	$\frac{18 + \sqrt{30}}{36}$	$\pm \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$
	$\frac{18 - \sqrt{30}}{36}$	$\pm \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$

Abaqus utilise cette méthode pour calculer numériquement les intégrales. Les éléments disponibles dans Abaqus sont soit à intégration réduite, soit complète.

Les formulations faibles des problèmes mécaniques et de diffusion, d'intérêt pour ce travail, sont présentées dans la suite, en se limitant au cas quasi-statique.

### II. 2. c. Problème mécanique

Soit un corps  $\Omega$ , de masse volumique  $\rho$  et de frontière  $\partial\Omega$ . Ce corps est soumis à (figure II.2.3) :

- une force volumique  $\mathbf{b}$  ;
- une contrainte  $\bar{\mathbf{T}}$  sur sa frontière  $\partial\Omega_T$  ;
- un déplacement  $\bar{\mathbf{u}}$  sur sa frontière  $\partial\Omega_u$ .

$\partial\Omega_u$  et  $\partial\Omega_T$  sont tels que  $\partial\Omega_T \cup \partial\Omega_u = \partial\Omega$ , et  $\partial\Omega_T \cap \partial\Omega_u = \emptyset$ .

Pour ce problème mécanique (quasi-statique), l'équation d'équilibre (formulation forte) s'écrit :

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0}. \quad (\text{II.2.4})$$

$\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes ; c'est une fonction du champ de déplacement  $\mathbf{u}$  qui est l'inconnue du problème.

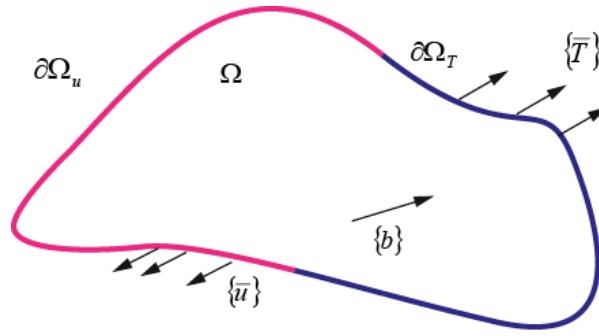


Figure II.2.3 Problème mécanique et les conditions aux limites.

i. Formulation faible

Soit un champ de déplacement virtuel  $\delta \mathbf{u}$  continu et tel que  $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$  sur  $\partial \Omega_u$ . L'intégrale du produit de l'équation (II.2.4) avec  $\delta \mathbf{u}$  sur le volume  $\Omega$  donne :

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} (\nabla \sigma) dV + \int_{\Omega} \delta u \rho b dV = 0. \quad (\text{II.2.5})$$

Par une intégration par partie, on en déduit

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} (\nabla \sigma) dV = \int_{\Omega} \nabla (\delta u \sigma) dV - \int_{\Omega} \sigma : (\nabla \otimes \delta \mathbf{u}) dV. \quad (\text{II.2.6})$$

Par le théorème de la divergence, on peut réécrire l'équation précédente par

$$\int_{\Omega} \nabla (\delta u \sigma) dV = \int_{\partial \Omega} (\delta u \sigma) \mathbf{n} dS = \int_{\partial \Omega_T} \delta u \bar{\mathbf{T}} dS = \int_{\partial \Omega_T} \delta u \bar{\mathbf{T}} dS, \quad (\text{II.2.7})$$

où  $\mathbf{n}$  est le vecteur unitaire normal sortant à  $\partial \Omega_T$ , et avec  $\delta \mathbf{u} = \mathbf{0}$  sur  $\partial \Omega_u$ . En utilisant les équations (II.2.6) et (II.2.7), l'équation (II.2.5) devient donc

$$\int_{\partial \Omega_T} \delta u \bar{\mathbf{T}} dS - \int_{\Omega} \sigma : (\nabla \otimes \delta \mathbf{u}) dV + \int_{\Omega} \delta u \rho b dV = 0. \quad (\text{II.2.8})$$

En posant le tenseur de déformation  $2\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \otimes \mathbf{u} + {}^t \nabla \otimes \mathbf{u}$  (dans le cas des transformations infinitésimales), et en notant que

$$\int_{\Omega} \sigma : (\nabla \otimes \delta \mathbf{u}) dV = \int_{\Omega} \sigma : \frac{1}{2} (\nabla \otimes \delta \mathbf{u} + {}^t \nabla \otimes \delta \mathbf{u}) dV, \quad (\text{II.2.9})$$

on obtient la formulation faible du problème :

$$\forall \delta \mathbf{u} / \delta \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial \Omega_u, \int_{\Omega} \sigma : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \int_{\partial \Omega_T} \bar{\mathbf{T}} \delta u dS + \int_{\Omega} \delta u \rho b dV. \quad (\text{II.2.10})$$

ii. Discrétisation en éléments finis

Pour chaque élément fini, le déplacement  $\mathbf{u}$  est lié au vecteur de ddl local  $\mathbf{q}_u$  par une matrice d'interpolation  $\mathbf{N}$ , telle que

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \mathbf{q}_u. \quad (\text{II.2.11})$$

Le champ de déformation s'écrit alors



$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\nabla \mathbf{N}) \mathbf{q}_u, \quad (\text{II.2.12})$$

avec  $2\nabla \mathbf{N} = \nabla \otimes \mathbf{N} + {}^t \nabla \otimes \mathbf{N}$ .

Si l'on se limite au cas d'un comportement élastique, alors contraintes et déformations sont reliées par un tenseur d'élasticité d'ordre 4  $\mathbf{C}$  tel que  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$ , et l'équation (II.2.10) devient alors

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \mathbf{q}_u \left[ \sum_k \int_{\text{élément } n^{\circ}k} \nabla \mathbf{N} : \mathbf{C} : {}^t \nabla \mathbf{N} dV \right] {}^t \delta \mathbf{q}_u. \quad (\text{II.2.13})$$

En utilisant la quadrature de Gauss, on peut ensuite calculer chaque intégrale

$$\int_{\text{élément } n^{\circ}k} \nabla \mathbf{N} : \mathbf{C} : {}^t \nabla \mathbf{N} dV = \sum_{i \in \{\text{Points de Gauss}\}} \omega_i \nabla \mathbf{N}(i) : \mathbf{C}(i) : {}^t \nabla \mathbf{N}(i), \quad (\text{II.2.14})$$

et l'on peut déterminer la matrice de rigidité  $\mathbf{K}$  du problème telle que

$$\mathbf{K} = \sum_{\text{elements}} \left( \sum_{i \in \{\text{Points de Gauss}\}} \omega_i \nabla \mathbf{N}(i) : \mathbf{C}(i) : {}^t \nabla \mathbf{N}(i) \right), \quad (\text{II.2.15})$$

telle que

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV = \mathbf{q}_u \mathbf{K} \delta \mathbf{q}_u. \quad (\text{II.2.16})$$

De même, le terme lié au chargement peut être réécrit

$$\int_{\partial \Omega_T} \bar{\mathbf{T}} \delta u dS + \int_{\Omega} \delta u \rho b dV = \mathbf{F}_u \delta \mathbf{q}_u, \quad (\text{II.2.17})$$

où  $\mathbf{F}_u$  est le vecteur de forces généralisés tel que

$$\mathbf{F}_u = \int_{\partial \Omega_T} \bar{\mathbf{T}} \mathbf{N} dS + \int_{\Omega} \rho b \mathbf{N} dV. \quad (\text{II.2.18})$$

Ce vecteur dépend de la discrétisation élément finis du problème et des conditions aux limites en contrainte, il est donc connu. Le problème mécanique devient ainsi un problème de recherche d'un vecteur  $\mathbf{q}_u$  tel que  $\mathbf{h}_u = \mathbf{0}$ , où

$$\mathbf{h}_u = \mathbf{K} \mathbf{q}_u - \mathbf{F}_u, \quad (\text{II.2.19})$$

avec  $\mathbf{K}$  qui peut dépendre également de  $\mathbf{q}_u$ .

Dans le cas d'un comportement non-linéaire, la résolution du problème se fait de manière incrémentale, et l'on définit un tenseur tangent d'ordre 4  $\mathbf{D}$  tel que  $\partial \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : \partial \boldsymbol{\varepsilon}$ , où  $\partial \boldsymbol{\sigma}$  et  $\partial \boldsymbol{\varepsilon}$  sont respectivement les incréments de contrainte et de déformation correspondant à des incréments de chargement (la solution étant connue avant l'incrément de chargement); le vecteur de ddl s'incrémente quant à lui d'une quantité  $\partial \mathbf{q}_u$ . Le tenseur  $\mathbf{D}$  dépend des variables internes  $\mathbf{X}$  associées à la non-linéarité, comme par exemple, le tenseur de déformation plastique (voir [4] pour la formulation de  $\mathbf{D}$  dans ce cas-là). Ces variables internes devant être actualisées pour l'incrément courant (par exemple par un algorithme de Newton-Raphson),  $\mathbf{D}$

est donc lui-même fonction de  $\mathbf{q}_u$  et de  $\partial\mathbf{q}_u$ , et donc sa détermination est partie intégrante du problème à résoudre.

La formulation faible du problème incrémental devient

$$\int_{\Omega} \partial\boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} dV = \partial\mathbf{q}_u \left[ \sum_k \int_{\text{élément n}^\circ k} \nabla N : \mathbf{D} : {}^t \nabla N dV \right] {}^t \delta\mathbf{q}_u \quad (\text{II.2.20})$$

et l'on peut calculer la matrice de rigidité  $\mathbf{K}$  du problème telle que

$$\mathbf{K} = \sum_{\text{elements}} \left( \sum_{i \in \{\text{Points de Gauss}\}} \omega_i \nabla N(i) : \mathbf{D}(i) : {}^t \nabla N(i) \right), \quad (\text{II.2.21})$$

avec

$$\int_{\Omega} \partial\boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{\varepsilon} dV = \partial\mathbf{q}_u \mathbf{K}(\mathbf{q}_u, \mathbf{X}) \delta\mathbf{q}_u. \quad (\text{II.2.22})$$

De même, le terme lié à l'incrément de chargement peut être réécrit comme précédemment

$$\int_{\partial\Omega_T} \partial\bar{T} \delta u dS = \partial\mathbf{F}_u \delta\mathbf{q}_u, \quad (\text{II.2.23})$$

où  $\partial\mathbf{F}_u$  est le vecteur incrément de forces généralisés, entièrement connus, tel que

$$\partial\mathbf{F}_u = \int_{\partial\Omega_T} \partial\bar{T} N dS + \int_{\Omega} \rho \partial b N dV. \quad (\text{II.2.24})$$

La résolution de cet incrément de problème devient ainsi également un problème de recherche d'un vecteur  $\partial\mathbf{q}_u$  tel que  $\mathbf{h}_u = \mathbf{0}$ , où

$$\mathbf{h}_u = \mathbf{K} \partial\mathbf{q}_u - \partial\mathbf{F}_u. \quad (\text{II.2.25})$$

### iii. Résolution

La recherche de la solution de l'équation (II.2.19) (ou II.2.25) se fait grâce à l'algorithme de Newton-Raphson (voir Annexe A). Pour déterminer la solution  $\mathbf{q}_u^{k+1}$  pour l'incrément de chargement  $k+1$ , connaissant celle à l'incrément  $k$ , Abaqus calcule une suite de vecteur  $\mathbf{q}_u^{k,j}$  tels que  $\mathbf{q}_u^{k,j+1} = \mathbf{q}_u^{k,j} + \Delta\mathbf{q}_u^{k,j+1}$ , avec l'incrément du vecteur de ddl  $\Delta\mathbf{q}_u^{k,j+1}$  qui s'écrit

$$\Delta\mathbf{q}_u^{k,j+1} = - \left[ \frac{\partial\mathbf{h}_u}{\partial\mathbf{q}_u} \right]_{k,j}^{-1} \mathbf{h}_u^{k,j}, \quad (\text{II.2.26})$$

la valeur de  $\mathbf{h}_u$  et de son Jacobien  $\frac{\partial\mathbf{h}_u}{\partial\mathbf{q}_u}$  étant calculé pour  $\mathbf{q}_u^{k,j}$ . Pour  $j \rightarrow +\infty$ , alors  $\mathbf{q}_u^{k,j} \rightarrow \mathbf{q}_u^{k+1}$ , avec  $\mathbf{h}_u^{k+1} = \mathbf{0}$ .

La connaissance de  $\left[ \frac{\partial\mathbf{h}_u}{\partial\mathbf{q}_u} \right]_{k,j}^{-1}$  est donc ici primordiale pour résoudre un tel problème. Pour calculer cette matrice, il est nécessaire de connaître la valeur, en chaque point de Gauss du maillage,

1. du gradient des fonctions de forme ;

2. de la relation contrainte déformation.

### II. 2. d. Problème de diffusion de chaleur [5]

Soit un corps  $\Omega$ , de masse volumique  $\rho$ , de chaleur spécifique  $c_p$  et de frontière  $\partial\Omega$ . Ce corps est soumis à (figure II.2.4) :

- une production de chaleur  $r$  ;
- un flux normal  $\bar{\varphi}$  sur sa frontière  $\partial\Omega_\varphi$  ;
- une température  $\bar{\theta}$  sur sa frontière  $\partial\Omega_\theta$ .

$\partial\Omega_\varphi$  et  $\partial\Omega_\theta$  sont tels que  $\partial\Omega_\varphi \cup \partial\Omega_\theta = \partial\Omega$ , et  $\partial\Omega_\theta \cap \partial\Omega_\varphi = \emptyset$ .

Pour le problème de diffusion thermique, l'équation de transfert thermique (formulation forte) s'écrit :

$$\rho c_p \dot{\theta} = -\nabla \varphi + r. \quad (\text{II.2.27})$$

$\varphi$  est le vecteur de flux thermique tel que  $\varphi = -\lambda \nabla \theta$ , où  $\lambda$  est le coefficient de diffusion. Sur  $\partial\Omega_\varphi$ , on a donc  $\bar{\varphi} = -\varphi n$ , où  $n$  est le vecteur unitaire normal sortant à  $\partial\Omega_\varphi$ .

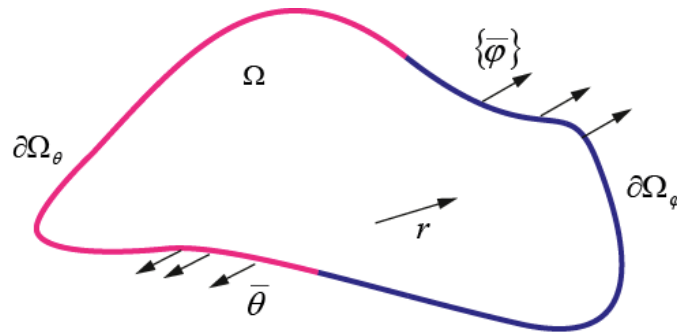


Figure II.2.4 Problème thermique et les conditions aux limites.

#### i. Formulation faible

Soit un champ de température virtuel  $\delta\theta$  continu tel que  $\delta\theta=0$  sur  $\partial\Omega_\theta$ .

La formulation faible du problème s'obtient en intégrant le produit de l'équation (II.2.27) avec un champ de la température virtuelle  $\delta\theta$  sur le volume  $\Omega$ , en notant que  $c_p \dot{\theta} = \dot{U}$  :

$$\int_{\Omega} \delta\theta \dot{U} dV = - \int_{\Omega} \delta\theta \nabla \varphi dV + \int_{\Omega} \delta\theta r dV, \quad (\text{II.2.28})$$

où  $U$  est l'énergie thermique dans le volume  $\Omega$ .

Par une intégration par partie, on peut écrire

$$\int_{\Omega} \delta\theta \nabla \varphi dV = \int_{\Omega} \nabla(\delta\theta \varphi) dV - \int_{\Omega} \varphi(\nabla \delta\theta) dV. \quad (\text{II.2.29})$$

Par le théorème de la divergence, on a :

$$\int_{\Omega} \nabla(\delta\theta \varphi) dV = \int_{\partial\Omega} \delta\theta \varphi n dS = - \int_{\partial\Omega_\varphi} \delta\theta \bar{\varphi} dS. \quad (\text{II.2.30})$$

car  $\delta\theta=0$  sur  $\partial\Omega_\theta$ . En utilisant les équations (II.2.29) et (II.2.30), alors l'équation (II.2.28) devient

$$\int_{\Omega} \delta\theta \rho \dot{U} dV - \int_{\Omega} (\nabla \delta\theta) \boldsymbol{\varphi} dV = \int_{\partial\Omega_\varphi} \delta\theta \bar{\varphi} dV + \int_{\Omega} \delta\theta r dV, \quad (\text{II.2.31})$$

ou encore

$$\nabla \delta\theta / \delta\theta=0 \text{ sur } \partial\Omega_\theta, \int_{\Omega} \delta\theta \rho c_p \dot{\theta} dV - \int_{\Omega} \lambda (\nabla \delta\theta) (\nabla \theta) dV = \int_{\partial\Omega_\varphi} \delta\theta \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} \delta\theta r dV. \quad (\text{II.2.32})$$

qui est la formulation faible du problème de diffusion thermique.

## ii. Discrétisation éléments finis

Sur chaque élément fini, on peut relier le champ de température au vecteur de ddl de température :

$$\theta = \mathbf{N} \mathbf{q}_\theta. \quad (\text{II.2.33})$$

En introduisant l'équation (II.2.33) dans l'équation (II.2.32), on obtient

$$\left[ \int_{\Omega} N \rho c_p \dot{\theta} dV - \lambda \int_{\Omega} (\nabla \otimes N) (\nabla \theta) dV \right] \delta \mathbf{q}_\theta = \left( \int_{\partial\Omega_\varphi} N \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} N r dV \right) \delta \mathbf{q}_\theta. \quad (\text{II.2.34})$$

Cette formulation étant valable pour tous champ de température virtuel  $\delta \mathbf{q}_\theta$ , on peut écrire équation (II.2.28) sous la forme :

$$\int_{\Omega} N \rho c_p \dot{\theta} dV - \lambda \int_{\Omega} (\nabla \otimes N) (\nabla \theta) dV = \int_{\partial\Omega_\varphi} N \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} N r dV, \quad (\text{II.2.35})$$

ou encore

$$\int_{\Omega} N \rho c_p \dot{\theta} dV - \left[ \lambda \int_{\Omega} (\nabla \otimes N) (\nabla \otimes N) dV \right] \mathbf{q}_\theta = \int_{\partial\Omega_\varphi} N \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} N r dV. \quad (\text{II.2.36})$$

Pour calculer cette dérivée temporelle à un temps  $t+\Delta t$ , l'algorithme d'intégration implicite d'Euler est utilisé [6], soit :

$$\dot{\theta}_{t+\Delta t} = \frac{\theta_{t+\Delta t} - \theta_t}{\Delta t}. \quad (\text{II.2.37})$$

où  $\theta_t$  et  $\theta_{t+\Delta t}$  sont respectivement les valeurs de  $\theta$  aux temps  $t$  et  $t+\Delta t$ ,  $t$  correspondant au temps de l'incrément de calcul précédent et  $t+\Delta t$  au temps de l'incrément courant, où l'on recherche la solution du problème de diffusion.  $\theta = \theta_{t+\Delta t}$  est donc le champ de température inconnu que l'on cherche à déterminer, et  $\theta = \theta_t$  est la solution du problème de diffusion à l'incrément précédent, et est donc connu :

$$\int_{\Omega} N \rho c_p \dot{\theta} dV = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} N \rho c_p \theta dV - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} N \rho c_p \theta_t dV. \quad (\text{II.2.38})$$

L'équation (II.2.30) devient alors

$$\left[ \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho c_p N \otimes N dV - \lambda \int_{\Omega} (\nabla \otimes N)(\nabla \otimes N) dV \right] \mathbf{q}_{\theta} \quad (\text{II.2.39})$$

$$= \int_{\partial\Omega_{\varphi}} N \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} N r dV + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} N \rho c_p \theta_i dV$$

On peut ici également définir un vecteur forces généralisées  $\mathbf{F}_{\theta}$  tel que

$$\mathbf{F}_{\theta} = \int_{\partial\Omega_{\varphi}} N \bar{\varphi} dS + \int_{\Omega} N r dV + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} N \rho c_p \theta_i dV. \quad (\text{II.2.40})$$

La matrice de rigidité du problème élément finis thermique est donc

$$\mathbf{K} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho c_p N \otimes N dV - \lambda \int_{\Omega} (\nabla \otimes N)(\nabla \otimes N) dV, \quad (\text{II.2.41})$$

soit

$$\mathbf{K} = \sum_{\text{elements}} \left( \sum_{i \in \{\text{Points de Gauss}\}} \omega_i \frac{\rho c_p}{\Delta t} N(i) \otimes N(i) - \lambda \omega_i (\nabla \otimes N(i)) (\nabla \otimes N(i)) \right). \quad (\text{II.2.42})$$

Le problème de diffusion devient ainsi un problème de recherche d'un vecteur  $\mathbf{q}_{\theta}$  tel que  $\mathbf{h}_{\theta} = \mathbf{0}$ , où

$$\mathbf{h}_{\theta} = \mathbf{K} \mathbf{q}_{\theta} - \mathbf{F}_{\theta}. \quad (\text{II.2.43})$$

### iii. Résolution

La recherche de la solution de cette équation s'effectue comme pour le problème mécanique, en utilisant un algorithme de Newton-Raphson. Dans un problème de diffusion, le Jacobien de la fonction  $\mathbf{h}_{\theta}$  ne peut pas se calculer de manière directe, mais de manière incrémentale.

Comme la matrice de rigidité et le vecteur force généralisée dépendent de  $\Delta t$ , il faut prendre en compte, en plus de la discrétisation spatiale, l'influence de la discrétisation temporelle sur la solution convergée.

En utilisant la méthode implicite d'Euler, la solution d'un problème de diffusion uniquement est stable avec des éléments linéaires. Avec des éléments quadratiques, des oscillations peuvent apparaître, et on peut déterminer un incrément de temps minimal :

$$\Delta t > \frac{\rho c_p}{\kappa} \Delta l^2, \quad (\text{II.2.44})$$

où  $\Delta l^2$  représente la longueur caractéristique des éléments finis [7].

## II. 2. e. Résolution éléments finis d'un problème couplé mécanique-diffusion

En reprenant les modélisations précédentes, on peut écrire un problème de couplage mécanique-diffusion en éléments finis par

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\theta} \\ \mathbf{K}_{\theta u} & \mathbf{K}_{\theta\theta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_\theta \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.2.45})$$

où  $\mathbf{K}_{ij}$  sont des sous-matrices : les matrices de rigidités  $\mathbf{K}_{uu}$  et  $\mathbf{K}_{\theta\theta}$ , de même que les vecteurs forces généralisées  $\mathbf{F}_u$  et  $\mathbf{F}_\theta$ , sont celles des problèmes purement mécanique ou diffusif (voir chapitres II.2.c.ii et II.2.d.ii).  $\mathbf{K}_{\theta u}$  et  $\mathbf{K}_{u\theta}$  représentent les termes de couplage entre diffusion et mécanique. Dans ce problème, on cherche les vecteurs  $\mathbf{q}_u$  et  $\mathbf{q}_\theta$ .

Dans les problèmes découplés, ou pour lesquels les solutions évoluent simultanément mais avec un faible couplage entre les 2 solutions, les matrices  $\mathbf{K}_{\theta u}$  et  $\mathbf{K}_{u\theta}$  deviennent petites par rapport à  $\mathbf{K}_{uu}$  et  $\mathbf{K}_{\theta\theta}$ . Dans ce cas, l'équation (II.2.17) se réduit à

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\theta\theta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_\theta \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.2.46})$$

soit la superposition d'un problème mécanique et d'un problème de diffusion, qui peuvent alors se traiter indépendamment.

Abaqus permet la résolution de plusieurs types de problèmes couplés (quasi-statiques), au travers de procédures spécifiques :

- les procédures standard mécanique ou de diffusion, qui ne résolvent qu'un des deux problèmes. La procédure mécanique ('*Static General*'), par exemple, peut prendre en compte des variations de comportement dues à des champs thermiques imposés en conditions aux limites. Le système alors à résoudre est

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\theta} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.2.47})$$

où les inconnues sont les composantes du vecteur  $\mathbf{q}_u$ , tandis que le vecteur  $\mathbf{q}_\theta$  contient des informations données en conditions aux limites ;

- '*Coupled Temp-Displacement*' qui permet une résolution de problèmes de couplage fort mécanique-diffusion fickienne. Le problème à résoudre est

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\theta} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\theta\theta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_\theta \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.2.48})$$

car il n'y a pas de couplage entre champs mécaniques et diffusion, alors que les grandeurs mécaniques peuvent être affectées par la diffusion. Ici, les inconnues du problème sont les composantes des vecteurs  $\mathbf{q}_u$  et  $\mathbf{q}_\theta$  ;

- '*Mass Diffusion*' permet de résoudre une équation de diffusion transitoire couplée à un champ mécanique imposé en condition initiale. Ce problème est le complémentaire du problème mécanique '*Static General*' et s'écrit

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\theta u} & \mathbf{K}_{\theta\theta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{F}_\theta \end{Bmatrix}. \quad (\text{II.2.49})$$

Les inconnues sont les composantes du vecteur  $\mathbf{q}_\theta$ , tandis que le vecteur  $\mathbf{q}_u$  contient des informations données en conditions aux limites.

Les problèmes visés, dans le cadre de cette thèse, sont des problèmes où champs de contrainte, plasticité et diffusion interagissent, en particulier dans le piégeage. Cette interaction diffusion-plasticité devient encore plus importante dans les cas de chargements complexes où le niveau de déformation plastique est important. Si de plus, on s'intéresse à la fragilisation, la concentration de l'hydrogène influencera la rupture, et la propagation d'une fissure modifiera les champs de contrainte [8], et donc la diffusion. Le problème est donc fortement couplé, et les problèmes de diffusion et mécanique doivent être résolus ensemble.

Sur le plan numérique, un tel couplage implique que tous les termes de la matrice de rigidité du problème couplé soient non nuls, et que les inconnues du problème soient les composantes des vecteurs  $\mathbf{q}_\theta$  et  $\mathbf{q}_u$ . Aucune procédure standard ne permet un tel couplage, et il faut donc l'implémenter.

Pour ce faire, il semble pertinent d'utiliser la procédure '*Coupled Temp-Displacement*' qui est la plus proche de l'objectif fixé : sur quatre sous matrices, trois sont déjà présentes, et les inconnues du problème sont les mêmes que dans l'implémentation visée. Il faut cependant modifier les comportements mécanique et diffusif (par des procédures utilisateurs) afin de forcer le système à créer une matrice de couplage  $\mathbf{K}_{\theta u}$  non nulle, et obtenir une matrice de rigidité complète pour le problème couplé.

C'est le choix qui a été fait dans ce travail.

### ***II. 3. Présentation des procédures utilisateurs***

Dans le code Abaqus, des modifications sont possibles grâce à la possibilité d'écrire des procédures utilisateurs en Fortran 77 [5], et peuvent porter sur les éléments, les conditions aux limites, les comportements mécaniques, etc..

Dans ce paragraphe sont détaillées les procédures qui sont les plus utilisées dans la littérature dans la modélisation des problèmes de couplage diffusion-champs mécanique-rupture.

Dans ce qui suit, conformément aux appellations utilisées dans Abaqus, seront désignés par :

- *step*, un cas de chargement ;
- *incrément*, une étape convergée du calcul pour passer des conditions initiales au cas de chargement actuel (*step*) ;
- *itération*, une étape non convergée de l'*incrément* courant, correspondant à une boucle de l'algorithme de Newton-Raphson.

#### ***II. 3. a. La procédure UMAT :***

Une procédure UMAT est utilisée pour définir un comportement mécanique. Elle est appelée au début de chaque *itération* du calcul, et pour chaque point d'intégration n<sup>o</sup>i du maillage. Cette procédure doit calculer à chaque *itération*, afin qu'Abaqus puisse résoudre le problème

mécanique à l'incrément courant par une procédure de Newton Raphson (voir équations II.2.25 et II.2.26) :

- la contribution du point de Gauss courant à la fonction  $\mathbf{h}_u$ , soit la grandeur  $\boldsymbol{\sigma}(i) = \mathbf{D}(i) : {}^t \nabla \mathbf{N}(i) \mathbf{q}_u$  ;
- la contribution du point de Gauss courant à la matrice tangente locale  $\mathbf{D}(i)$ , qui intervient dans la détermination du Jacobien de  $\mathbf{h}_u$ , c'est-à-dire  $\frac{\partial \mathbf{h}_u}{\partial \mathbf{q}_u}$  (équation II.2.21), soit la grandeur  $\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(i)$ .

Pour chaque point de Gauss (i), et à chaque *itération* de l'algorithme de Newton-Raphson Abaqus fournit à la procédure UMAT

- la valeur de la déformation  $\boldsymbol{\varepsilon}(i)$  à l'*incrément* de calcul précédent ;
- la valeur de la contrainte  $\boldsymbol{\sigma}(i)$  à l'*incrément* de calcul précédent ;
- la valeur de la variation de la déformation  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}(i)$  à l'*itération* précédente.

Il est possible de sauvegarder également des variables internes (STATEV), pour définir par exemple le tenseur de déformation plastique, la déformation plastique équivalente, etc...

### II. 3. b. La procédure UMATHHT

Cette procédure est utilisée pour définir un flux thermique dans la structure. Comme la procédure UMAT, elle est appelée aussi à chaque point d'intégration, et à chaque *itération*, afin de participer à la résolution du problème de diffusion grâce à un algorithme de Newton Raphson.

Cette procédure doit fournir à chaque *itération* (équations II.2.42 et II.2.43) :

- l'énergie interne thermique  $U=c_p\theta$ , le vecteur de flux thermique  $\boldsymbol{\varphi}$  qui sont nécessaires à la définition de la fonction  $\mathbf{h}_\theta$  ;
- la variation de l'énergie U et du flux par rapport à la température et au gradient de température, soient  $\frac{\partial U_{t+\Delta t}}{\partial \theta}(i)$ ,  $\frac{\partial U_{t+\Delta t}}{\partial \nabla \theta}(i)$ ,  $\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \theta}(i)$  et  $\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial (\nabla \theta)}(i)$ . Ces grandeurs permettent de définir la matrice Jacobienne de l'algorithme de Newton-Raphson.

A chaque point d'intégration et à pour chaque *itération*, Abaqus fournit à procédure UMATHHT les informations suivantes :

- la valeur de la température  $\theta(i)$  à l'*incrément* précédent
- la valeur de la variation de la température  $\Delta \theta(i)$  à l'*itération* précédente ;
- le gradient spatial de la température  $\nabla \theta(i)$  à l'*itération* précédente.



### II. 3. c. La procédure UEL.

Cette procédure permet d'implémenter des éléments particuliers dans Abaqus. Elle est très utilisée pour simuler des amorçages et des propagations de fissures par zones cohésives [9].

Cette procédure est appelée à chaque *itération* du calcul global, et doit fournir pour chaque élément utilisateur sa contribution aux grandeurs nécessaires à la mise en œuvre de l'algorithme de Newton-Raphson, soit :

- la valeur pour l'élément utilisateur courant de la fonction  $\mathbf{h}$  définie par

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\theta} \\ \mathbf{K}_{\theta u} & \mathbf{K}_{\theta\theta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_u \\ \mathbf{q}_\theta \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_\theta \end{Bmatrix}, \quad (\text{II.3.1})$$

dans le cas d'un élément ayant une ddl thermique et des ddl mécaniques [9] ;

- le Jacobien de cette fonction par rapport au vecteur de ddl,  $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{q}}$ .

### II. 4. Stratégies d'implémentation du problème couplé : bibliographie

La difficulté dans la prise en compte des interactions hydrogène matériau réside dans le couplage qui existe entre diffusion et champs mécaniques, que ce soit par exemple dans l'expression de la loi d'écrouissage écrite par Sofronis et al. [10]

$$\sigma_Y = \sigma_0 f(C), \quad (\text{II.4.1})$$

ou dans la loi de diffusion :

$$\frac{C_T(1-\theta_T) + C_L}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \nabla \left( -D_L \nabla C_L - \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\epsilon}_p} \frac{\partial \bar{\epsilon}_p}{\partial t} = 0. \quad (\text{II.4.2})$$

Plusieurs stratégies peuvent être trouvées dans la littérature pour prendre en compte de tels couplages dans des codes éléments finis, et en particulier, dans les codes commerciaux pour lequel les sources ne sont pas accessibles, et encore moins modifiables. On s'intéresse ici uniquement aux travaux utilisant Abaqus.

On peut scinder en deux groupes les stratégies utilisées pour permettre la résolution de tels problèmes couplés :

- une résolution séquentielle ou en couplage faible mécanique-diffusion ;
- une résolution en couplage fort.

Dans tous les cas, cette résolution a donné lieu au développement de procédures utilisateurs. Les exemples présentés ci-dessous illustrent les schémas de résolutions de la littérature. La schématisation des algorithmes a été effectuée d'après la compréhension résultant de la lecture des explications des auteurs.

#### II. 4. a. Fissuration en fatigue sous atmosphère d'hydrogène

Le but de cette étude [11] est de développer des outils numériques capables de prédire la propagation de fissure sous chargement cyclique dans un métal.

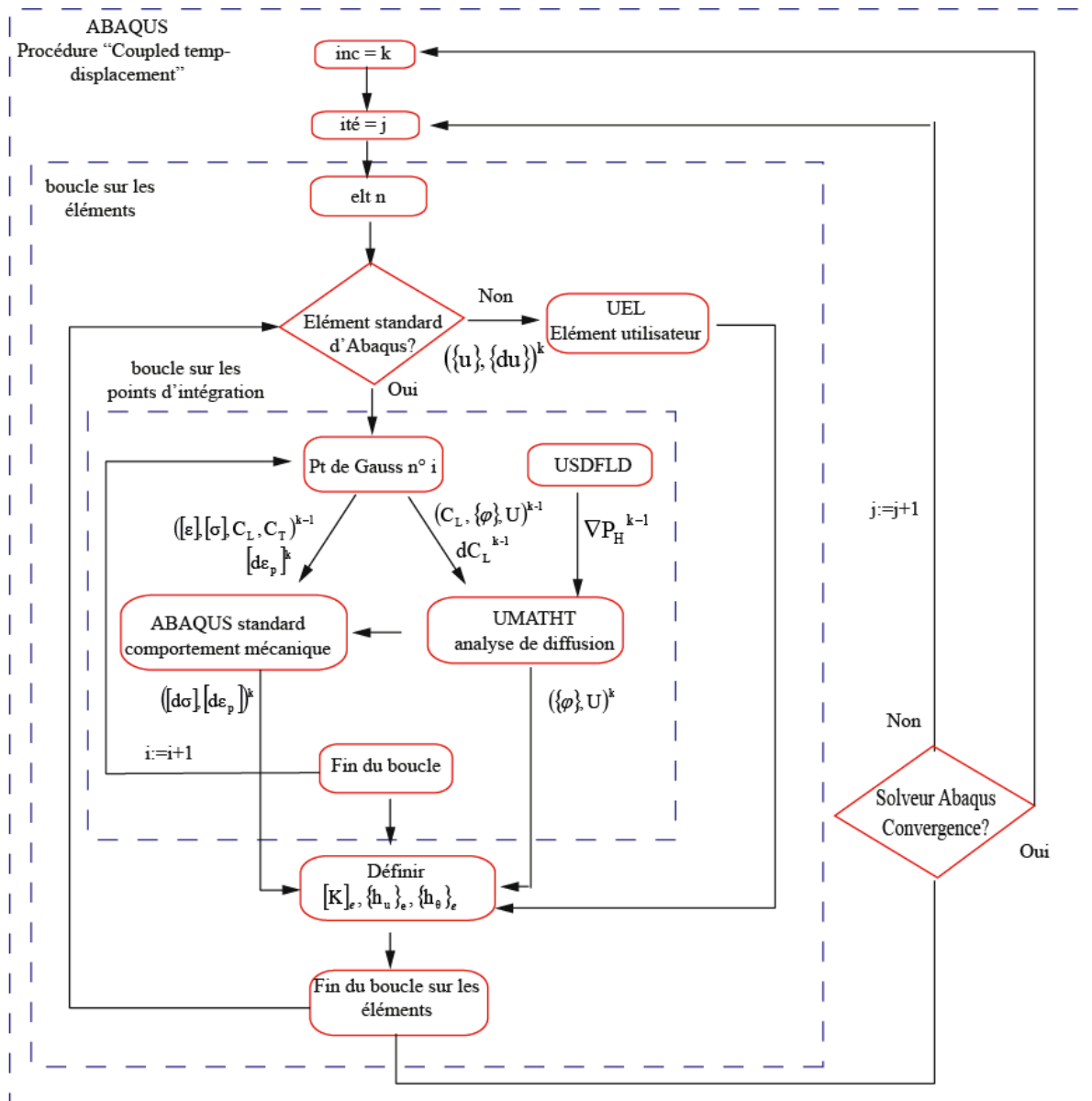


Figure II.4.1 Interprétation du schéma de résolution utilisé dans [11].

Le comportement du matériau est élastoplastique à écrouissage cinématique. Les auteurs ont développé un modèle de zone cohésive associé à une loi de traction-séparation spécifique [12], permettant de prendre en compte l'influence du chargement cyclique et de la concentration en l'hydrogène sur la propagation en fatigue d'une fissure.

La diffusion de l'hydrogène et le champ mécanique est décrite par l'équation de Fick modifiée dans laquelle la diffusion de l'hydrogène est pilotée par le gradient de la concentration de l'hydrogène et le gradient de la pression hydrostatique (équation II.4.2, sans le terme de piégeage :  $C_T=0$ ).

La loi traction-séparation du modèle cohésif a été implémentée dans le code Abaqus en utilisant une procédure UEL. L'équation de diffusion de l'hydrogène considérée est uniquement modifiée par la pression hydrostatique. Elle est implémentée par une procédure UMATHT.

Pour calculer le gradient de la pression hydrostatique, l'UMATHT fait appel à une procédure USDFLD, ce qui donne accès aux grandeurs mécaniques calculées à l'incrément précédent ;

le champ de pression est reconstruit sur chaque élément à l'aide des fonctions de forme  $N$ , et le gradient est ensuite calculé en les dérivant. Le schéma du calcul est donné figure II.4.1.

La résolution de problème couplé diffusion-mécanique ici est donc de type couplage faible. Il utilise le schéma de résolution '*coupled temp-displacement*'. A chaque *itération* de l'*incrément*  $n^{\circ}k$  du calcul :

- Abaqus standard est appelé à chaque point d'intégration des éléments standard (zone non-fissurée) pour définir le comportement mécanique dans l'élément (voir paragraphe II.2.c). Le comportement mécanique utilisé est pris dans la bibliothèque d'Abaqus ;
- la procédure UEL est appelée pour définir (entre autres) la matrice de rigidité des éléments utilisateurs dans la zone « fissurée » ;
- l'UMATHT est appelé à chaque point d'intégration du maillage pour définir le flux d'hydrogène assistée par le champ de pression hydrostatique (équation II.4.2). La procédure USDFLD récupère les valeurs  $P_H^{k-1}$  à l'*incrément* précédent ( $n^{\circ}k-1$ ). Ces valeurs servent à calculer le gradient de la pression hydrostatique.

#### II. 4. b. Prédiction de la fissuration assistée par l'hydrogène dans un acier 25%Cr

Dans cet exemple, les auteurs s'intéressent à la fissuration assistée par l'hydrogène dans un acier duplex inoxydable à 25%Cr [13]. Le comportement du matériau est supposé élastoplastique isotrope. Un modèle cohésif a également été utilisé pour étudier la propagation de la fissure, avec une loi de traction-séparation modifiée pour prendre en compte l'influence de la concentration en hydrogène.

La simulation a été effectuée sur des échantillons entaillés en U ou en V ; les fissures s'amorcent au voisinage de ces entailles.

La loi traction-séparation du modèle cohésive a été implémentée dans le code Abaqus en utilisant une procédure UEL ; la diffusion assistée par le champ de contrainte a été prise en compte grâce à la procédure standard Abaqus '*mass diffusion*', en transitoire (le piégeage n'est pas considéré).

La résolution de problème couplé diffusion-mécanique ici est de type séquentiel (figure II.4.2) : à chaque *incrément* de chargement, une analyse élastoplastique a été effectuée pour obtenir le champ mécanique, dont la pression hydrostatique. Ensuite, ce champ de pression hydrostatique est passé comme donnée d'entrée pour piloter la diffusion de l'hydrogène dans une analyse '*mass diffusion*'. Cette analyse permet d'avoir une distribution d'hydrogène sur les éléments cohésifs; un dernier calcul mécanique utilisant ces éléments est effectué afin de faire propager la fissure, en utilisant comme conditions initiales le champ de contrainte du premier calcul et le champ de diffusion du second.

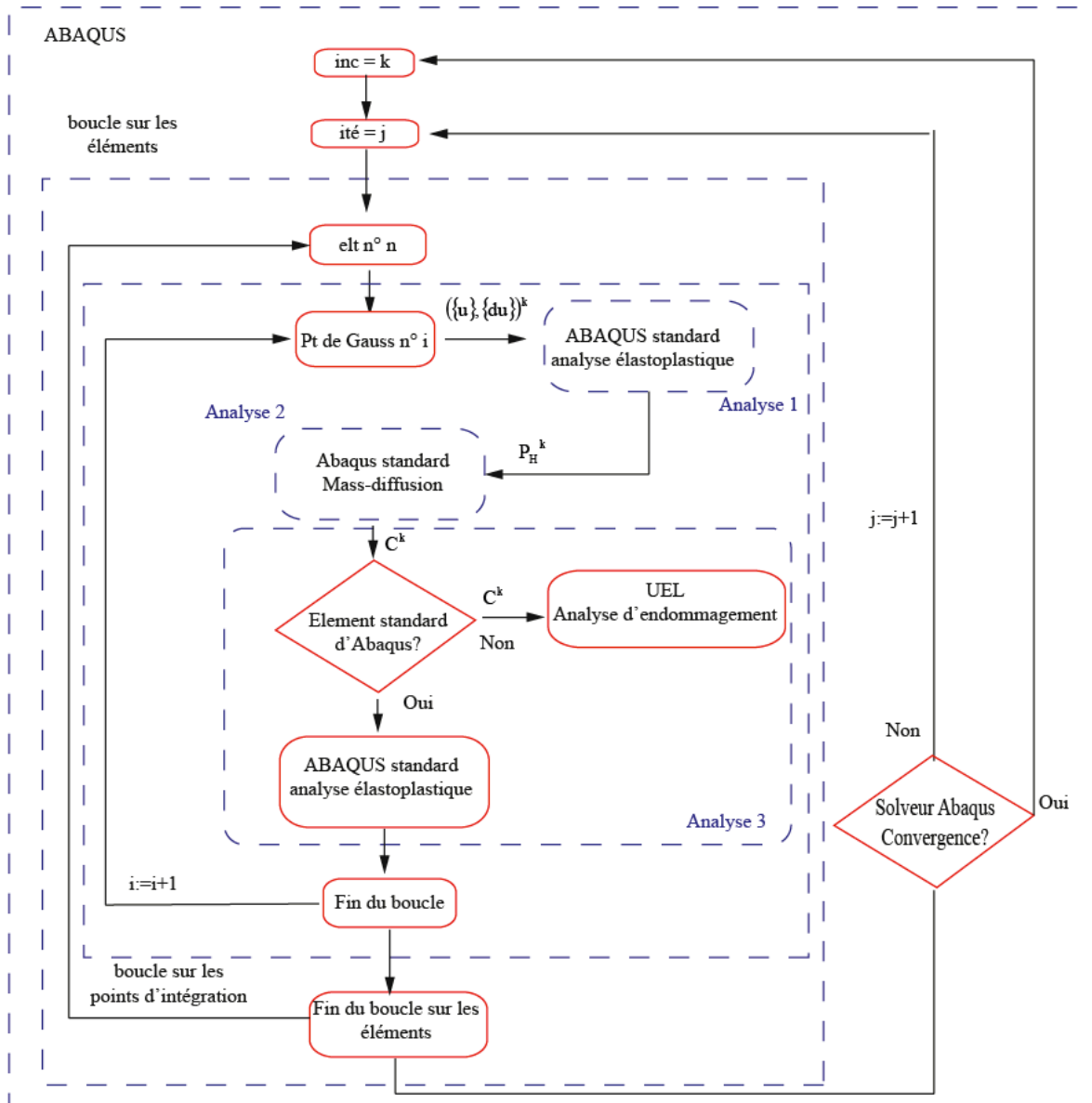


Figure II.4.2 Interprétation du schéma de résolution utilisé dans [13].

#### II. 4. c. Localisation de la plasticité induite par l'hydrogène

Dans cet exemple [14], les auteurs s'intéressent à l'influence de l'hydrogène sur la localisation de la plasticité lors de la croissance des porosités dans un acier A522B.

Le comportement du matériau est supposé élastoplastique à écrouissage isotrope. La diffusion de l'hydrogène est calculée en régime permanent : la concentration en hydrogène diffusif  $C_L$  est déduite de la répartition en hydrogène diffusif initiale  $C_L^0$  et du champ de pression hydrostatique, en se basant une statistique de Fermi-Dirac [14] (voir chapitre I.3.a) :

$$\frac{\theta_L}{1-\theta_L} = \frac{\theta_L^0}{1-\theta_L^0} \exp\left(\frac{-P_H \bar{V}_H}{RT}\right) \quad (\text{II.4.3})$$

où  $\theta_L^0 = C_L^0 / \beta N_L$  est le taux d'occupation initial de sites interstitiels ;  $\theta_L$  et  $\bar{V}_H$  ont la même signification que précédemment. La concentration de l'hydrogène piégé est donnée par

$$C_T = \alpha N_T (\bar{\varepsilon}_p) \theta_T, \quad (\text{II.4.4})$$

où  $N_T$  et  $\theta_T$  ont la même signification que précédemment.

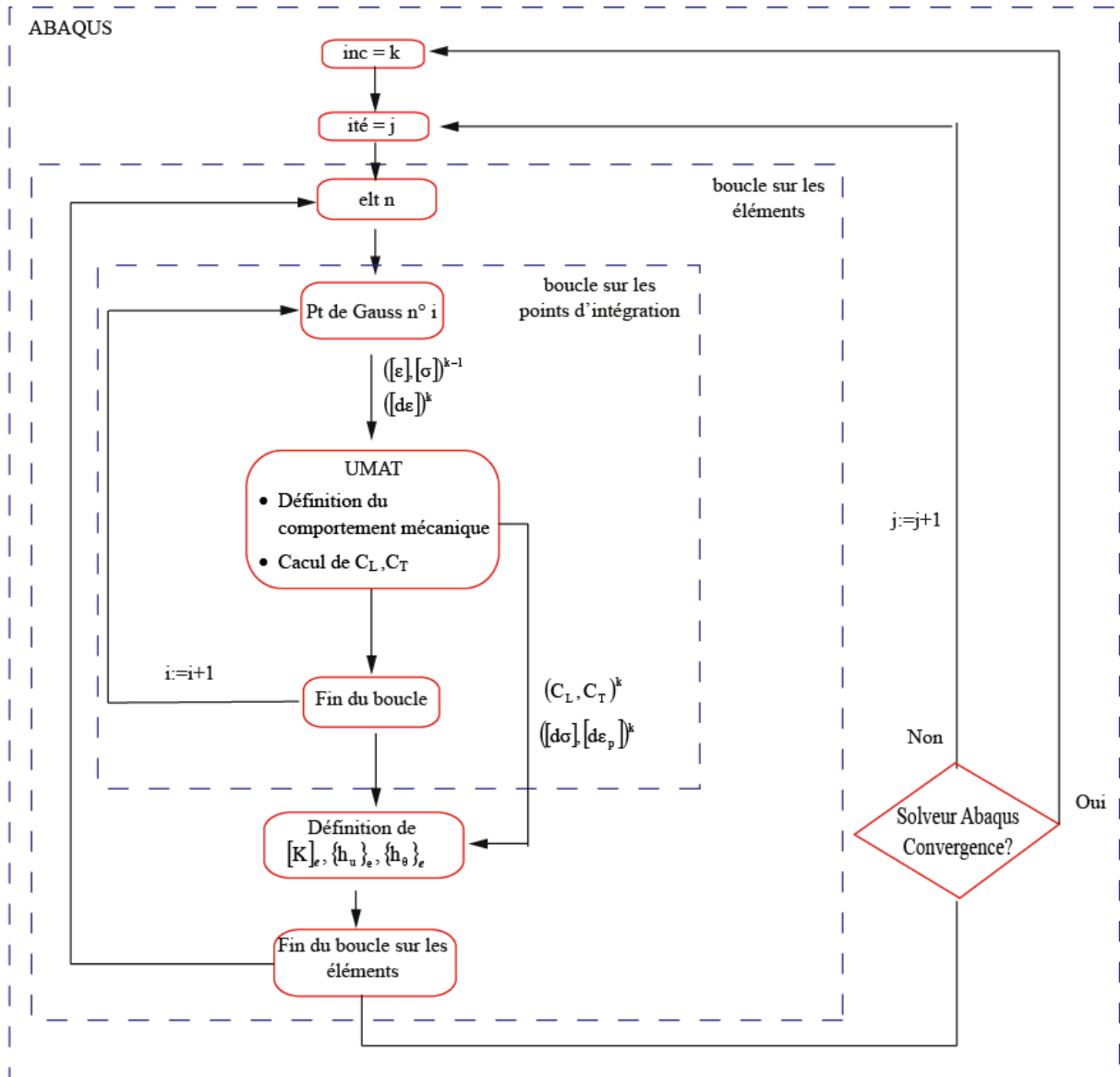


Figure II.4.3 Interprétation du schéma de résolution utilisé dans [14].

Le problème étudié est un couplage fort entre la répartition d'hydrogène, traitée en régime permanent, et le champ mécanique.

Dans ce travail le comportement mécanique du matériau a été défini par une procédure UMAT pour pouvoir calculer la pression hydrostatique  $P_H$ . La concentration  $C_L$  est considérée comme une variable interne de l'UMAT, et est calculée à partir de  $C_L^0$  et  $P_H$  grâce à l'équation II.3.1. Le schéma de résolution de ce problème est donné sur la figure II.4.3.

#### II. 4. d. Fragilisation dans les alliages d'aluminium 7xxx

Dans son travail de thèse, Ben Ali [8] a étudié la compétition entre la vitesse de diffusion de l'hydrogène et la vitesse de fissuration intergranulaire dans les alliages d'aluminium de la série 7XXX.

Un modèle de zone cohésive (implémenté par une procédure UEL) a été utilisé pour modéliser la propagation de fissure, en considérant une loi contrainte-ouverture dépendant de l'hydrogène. Le matériau est supposé élastique et la diffusion de l'hydrogène est considérée dépendante uniquement du gradient de la pression hydrostatique.

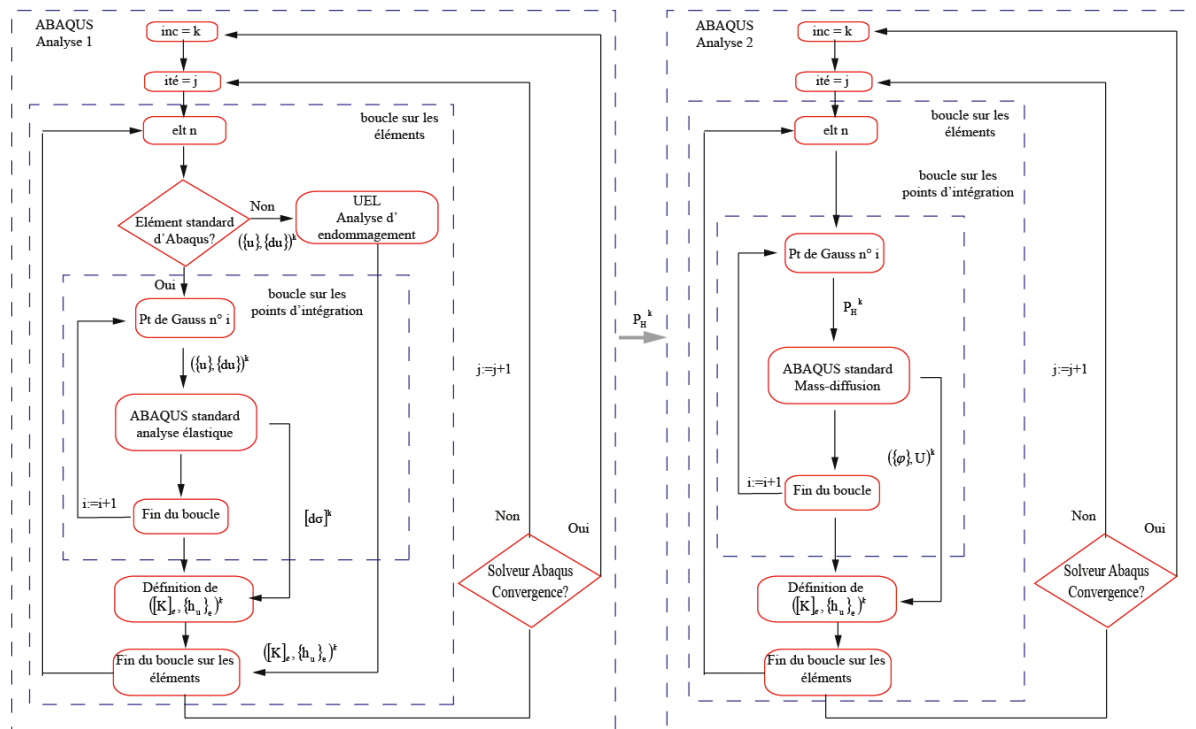


Figure II.4.4 Interprétation du schéma de résolution utilisé dans [8].

La résolution du problème est de type séquentiel : dans un premier temps, une simulation mécanique a été effectuée avec Abaqus standard pour obtenir le champ de contrainte solution du problème de propagation de fissure. A l'issue de cette analyse, le champ de pression hydrostatique  $P_H$  est utilisé pour piloter la diffusion de l'hydrogène par une procédure 'mass-diffusion' (figure II.4.4).

#### II. 4. e. Implémentation de l'équation couplée de transport de l'hydrogène [15]

Ce travail a pour but l'intégration dans Abaqus de l'équation (II.4.2) de la diffusion de l'hydrogène assisté par la plasticité et le gradient de pression hydrostatique. La présence de l'hydrogène peut également provoquer une déformation de dilatation [16]. L'implémentation est validée sur configuration mécanique de Krom et al. [17] (voir paragraphe III.2.b).

Le comportement de matériau est élastoplastique- écrouissage isotrope. Il a été défini par une procédure UMAT, afin de calculer le gradient de la pression hydrostatique à chaque itération du code Abaqus. Le flux d'hydrogène assisté par le champ mécanique, de même que le piégeage, est introduit par une procédure UMATHT.

Le schéma de résolution du problème est donc un couplage fort, basé sur la procédure de calcul 'coupled temp-displacement'. Pour chaque itération du calcul :

- l'UMAT est appelé à chaque point d'intégration et Abaqus lui donne les informations concernant la contrainte et la déformation au début de l'incrément (voir paragraphe II.3.a). L'UMAT calcule alors le champ de contrainte et son Jacobien.

Elle calcule également le gradient de la pression hydrostatique  $\nabla P_H$  à chaque point d'intégration, en se servant des champs de contrainte de l'*itération* précédente ;

- l'UMATH est appelé pour calculer le flux d'hydrogène à l'*itération* courante, en se servant des grandeurs calculées par l'UMAT, soit, le gradient de la pression hydrostatique et la déformation plastique cumulée.

Le schéma de résolution est donné sur la figure II.5.1.

## II. 5. Implémentation du problème couplé mécanique-diffusion

Pour effectuer la résolution du problème de couplage, le choix s'est orienté vers la stratégie proposée par Oh [15] (paragraphe II.4.e), qui utilise une procédure UMAT pour calculer le gradient de la pression hydrostatique (qui n'est pas une sortie disponible dans Abaqus) et une procédure UMATH pour redéfinir le flux d'hydrogène. Ce choix se justifie par sa capacité de résoudre simultanément à l'incrément courant le problème mécanique et diffusion.

**Tableau II.5.1.** Correspondance diffusion de chaleur-diffusion de matière (d'après [15]).

Analyse du transfert thermique (Abaqus)		Analyse de diffusion de l'hydrogène	
Variable	Description	Variable	Description
U	Energie thermique	$C_L + C_T$	Concentration totale
$\theta$	Température	$C_L$	Concentration d'hydrogène diffusif
$c_p$	Chaleur spécifique	$\frac{\partial(C_L + C_T)}{\partial C_L}$	Coefficient de diffusion effectif $D_{eff}$ et évolution de $N_T$ avec la déformation plastique $\frac{\partial N_T}{\partial \bar{\epsilon}_p}$
$\rho$	Masse volumique	1	
$\lambda$	Conductivité	$D_L$	Diffusivité

Les calculs Abaqus seront donc effectués en utilisant la procédure de résolution '*coupled temp-displacement*' (paragraphe II.2.e), le degré de liberté de température étant utilisé pour la concentration en hydrogène.

Ci-dessus est donné le tableau de correspondance entre les grandeurs thermiques transmises et/ou définies dans la procédure UMATH, et celles de diffusion, pour illustrer la correspondance entre les variables de l'analyse du transfert thermique et l'analyse de diffusion de l'hydrogène.

Ceci va impliquer, nécessairement, de définir également le comportement mécanique dans la procédure UMAT, y compris pour des lois existants déjà en standard dans Abaqus (plasticité isotrope, etc...).

La stratégie d'implémentation et le développement des outils nécessaires sont présentés ci-après.

## II. 5. a. Algorithme de résolution des problèmes mécanique et de diffusion

Le détail de la stratégie adoptée, inspirée des travaux de Oh [15] est donné sur la figure II.5.1.

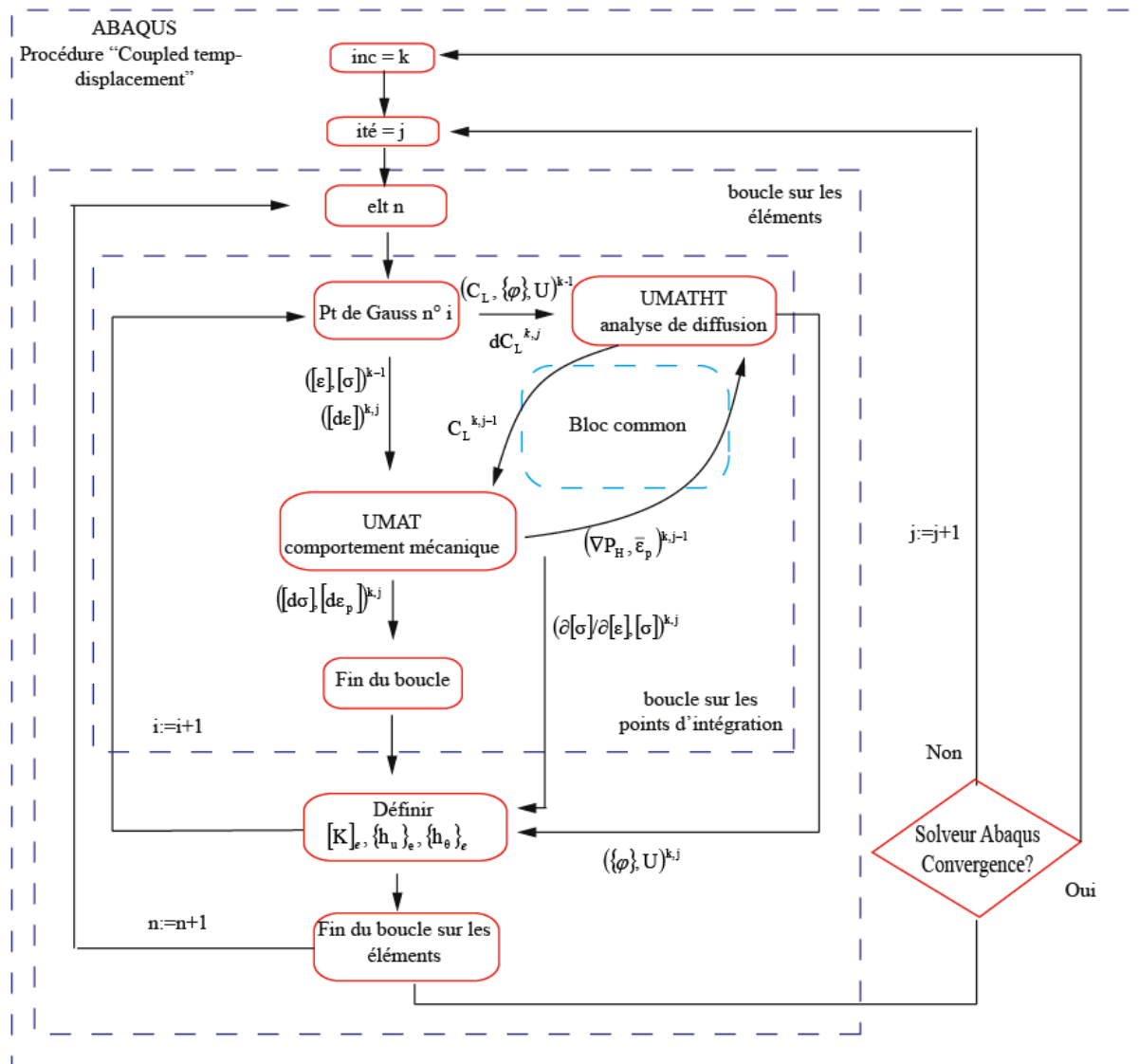


Figure II.5.1 Implémentation des procédures utilisateurs dans Abaqus.

L'incrément  $k-1$  étant convergé (pour  $k>1$ ), Abaqus recherche la solution pour l'incrément  $k$ . Considérons le calcul à l'itération  $j$  de l'incrément  $k$ .

Abaqus fait appel à la procédure UMAT pour chaque point de Gauss du maillage. La procédure définit l'évolution du champ de contrainte. Elle stocke également la valeur de la pression hydrostatique et de la déformation plastique équivalente. A la fin de l'itération  $j$ , le champ de pression hydrostatique est reconstruit sur les éléments, et son gradient calculé. En effet, il est nécessaire de connaître la valeur du champ de contraintes en tous les points de Gauss du maillage pour pouvoir effectuer ce calcul (paragraphe II.6).

A l'itération  $j+1$ , la procédure UMATHT va se servir de la valeur de ce gradient calculé à l'itération précédente pour calculer le flux d'hydrogène.

Les valeurs des différentes variables définies dans les procédures UMAT et UMATHT peuvent être stockées par Abaqus dans des grandeurs STATEV (variables d'état) ; elles sont



de plus stockées dans des blocs *commons* pour faciliter le dialogue entre les différentes procédures utilisateurs et optimiser le temps d'exécution du programme.

A chaque *itération* de l'algorithme de Newton-Raphson, les champs mécaniques sont réévalués grâce à la procédure UMAT et transmis à la procédure UMATHT, qui réévalue à son tour la distribution de diffusion  $C_L^{k,j}$  (et définit la concentration d'hydrogène piégé  $C_T^{k,j}$ ).

Lorsque ces *itérations* tendent à donner une solution mécanique convergée, alors, la valeur des champs mécaniques cesse d'évoluer de façon notable et est proche de la solution de l'*incrément* courant. Le gradient de pression hydrostatique qui est transmis à l'UMATHT lui aussi devient proche de la solution de l'incrément courant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{UMAT : } \left( \boldsymbol{\sigma}^{k,j}, \boldsymbol{\varepsilon}^{k,j}, \boldsymbol{\varepsilon}_p^{k,j}, \dots \right) \xrightarrow{j \rightarrow +\infty} \left( \boldsymbol{\sigma}^k, \boldsymbol{\varepsilon}^k, \boldsymbol{\varepsilon}_p^k, \dots \right) \\ \text{UMATHT : } \left( C_L^{k,j} \left( \nabla P_H^{k,j-1} \right), C_T^{k,j} \left( C_L^{k,j}, \boldsymbol{\varepsilon}_p^{k,j} \right) \right) \xrightarrow{j \rightarrow +\infty} \left( C_L^k \left( \nabla P_H^k \right), C_T^k \left( C_L^k, \boldsymbol{\varepsilon}_p^k \right) \right) \end{array} \right. \quad (\text{II.5.1})$$

Les grandes lignes du développement des procédures UMATHT sont présentées ci-dessous : La définition du flux d'hydrogène, considérant que tous les champs mécaniques sont disponibles, de même que la définition d'une population d'hydrogène piégé, est directe.

### II. 5. b. Quelques précision du développement de la procédure UMATHT

Considérons l'*incrément*  $k$  du problème convergé. La solution à l'*incrément*  $k+1$  est recherchée par un algorithme de Newton-Raphson. Considérons l'*itération*  $j+1$  de cet algorithme.

Au début de cette *itération*, la concentration en hydrogène diffusif  $C_L^{k+1,j}$ , sa variation  $\delta C_L^{k+1,j+1}$  et son gradient spatial  $\nabla C_L^{k+1,j+1}$  sont donnés par Abaqus à la procédure UMATHT.

Les variables mécaniques calculées dans l'UMAT et qui sont nécessaires à l'équation de diffusion couplée ou à la définition de l'hydrogène piégé sont transmises par bloc *common* pour tous les points de Gauss du maillage (figure II.5.1). Ainsi, le gradient de la pression hydrostatique  $\nabla P_H^{k+1,j}$  (pour l'itération précédente) ou la déformation plastique équivalente  $\bar{\varepsilon}_p^{k+1,j+1}$  sont disponibles également.

Dans la procédure UMATHT, l'itération courante nécessite (voir II.3.b) :

- le vecteur de flux d'hydrogène diffusif :

$$\boldsymbol{\varphi}^{k+1,j+1} = -D_L \nabla C_L^{k+1,j+1} + \frac{D_L C_L^{k+1,j+1} \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H^{k+1,j} ; \quad (\text{II.5.2})$$

- sa dérivée par rapport à la concentration en hydrogène diffusif :

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial C_L} \right)^{k+1,j+1} = \frac{D_L C_L^{k+1,j+1} \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H^{k+1,j} ; \quad (\text{II.5.3})$$

- sa dérivée par rapport au gradient spatial de la concentration en hydrogène diffusif :

$$\left[ \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \nabla C_L} \right]^{k+1,j+1} = -D_L \mathbf{I} ; \quad (\text{II.5.4})$$

- la dérivée partielle de la concentration d'hydrogène total par rapport à  $C_L$  :

$$\left. \frac{\partial C_{total}}{\partial C_L} \right)^{k+1,j+1} = \frac{C_T^{k+1,j+1} (1 - \theta_T^{k+1,j+1}) + C_L^{k+1,j+1}}{C_L^{k+1,j+1}} ; \quad (II.5.5)$$

- la quantité totale d'hydrogène par unité de volume :

$$C_{total}^{k+1,j+1} = C_{total}^k + \left. \frac{\partial C_{total}}{\partial C_L} \right)^{k+1,j} \delta C_L^{k+1,j+1} + \left. \frac{\partial C_{total}}{\partial \varepsilon_p} \right)^{k+1,j} \delta \bar{\varepsilon}_p^{k+1,j}, \quad (II.5.6)$$

avec

$$\frac{\partial C_{total}}{\partial t} = \frac{C_T (1 - \theta_T) + C_L}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\varepsilon}_p} \frac{\partial \bar{\varepsilon}_p}{\partial t} ; \quad (II.5.7)$$

- la dérivée partielle de la quantité de l'hydrogène  $C(C_L, \nabla C_L, \bar{\varepsilon}_p)$  par rapport au gradient spatial  $\nabla C_L$ , ce qui ici est un tenseur nul (car  $C = C_L + C_T(\bar{\varepsilon}_p)$ ).

Enfin, la concentration d'hydrogène piégé est définie par :

$$C_T^{k+1,j+1} = C_T^k + \left. \frac{\partial C_T}{\partial C_L} \right)^{k+1,j+1} \delta C_L^{k+1,j+1} = C_T^k + \frac{C_T^{k+1,j} (1 - \theta_T^{k+1,j})}{C_L^{k+1,j+1}} \delta C_L^{k+1,j+1}. \quad (II.5.8)$$

La concentration en hydrogène diffusif est alors une sortie standard d'Abaqus (NT11), tandis que la concentration en hydrogène piégé est enregistrée dans une variable STATEV, et ce pour tous les points de Gauss du maillage.

## II. 6. Calcul du gradient de la pression hydrostatique

Le calcul de ce gradient nécessite et donc justifie le besoin de développer une procédure UMAT, que le comportement matériau utilisé existe ou non en standard dans le code.

Ce calcul est délicat, car les procédures utilisateurs de comportement sont appelées pour chaque point de Gauss du maillage, et aucune information sur les éléments, leur connectivité, et le champ de pression hydrostatique au voisinage du point de Gauss courant n'est transmise par le code.

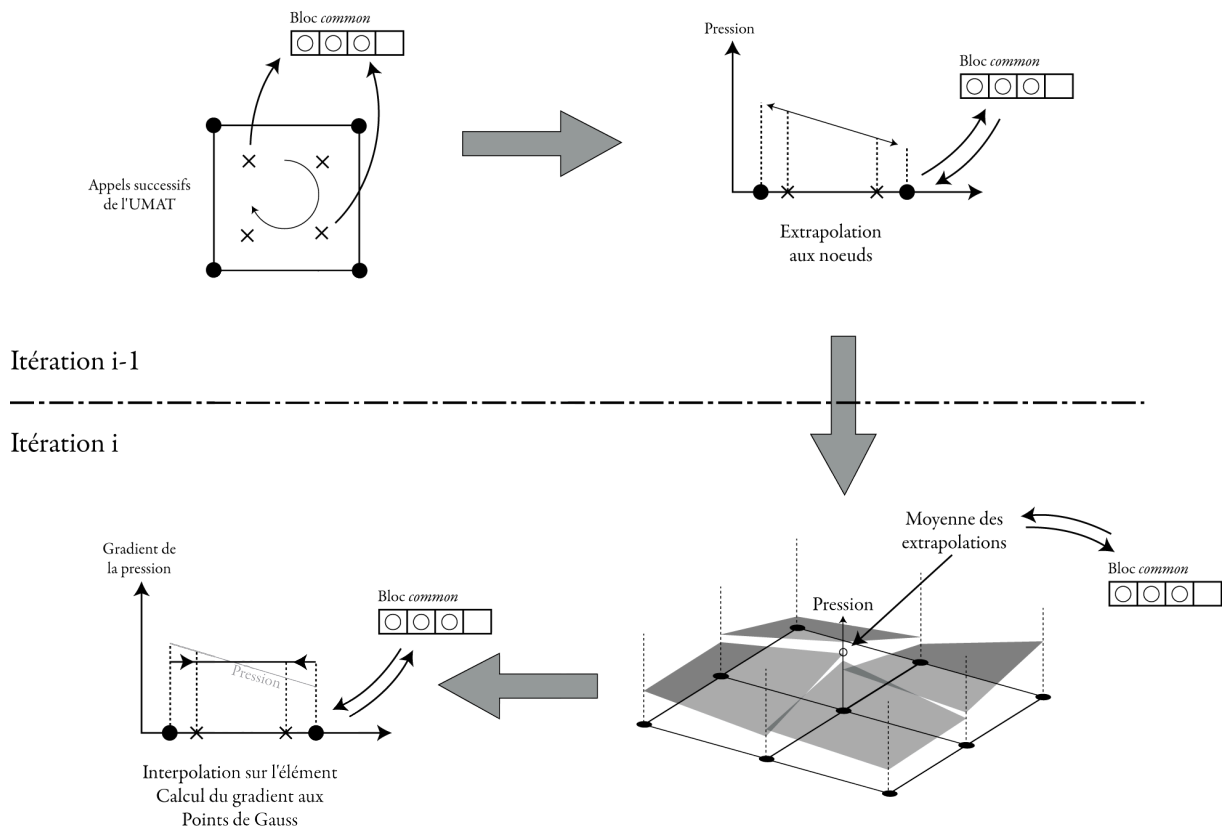
Le programme de calcul du gradient a été implémenté dans toutes les UMATs utilisées dans ce travail.

L'algorithme de calcul du gradient de la pression hydrostatique est présenté dans une première partie, puis est validé sur une configuration simple.

### II. 6. a. Algorithme de calcul

Pour avoir accès aux informations manquantes au point de Gauss courant (par exemple le champ de contrainte dans l'élément), la solution retenue a été de reconstruire le champ de contrainte sur l'élément et sur les éléments voisins (ce qui nécessite de connaître le maillage au voisinage de chaque point de Gauss).

Le calcul est présenté schématiquement sur la figure II.6.1.



**Figure II.6.1** Schéma de calcul du gradient de pression hydrostatique.

Considérons l'incrément  $k$  d'Abaqus, et la  $i-1^{\text{eme}}$  itération de l'algorithme de Newton-Raphson.

Au fur et à mesure de l'appel de la procédure UMAT par les points de Gauss du maillage, leurs coordonnées actuelles et le champ de contrainte de l'itération courante sont sauvegardées dans des blocs *common*.

Une fois que tous les points de Gauss d'un élément ont été appelés, l'élément est reconstruit et la pression hydrostatique  $P_H$  extrapolé aux nœuds grâce aux fonctions de forme de l'élément

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{noeud} = \mathbf{N}(1/\xi_{Gauss}, 1/\eta_{Gauss}, 1/\zeta_{Gauss}) \mathbf{X}_{Gauss} \\ \mathbf{P}_{H,noeud} = \mathbf{N}(1/\xi_{Gauss}, 1/\eta_{Gauss}, 1/\zeta_{Gauss}) \mathbf{P}_{H,Gauss} \end{cases} \quad (\text{II.6.1})$$

$\mathbf{N}$  représente ici la matrice des fonctions de forme de l'élément de référence, et  $(\xi_{Gauss}, \eta_{Gauss}, \zeta_{Gauss})$  les coordonnées des points de Gauss dans le repère de référence de l'élément fini. Ces valeurs sont également stockées dans des blocs *common*.

Cette opération concerne des éléments bilinéaires à 4 nœuds et intégration complète à 4 points de Gauss (CPE4, 2D déformation plane), et les éléments à 8 nœuds (C3D8, en 3D), avec intégration complète à 8 points de Gauss. Elle est plus simple dans ces cas parce que tous les éléments finis sont de même type, et que donc, à la fois les polynômes d'interpolation sur l'élément, et les coordonnées des points d'intégration dans l'élément fini de référence sont connus. C'est pour cela que cette procédure a été développée uniquement pour un seul type d'élément en 2D et en 3D. L'extension à d'autres types d'éléments finis ne pose pas de

difficultés particulières, mais demande du temps, qui a été consacré à l'application des procédures de couplage.

Au tout début de la  $i^{\text{ème}}$  itération (au premier point de Gauss du premier élément), la valeur moyenne de la pression hydrostatique est calculée sur chaque nœud du maillage, à l'aide des valeurs extrapolées sur tous les éléments voisins du nœud. Une fois cette opération effectuée sur le maillage dans son ensemble, le champ de pression hydrostatique est interpolé sur tous les éléments finis, et les valeurs de son gradient calculées en chaque point de Gauss :

$$\nabla P_{H, Gauss} = \nabla N(\xi_{Gauss}, \eta_{Gauss}, \xi_{Gauss}) \mathbf{J} P_{H, Noeud} \quad (II.6.2)$$

avec  $\mathbf{J}$  la matrice Jacobienne de l'élément

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \end{bmatrix}. \quad (II.6.3)$$

Certains auteurs [11,18] n'effectuent pas l'étape de calcul de la moyenne des pressions sur chaque nœud, et n'ont donc pas besoin de connaître la connectivité des éléments voisins de chaque nœud ; ils doivent cependant reconstruire le champ mécanique sur tout l'élément fini courant. Suivant la démarche de Oh [15], il a été préféré ici d'effectuer cette moyenne pour éviter les erreurs liées à la linéarité des champs mécaniques sur les éléments (voir l'exemple de validation au paragraphe II.6.b).

### II. 6. b. Validation du calcul du gradient de la pression hydrostatique.

Pour valider la procédure précédente, une configuration simple pour laquelle la variation spatiale de la pression hydrostatique est connue a été utilisée.

La structure utilisée est un cube de 30 mm d'arrête (figure II.6.2). Il est soumis en chaque point à un déplacement quadratique dans une direction (par exemple, Z), de la forme  $u_z = \alpha Z^2 + \beta Z + \gamma$ . Des conditions de symétrie sont appliquées sur les faces  $Y=0$  et  $Z=0$ . Le matériau est ici considéré élastique isotrope (de module d'Young E et de coefficient de Poisson  $\nu$ ).

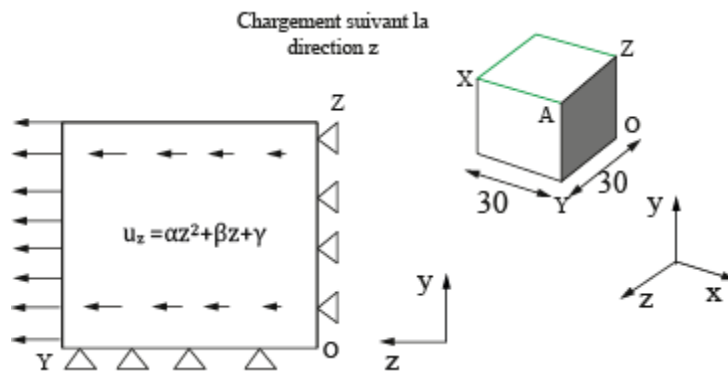


Figure II.6.2 Géométrie et conditions aux limites du problème.

Ce déplacement permet d'obtenir un champ de pression hydrostatique linéaire en Z. En effet, la déformation dans cette direction est alors

$$\varepsilon_{zz} = \frac{du_z}{dZ} = 2\alpha Z + \beta. \quad (II.6.4)$$

Les autres composantes du tenseur de déformation sont nulles. La loi de Hooke permet d'écrire une relation entre la pression hydrostatique et la déformation

$$P_H = -\frac{E}{3(1-2\nu)} \varepsilon_{zz} = -\frac{E(2\alpha Z + \beta)}{3(1-2\nu)}. \quad (\text{II.6.5})$$

Toutes les composantes du gradient de la pression hydrostatique sont donc constantes, et non nulles seulement dans la direction Z :

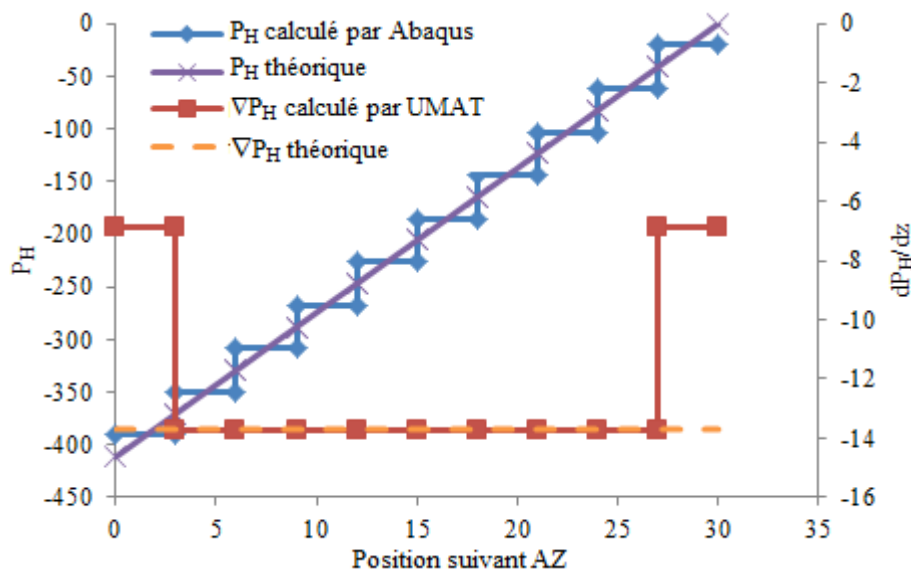
$$\begin{cases} \frac{\partial P_H}{\partial X} = \frac{\partial P_H}{\partial Y} = 0 \\ \frac{\partial P_H}{\partial Z} = \frac{dP_H}{dZ} = \frac{2\alpha E}{3(1-2\nu)} \end{cases} \quad (\text{II.6.6})$$

Ce déplacement a été imposé dans un calcul Abaqus, en utilisant les paramètres donnés dans le tableau II.6.1. Le maillage utilisé est un maillage régulier, composé de 1000 éléments tri-linéaires à 8 nœuds (C3D8), à intégration complète (8 points de Gauss). Le comportement mécanique et la valeur du gradient sont déterminés par une procédure UMAT.

**Tableau II.6.1** Paramètres utilisés dans la validation du calcul du gradient de la pression hydrostatique.

E (MPa)	$\nu$	$\alpha$ (mm <sup>-1</sup> )	$\beta$	$\gamma$ (mm)
197500	0,3	0,0375/900	0	0

Le résultat de ce calcul est montré sur la figure II.6.3, sur laquelle on a tracé l'évolution de la pression hydrostatique et de son gradient le long de l'arrête AZ du cube (voir figure II.6.2).



**Figure II.6.3** Pression hydrostatique et sa dérivée par rapport à Z le long de l'arrête AZ.

On constate tout d'abord que la pression hydrostatique calculée par Abaqus aux points de Gauss est constante sur chaque élément (à cause de l'interpolation linéaire des champs mécaniques sur les éléments finis) ; si l'on n'extrapole pas la valeur aux nœuds, et que l'on ne calcule pas la moyenne de ces extrapolations sur chaque nœud, le calcul du gradient de la

pression sera uniformément nul dans toutes les directions : il est donc très important d'effectuer cette moyenne avant de calculer le gradient.

On remarque ensuite que la moyenne calculée aux nœuds correspond à la valeur théorique de la pression hydrostatique (équation II.6.5). Pour les nœuds extrêmes, la pression donnée par le code éléments finis correspond à celle calculée au point de Gauss le plus proche, et est donc différente de la valeur théorique. Pour les éléments frontières, la pression calculée aux nœuds sera donc erronée. Cela implique que l'algorithme calcule la valeur exacte de la dérivée de la pression hydrostatique par rapport à  $Z$  (courbe rouge) pour tous les éléments intérieurs, mais que cette valeur est fautive (ici, divisée par deux) dans les éléments frontière.

Ce problème sur les nœuds frontière est intrinsèque aux éléments finis, sur lequel la forme des champs mécaniques (ici la pression hydrostatique) est approximée. Sauf pour les déplacements, Abaqus calcule les grandeurs aux points de Gauss du maillage, et utilise les fonctions de forme des éléments pour les interpoler sur l'élément. Ces champs sont moyennés aux nœuds dans l'affichage uniquement (moyenne qui peut être désactivée). Un traitement spécifique serait donc nécessaire pour tenter d'améliorer la précision du calcul du gradient en ces points, sachant que les hypothèses pertinentes d'extrapolation ne sont pas évidentes à formuler dans le cas général. Ce point n'a pas été approfondi dans ce travail, en considérant que les erreurs éventuelles sur les nœuds frontières peuvent être limitées en utilisant un maillage adapté (raffiné).

Si on conduit les calculs pour tester la dérivée partielle de la pression hydrostatique selon la direction  $X$ ,  $Y$ , on obtient des résultats similaires.

## ***II. 7. Conclusion***

Dans ce chapitre, le principe d'intégration d'une équation de diffusion couplée dans Abaqus, en se servant des procédures utilisateurs UMATH et UMAT a été présentée. Ces procédures permettent d'implémenter le couplage mécanique-diffusion pour n'importe quel comportement mécanique, qui doit être défini dans une procédure UMAT. La détermination des champs mécaniques et de concentration d'hydrogène s'effectue simultanément.

La stratégie d'implémentation adoptée est celle qui semblait la plus pertinente par rapport aux problèmes potentiels à traiter, et le calcul du gradient de la pression hydrostatique en chaque point de Gauss du maillage a été expliqué, pour chaque *itération* du code éléments finis. Ce calcul est un point essentiel de la stratégie d'implémentation retenue.

Le test sur une configuration simple de variation de pression connue, a montré que ce calcul donne une description correcte sur les évolutions spatiales, en raffinant le maillage aux frontières du domaine.

## ***Bibliographie***

- [1] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, et J.Z. Zhu, *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. 2005: Elsevier.
- [2] J.-C. Craveur. *Modélisation par éléments finis : Cours et exercices corrigés*. 2008: Dunod.
- [3] G. Bézine, *Modélisation par éléments finis*, cours de l'Ecole National supérieur de Mécanique et Aérotechnique (ENSMA), vol. 2, p. 19, 2002-2003.

- [4] *Abaqus v6.8. Theory manual, paragraph 4.3.2 "isotropic elasto-plasticity"*. 2008: Dassault systems.
- [5] *Abaqus user subroutines references manual 2011*.
- [6] A. Iserles, *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. 1996: Cambridge University Press.
- [7] *Abaqus Analysis Users's Manual 2011, paragraphe 6.5.2*.
- [8] B. Ali, *Caractérisation et modélisation micromécanique de la propagation de fissures fragiles par l'effet de l'hydrogène dans les alliages AA7xxx*. Thèse doctorat. Ecole des Mines Saint-Etienne, 2011.
- [9] Y. Charles, et al., *Numerical modeling of the Disk Pressure Test up to failure under gaseous hydrogen*. Journal of Materials Processing Technology, 2012. **212**(8): p. 1761-1770.
- [10] P. Sofronis, Y. Liang, et N. Aravas, *Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys*. European Journal of Mechanics A/Solids, 2001. **20**(6): p. 857-872.
- [11] C. Moriconi, G. Henaff, et D. Halm, *Influence of hydrogen coverage on the parameters of a cohesive zone model dedicated to fatigue crack propagation*. Procedia Engineering, 2011. **10**(0): p. 2657-2662.
- [12] N. Chandra, et al., *Some issues in the application of cohesive zone models for metal-ceramic interfaces*. International Journal of Solids and Structures, 2002. **39**(10): p. 2827-2855.
- [13] V. Olden, et al., *Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25%Cr duplex stainless steel*. Engineering Fracture Mechanics, 2008. **75**(8): p. 2333-2351.
- [14] D.C. Ahn, P. Sofronis, et R.H. Dodds, *On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence*. International Journal of Hydrogen Energy, 2007. **32**(16): p. 3734-3742.
- [15] C.-s. Oh, Yun-Jae, et K.-B. Yoon, *Coupled analysis of hydrogen transport using Abaqus*. Journal of solid mechanic and materials engineering, 2010. **4**: p. 908-917.
- [16] J.C.M. Li, R.A. Oriani, et D.L. S., *The Thermodynamics of Stressed Solids*. Zeitschrift fur physikalische Chemie, 1966. **49**.
- [17] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.
- [18] S. Dejardin, et al. *Approche thermodynamique d'un modèle de diffusion de l'hydrogène dans un métal reposant sur un couplage mécano-chimique*. 21ème Congrès Français de Mécanique, 26 au 30 août 2013. Bordeaux, France





### III. Interaction hydrogène-elastoplasticité isotrope

Dans ce chapitre, différents exemples d'implémentation dans Abaqus de lois de comportement et de couplages hydrogène-champs mécaniques sont présentés, afin de tester et valider la stratégie numérique définie dans le chapitre précédent.

On commence par le développement de procédures UMAT, pour différents types de comportements mécaniques (élastoplasticité type von Mises, élastoplasticité-endommagement ductile de Gurson). La validation de ces procédures UMAT s'effectue en comparant les résultats des simulations avec ceux obtenus avec des lois de comportement du matériau existant dans Abaqus standard.

Les UMAT et UMATHT [1] (voir chapitre 2) sont ensuite utilisées pour reproduire des problèmes de couplage de diffusion-mécanique de la littérature dans le but de valider ces procédures. Le tableau III.1 présente le récapitulatif des procédures développées et de leurs validation.

**Tableau III.1** Récapitulatif de procédures développées.

Procédure	Comportement	Type de problème	Remarque	Validation
UMAT-VM	Elastoplastique isotrope	2D déformation plane		Abaqus standard
UMAT-GU	Elastoplastique isotrope endommageable	3D		Abaqus standard
UMAT-F	Elastoplastique	2D axisymétrique	Limite élastique $\sigma_Y(\bar{\epsilon}_p, c)$ ; Diffusion Fermi-Dirac [2]	Liang et al. [3]
UMATHHT-G	Diffusion de l'hydrogène (équation II.3.2)	2D-déformation plane	$C_T = \frac{N_T K_T C_L}{K_T C_L + N_L}$ [4]	Krom et al. [5]
UMATHHT-G1	Diffusion de l'hydrogène (équation II.3.2)	2D-déformation plane	$C_T = (a\bar{\epsilon}_p + b)C_L$ [6]	

#### III. 1. Développement des procédures UMAT et UMATHT

Plusieurs comportements mécaniques ont été implémentés :

- un comportement elasto-plastique à écrouissage isotrope (2D-déformation plane) ;
- un comportement elasto-plastique à écrouissage isotrope, et un endommagement ductile de type Gurson (3D) [7-9] .

### III. 1. a. Comportement élastoplastique isotrope

Le comportement implémenté est un comportement élastoplastique isotrope, dans le cadre des matériaux standard, et basé sur la contrainte équivalente de von Mises. Il est implémenté grâce à une UMAT dans une configuration 2D en déformation plane.

#### i. Equations du comportement :

L'élasticité isotrope est définie par un module de Young E et un coefficient de Poisson  $\nu$ .

Le critère de plasticité est défini par une surface de charge d'équation :

$$g(\sigma_{eq}, \sigma_Y(\bar{\epsilon}_p)) = \sigma_{eq} - \sigma_Y(\bar{\epsilon}_p) = 0, \quad (\text{III.1.1})$$

où  $\sigma_{eq} = \sqrt{3\sigma_D : \sigma_D} / 2$  est la contrainte équivalente de von Mises et  $\bar{\epsilon}_p = \int \sqrt{2\dot{\epsilon}_p : \dot{\epsilon}_p} / 3 dt$  est la déformation plastique équivalente (ou déformation plastique cumulée).  $\sigma_D$  est le déviateur du tenseur des contraintes tel que  $\sigma + P_H \mathbf{I} = \sigma_D$  avec  $\mathbf{I}$  le tenseur identité ;  $\sigma_Y$  est la contrainte d'écoulement plastique en traction simple.

L'incrément de déformation plastique est défini par la condition de normalité [10]

$$d\epsilon_p = d\lambda \frac{\partial g}{\partial \sigma}, \quad (\text{III.1.2})$$

où  $d\lambda$  est le multiplicateur plastique qui constitue une inconnue à déterminer. Pour résoudre le problème à un *incrément* de calcul donné, il suffit donc de déterminer cette inconnue.

#### ii. Algorithme de résolution:

Pour déterminer les inconnues du problème, un schéma d'intégration implicite est utilisé (voir annexe B).

On considère que la solution est connue à t (*incrément* k-1), et que l'on cherche celle à t+ $\Delta t$  (*incrément* k). La solution à t+ $\Delta t$  est recherchée de façon implicite par des *itérations* successives en utilisant le schéma de Newton-Raphson, jusqu'à la convergence de la solution (voir annexe A).

La loi de Hooke s'écrit

$$\sigma = 2G\epsilon_e + \mu (\text{tr } \epsilon_e) \mathbf{I}, \quad (\text{III.1.3})$$

où G est le module de cisaillement tel que  $G=E/2(1+\nu)$  et  $\mu$  le coefficient de Lamé avec  $\mu=E\nu/((1+\nu)(1-2\nu))$ . La déformation élastique à t+ $\Delta t$  est telle que

$$\epsilon_e)_{t+\Delta t} = \epsilon_e)_{t} + \Delta\epsilon - \Delta\epsilon_p, \quad (\text{III.1.4})$$

où  $\Delta\epsilon$  représente l'incrément de déformation associée à l'incrément de temps  $\Delta t$ , et  $\Delta\epsilon_p$  est sa partie plastique. Dans ce qui suit, toutes les quantités sont calculées à l'instant t+ $\Delta t$ , sauf si précisé.

Le tenseur de contrainte s'écrit à l'instant t+ $\Delta t$ , compte tenu du fait que  $\text{tr } \Delta\epsilon_p = 0$ ,

$$\sigma = \underbrace{2G(\epsilon_e)_{t} + \Delta\epsilon + \mu \text{tr } (\epsilon_e)_{t} + \Delta\epsilon)}_{\text{Prédiction élastique}} \mathbf{I} - \underbrace{2G\Delta\epsilon_p}_{\text{Correction plastique}}. \quad (\text{III.1.5})$$

Si l'incrément de déformation  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$  entre les temps  $t$  et  $t+\Delta t$  est purement élastique, le champ de contrainte à  $t+\Delta t$  s'écrira alors

$$\boldsymbol{\sigma}_{pr} = 2G(\boldsymbol{\varepsilon}_e)_t + \Delta\boldsymbol{\varepsilon} + \mu \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_e)_t + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (\text{III.1.6})$$

où l'indice « pr » représente la prédiction élastique. La correction de cette contrainte se fait ensuite en tenant compte de la déformation plastique comme montré dans l'équation (III.1.5), et donc, en introduisant la loi de normalité :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{pr} - 2G\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_p = \boldsymbol{\sigma}_{pr} - 2G\Delta\lambda \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (\text{III.1.7})$$

Pour la surface de charge considérée ici (équation III.1.1), nous avons

$$\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}_D}{\sigma_{eq}}, \quad (\text{III.1.8})$$

d'où l'on déduit que  $\Delta\lambda = \Delta\bar{\varepsilon}_p$ . Pour l'incrément actuel, l'équation III.1.7 peut donc se réécrire par

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{pr} - 3G\Delta\bar{\varepsilon}_p \frac{\boldsymbol{\sigma}_D}{\sigma_{eq}}, \quad (\text{III.1.9})$$

ce qui permet d'obtenir la relation suivante [10]

$$\sigma_{eq} = \sigma_{eq}^{pr} - 3G\Delta\bar{\varepsilon}_p. \quad (\text{III.1.10})$$

Si l'on introduit cette relation dans l'équation (III.1.1), le critère de plasticité peut alors être réécrit pour l'incrément courant

$$\sigma_{eq}^{pr} - 3G\Delta\bar{\varepsilon}_p - \sigma_Y(\Delta\bar{\varepsilon}_p) = 0, \quad (\text{III.1.11})$$

ce qui permet de déterminer l'incrément de la déformation plastique équivalente  $\Delta\bar{\varepsilon}_p$ . Cette valeur est déterminée grâce à un algorithme de Newton-Raphson dans l'UMAT.

Une fois que cet incrément est connu, l'incrément du tenseur de déformation plastique peut être déduit par la loi de normalité (équation III.1.2)

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_p = \frac{3}{2} \Delta\bar{\varepsilon}_p \frac{\boldsymbol{\sigma}_D}{\sigma_{eq}}, \quad (\text{III.1.12})$$

et le problème est alors entièrement résolu à l'incrément  $k$ .

### III. 1. b. Comportement élastoplastique à écrouissage isotrope et endommagement ductile

Le comportement étudié ici est un comportement élastoplastique à écrouissage isotrope, et avec un endommagement ductile, basé sur le modèle GTN (Gurson-Tvergaard-Needleman) [11]. L'implémentation est faite dans une configuration 3D.

#### i. Equations du comportement :

L'endommagement ductile est associé à la création de petites porosités (sphériques) dans le matériau, dont la croissance est assistée par le développement de la déformation plastique. La fraction volumique de pores est définie par :

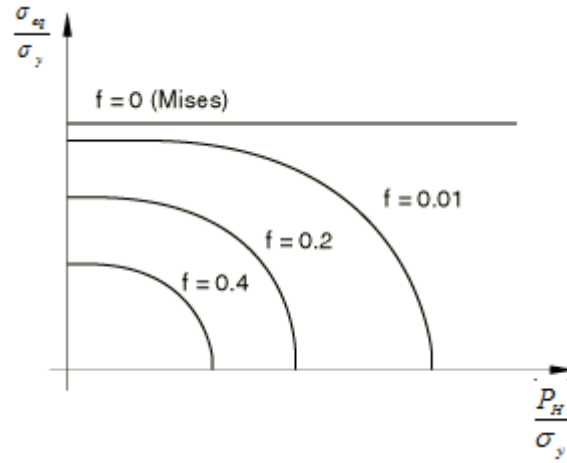
$$f = \frac{V_{pore}}{V_{tot}}, \quad (III.1.13)$$

$V_{pore}$  est le volume de pores compris dans un élément de volume  $V_{tot}$ .

Le modèle GTN permet d'écrire le couplage entre porosité et déformation plastique, la surface seuil définissant le domaine plastique (voir paragraphe précédent - équation III.1.1) étant alors telle que [7, 11]

$$g = \left( \frac{\sigma_{eq}}{\sigma_Y} \right)^2 + 2q_1 f \cosh \left( -\frac{3}{2} \frac{q_2 P_H}{\sigma_Y} \right) - (1 + q_3 f^2) = 0, \quad (III.1.14)$$

où  $q_1, q_2, q_3$  sont des paramètres matériaux. Les autres variables ont la même signification que dans le paragraphe précédent. L'évolution de la surface de charge en fonction de la porosité est illustrée figure III.1.1 (pour  $q_1=q_2=q_3=1$ ).



**Figure III.1.1** Exemple de surface de charge pour différentes valeurs de  $f$  [12].

L'écroutissement du matériau est décrit, quant à lui, par une relation de la forme  $\sigma_Y = \sigma_Y(\bar{\epsilon}_p)$ , comme dans le cas précédent. La loi de normalité s'écrit

$$\Delta \epsilon_p = \Delta \lambda \frac{\partial g}{\partial \sigma}. \quad (III.1.15)$$

La variation de la fraction volumique de porosité s'écrit :

$$\Delta f = (1 - f) \text{tr} \Delta \epsilon_p + \Delta f_n. \quad (III.1.16)$$

Dans cette expression, le premier terme traduit l'évolution de la porosité avec l'incrément de déformation plastique ( $\text{tr} \Delta \epsilon_p (\neq 0)$  représente ici la variation relative du volume élémentaire  $V_{tot}$  du fait de la croissance des pores), tandis que  $\Delta f_n$  correspond à la nucléation de nouvelles cavités.

On peut relier  $\Delta f_n$  à l'évolution de la déformation plastique dans le matériau [13]

$$\Delta f_n = A_n \Delta \bar{\epsilon}_p^m, \quad (III.1.17)$$

où  $\Delta \bar{\epsilon}_p^m$  est l'incrément de déformation plastique équivalente dans la matrice, déterminé par une relation d'équivalence du travail plastique par unité de volume :

$$(1-f)\sigma_y \Delta \bar{\varepsilon}_p^m = \boldsymbol{\sigma} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p. \quad (\text{III.1.18})$$

La probabilité  $A_n$  de nucléation d'un pore pour une déformation plastique équivalente dans la matrice comprise entre  $\bar{\varepsilon}_p^m$  et  $\bar{\varepsilon}_p^m + d\bar{\varepsilon}_p^m$  est postulée sous la forme :

$$A_n = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}s_N} \exp \left[ -\frac{(\bar{\varepsilon}_p^m - \varepsilon_N)^2}{2s_N^2} \right], \quad (\text{III.1.19})$$

où  $\varepsilon_N$  et  $s_N$  représentant les paramètres statistiques de cette densité de probabilité, et où  $A_0$  est une constante de normalisation.

ii. Algorithme de résolution:

Le schéma de l'intégration de ce modèle est présenté dans le travail de Aravas [14]. La difficulté de cet algorithme vient du fait que la surface seuil dépend de deux variables,  $P_H$  et  $\sigma_{eq}$  (contre une seule pour la plasticité indépendante de la pression hydrostatique).

La loi de normalité amène à

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = \Delta \lambda \left( -\frac{1}{3} \frac{\partial g}{\partial P_H} \mathbf{I} + \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} \mathbf{n} \right), \quad (\text{III.1.20})$$

où  $\mathbf{n} = \frac{3}{2} \frac{\boldsymbol{\sigma}_D}{\sigma_{eq}}$ . Posons

$$\Delta \varepsilon_H = -\Delta \lambda \frac{\partial g}{\partial P_H} \quad \text{et} \quad \Delta \varepsilon_D = \Delta \lambda \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}}. \quad (\text{III.1.21})$$

L'incrément du tenseur de déformation plastique peut alors se scinder en deux parties :

- une partie hydrostatique  $-\frac{1}{3} \Delta \varepsilon_H \mathbf{I}$ , qui est à relier à  $\Delta f$  (croissance de la porosité) (équation III.1.15) ;
- une partie déviatorique  $\Delta \varepsilon_D \mathbf{n}$  (qui correspond donc au cas où  $f$  ne varie pas, c'est à dire pour de la plasticité non endommageable, pour laquelle  $\text{tr} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = 0$ ).

Pour l'incrément courant, l'équation (III.1.21) peut être donc réécrite par

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_p = -\frac{1}{3} \Delta \varepsilon_H \mathbf{I} + \Delta \varepsilon_D \mathbf{n}. \quad (\text{III.1.22})$$

La détermination de la déformation plastique se ramène donc à chercher les deux grandeurs  $\Delta \varepsilon_H$  et  $\Delta \varepsilon_D$ , qui obéissent au système suivant [14] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \varepsilon_H \frac{\partial g}{\partial P_H} + \Delta \varepsilon_D \frac{\partial g}{\partial \sigma_{eq}} = 0 \\ g(P_H, \sigma_{eq}, f) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.1.23})$$

Ce système d'équations est résolu à l'aide de l'algorithme de Newton-Raphson.  $P_H$  et  $\sigma_{eq}$  sont associés aux 2 inconnues  $\Delta\varepsilon_H$  et  $\Delta\varepsilon_D$  comme suit :

$$\begin{cases} P_H = P_H^{pr} + K\Delta\varepsilon_H \\ \sigma_{eq} = \sigma_{eq}^{pr} - 3G\Delta\varepsilon_D \end{cases}, \quad (III.1.24)$$

où  $K=E/3(1-2\nu)$ . L'indice « pr » indique comme la partie précédente les grandeurs déterminées en supposant un incrément de déformation élastique, comme pour la plasticité isotrope non endommageable.

L'algorithme de Newton-Raphson pour résoudre le système d'équation III.1.24 est défini dans l'UMAT, ce qui permet de déterminer l'incrément de déformation plastique, dont on peut déduire l'incrément de porosité et de contrainte. Le problème est alors entièrement résolu.

### III. 1. c. Validation des UMATs

Le modèle de Gurson a été implémenté (en 3D), puis a été comparé au modèle existant dans Abaqus, afin de pouvoir juger la qualité du programme développé.

#### i. Géométrie, maillage et conditions limites

La géométrie choisie est un cube de 50 mm de côté, soumis à un déplacement imposé de 4 mm sur la face supérieure. Sur la face inférieure (Oxz), sont imposées des conditions de symétrie. Enfin, la face Oyz est soumise également à des conditions de symétrie (voir figure III.1.2a)

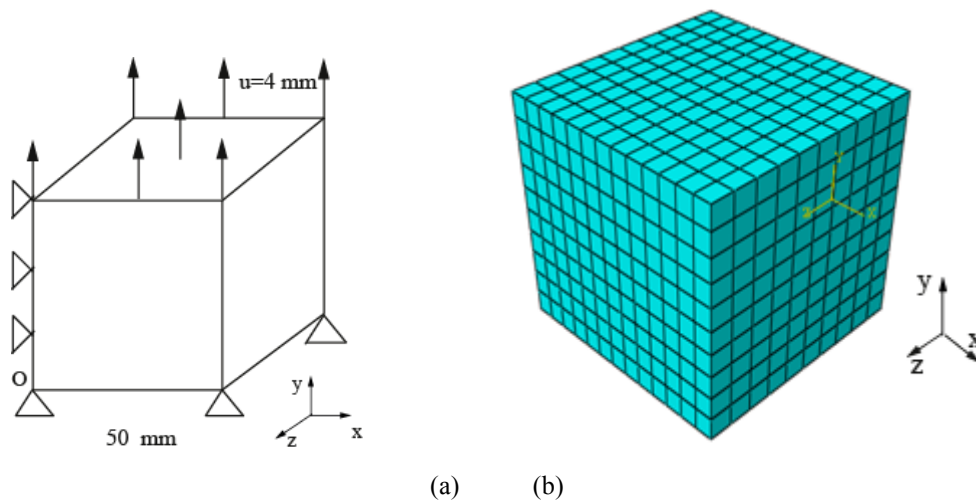


Figure III.1.2 (a) Géométrie et conditions aux limites; (b) maillage.

Le cube est maillé régulièrement avec des éléments hexaédriques (tri)linéaires à intégration complète (C3D8 dans Abaqus). La taille des éléments est de 5 mm. Le même maillage est utilisé pour les calculs utilisant l'UMAT et ceux utilisant le modèle existant dans Abaqus.

#### ii. Comportement mécanique

L'écroutissement du matériau est supposé linéaire :

$$\sigma_Y = \sigma_0 + k\bar{\varepsilon}_p, \quad (III.1.25)$$

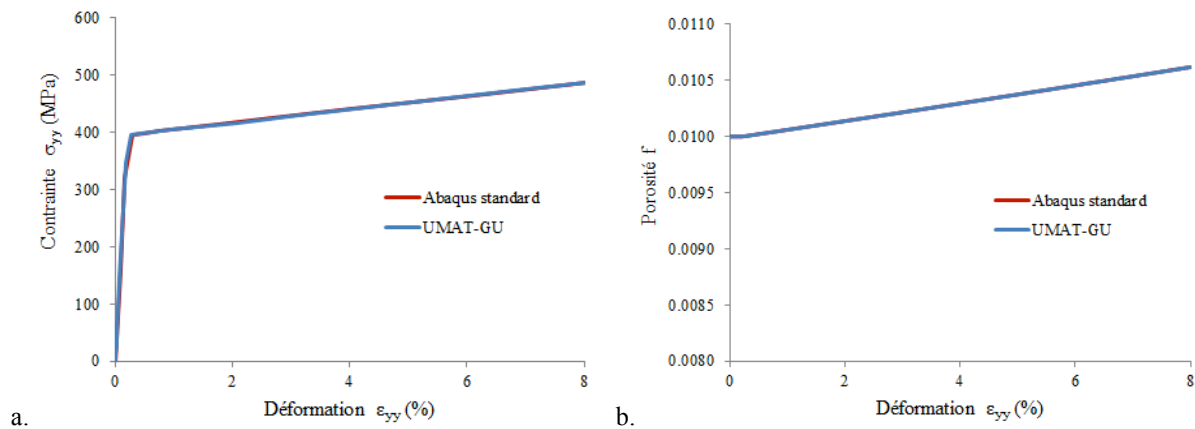
les paramètres utilisés dans cette simulation sont donnés dans le tableau III.1.1. La porosité initiale est notée  $f_0$ .

**Tableau III.1.1** Paramètre du matériau du modèle de Gurson utilisés dans cette simulation.

E (GPa)	$\nu$	k (MPa)	$\sigma_0$ (MPa)	$q_1$	$q_2$	$q_3$	$f_0$
200	0,3	1200	400	1	1	1	0,01

### iii. Résultats

Dans les deux calculs, avec et sans UMAT, tous les champs sont uniformes. Le champ de contrainte équivalente en fin de chargement, dans les deux cas, est de 478 MPa ; la porosité obtenue est égale à 0,01062. Les courbes contraintes-déformation pour les deux calculs, de même que les courbes porosité-déformation sont données sur les figures III.1.3a et b.



**Figure III.1.3** Comparaison des courbes (a) contrainte-déformation et (b) porosité-déformation pour les calculs standard Abaqus et avec l'UMAT-GU.

Ces résultats permettent de vérifier l'implémentation du modèle de Gurson dans la procédure UMAT. Par manque de temps cette approche n'a pas été étendue à des lois d'écroutissage plus complexes. Elle permet cependant d'ouvrir une perspective de couplage entre l'endommagement ductile et la diffusion de l'hydrogène.

#### III. 1. d. Développement des procédures UMATHHT

Contrairement aux procédures UMATs, le développement des procédures UMATHHT ne nécessitent pas d'algorithme itératif puisque toutes les variables à définir (le flux et ses dérivées, et la concentration en hydrogène piégé - voir chapitres II.3.b et II.5.b) sont définies par des relations explicites.

### III. 2. Validation de l'implémentation du couplage champs mécaniques-diffusion.

Dans cette partie, l'implémentation du couplage diffusion-contraainte-plasticité est testée sur des exemples de la littérature, puis un exemple de couplage utilisant la loi de Gurson. Dans cette étude, l'UMAT-F est utilisée pour calculer le couplage (voir tableau III.1).

#### III. 2. a. Couplage diffusion-champ de contrainte plasticité isotrope

L'exemple présenté ici est une simulation prenant en compte un couplage entre la diffusion d'hydrogène, la pression hydrostatique, et le comportement mécanique. Ce travail a été initié par Sofronis [2] et repris par Liang et al. [3].

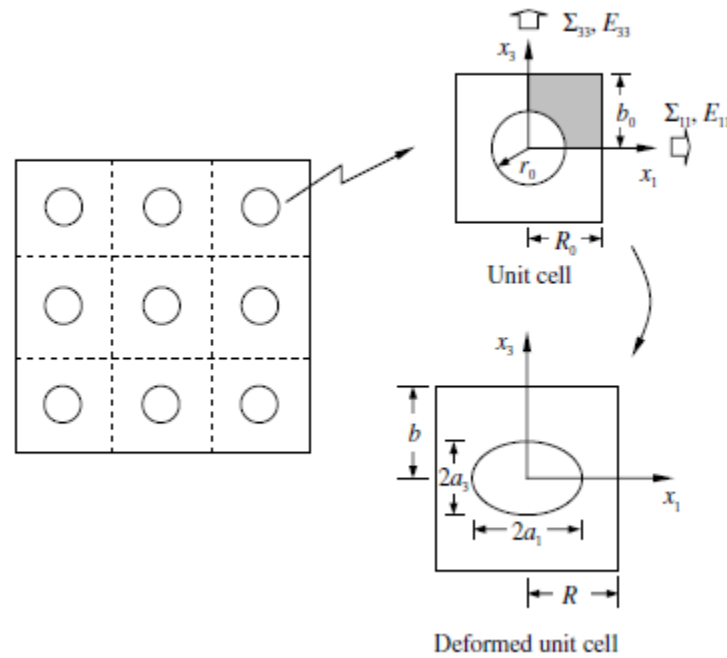


Figure III.2.1. Schéma d'un solide avec la présence périodique de vides [3].

La géométrie du problème est donnée figure III.2.1 : une cellule unitaire contenant un vide de forme sphérique représente le motif élémentaire d'une structure périodique. Une telle configuration est souvent utilisée pour étudier le problème de croissance de porosité dans un matériau assistée par la plasticité, c'est à dire un endommagement ductile (de type Gurson) [15,16].

#### i. Configuration et conditions aux limites

Le domaine d'analyse est un volume contenant une cavité sphérique,  $f_0$  représentant la porosité initiale de ce volume élémentaire. Ce domaine est modélisé avec des hypothèses d'axisymétrie. Les dimensions de la cellule axisymétrique trouée sont définies par les arêtes  $R_0=b_0=20$  mm et le rayon du trou  $r_0=5$  mm (figure III.2.2). La porosité initiale est  $f_0=(4\pi r_0^3/3)/(2b_0\pi R_0^2)=0,0104$ .

Les deux bords non symétriques sont supposés libres de cisaillement, donc ils doivent rester parallèles à l'axe z. On impose de plus une triaxialité des contraintes T constante, définie par

$$T = \Sigma_m / \Sigma_e, \quad (\text{III.2.1})$$



où  $\Sigma_e$  et  $\Sigma_m$  sont la contrainte macroscopique équivalente et la contrainte moyenne macroscopique, données par :

$$\Sigma_m = (2\Sigma_R + \Sigma_Z)/3, \text{ et } \Sigma_e = |\Sigma_R - \Sigma_Z|. \quad (\text{III.2.2})$$

$\Sigma_R$  et  $\Sigma_Z$  sont les contraintes moyennes respectives sur les faces  $r=R_0$  et  $z=b_0$ . Ce chargement est imposé grâce à un ressort et une barre, sur lesquels sont appliqués des déplacements imposés (figure III.2.2).

On désigne par  $c_L$  le nombre d'atomes d'hydrogène par atome de métal hôte, c'est-à-dire

$$c_L = C_L / N_L = \beta\theta_L, \quad (\text{III.2.3})$$

où  $\beta$  est le nombre de sites interstitiels par atome de métal.  $C_L$  est la concentration d'hydrogène interstitiel (nombre d'atomes d'hydrogène par unité de volume).  $N_L$  est ici le nombre d'atomes de métal par unité de volume.

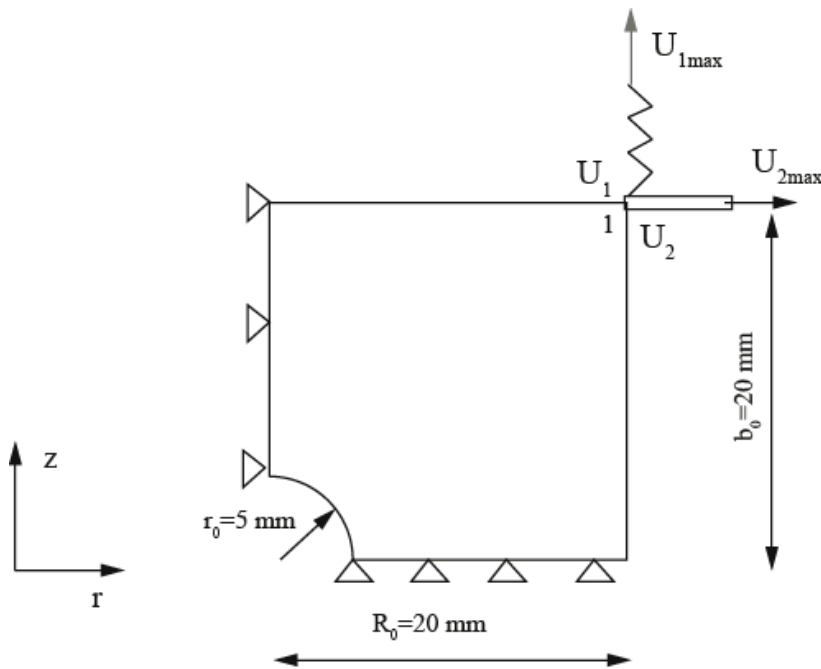


Figure III.2.2 Géométrie du problème et conditions limites.

De même,  $c_T$  est le nombre d'atomes d'hydrogène piégés par atome de métal, et donné par :

$$c_T = C_T / N_L = \alpha\theta_T N_T / N_L = \beta\theta_{TL}, \quad (\text{III.2.4})$$

$\alpha$  est le nombre de sites de piégeage de l'hydrogène par piège.  $C_T$  est la concentration d'hydrogène piégé. Le nombre d'atomes d'hydrogène par atome de métal est donc

$$c = c_T + c_L. \quad (\text{III.2.5})$$

Deux conditions initiales en hydrogène sont étudiées :

$$c_L^0 = 0.001 \text{ H/M (H/M pour atome d'hydrogène par atome de métal) ;}$$

$$c_L^0 = 0 \text{ H/M.}$$

Ces deux conditions initiales sont homogènes sur le domaine. Un flux d'hydrogène nul est de plus imposé sur tous les bords extérieurs à la cellule.

ii. Mise en œuvre d'un calcul à triaxialité des contraintes constant

Pour imposer un chargement avec une triaxialité de contrainte constante sur la cellule, la procédure numérique proposée par Lin et al. [17] a été utilisée, et illustrée sur la figure III.2.2. Cette procédure nécessite l'utilisation d'un ressort pour imposer une force constante et connue sur une des faces, et d'une barre pour imposer une force sur l'autre face ; en reliant la rigidité de la barre à la force appliquée, la triaxialité des contraintes T peut être imposée tout au long de la simulation.

On note  $U_1$  et  $U_2$  les déplacements dans les directions Z et r du nœud de coordonnées  $(r,Z)=(R_0,b_0)$  (le nœud 1 sur la figure III.2.2).

On introduit un ressort de raideur k, sur lequel un déplacement  $U_{1\max}$  est imposé. La force appliquée à ce ressort se transmet sur la face  $Z=b_0$  : la force appliquée est donc uniquement dans la direction Z et telle que

$$F_Z = k(U_{1\max} - U_1). \quad (\text{III.2.6})$$

La contrainte moyenne sur la face supérieure  $\Sigma_Z$  se calcule donc simplement

$$\Sigma_Z = \frac{F_Z}{\pi(R_0 + U_2)^2}. \quad (\text{III.2.7})$$

Pour tous les nœuds de la face supérieure  $Z=b_0$ , on impose un déplacement selon Z égal au déplacement vertical du nœud 1.

On définit enfin une barre dont la rigidité  $k'$  est calculée en fonction de T et de  $\Sigma_Z$  ; cette rigidité est définie à l'aide du développement d'un élément utilisateur UEL. Sur cette barre, on applique un déplacement  $U_{2\max}$  et la contrainte moyenne sur la face latérale ( $r=R_0$ ) est alors

$$\Sigma_R = \frac{F_R}{2\pi(R_0 + U_2)(b_0 + U_1)} = \frac{k'(U_{2\max} - U_2)}{2\pi(R_0 + U_2)(b_0 + U_1)}, \quad (\text{III.2.8})$$

où  $F_R$  est la force créée par la barre sur la face latérale.

A partir des équations III.2.1 et III.2.2, en introduisant  $T^* = \Sigma_R / \Sigma_Z$  (qui vaut  $(3T-1)/(3T+2)$  si  $\Sigma_Z > \Sigma_R$  et  $(3T+1)/(3T-2)$  si  $\Sigma_Z < \Sigma_R$ ), et en introduisant l'équation III.2.7 dans l'équation III.2.8,  $k'$  est déterminé par :

$$k' = \frac{T^*(T)2\pi(R_0 + U_2)(b_0 + U_1)}{U_{2\max} - U_2} \frac{F_Z}{\pi(R_0 + U_2)^2}. \quad (\text{III.2.9})$$

$k'$  est déterminé dans l'UEL à chaque itération du calcul Abaqus, à l'aide d'un algorithme de Newton Raphson,  $U_1$  et  $U_2$  étant le résultat du calcul Abaqus. Les déplacements selon r des nœuds de la face latérale  $r=R_0$  sont asservis de la même manière que ceux de la face  $Z=b_0$ .

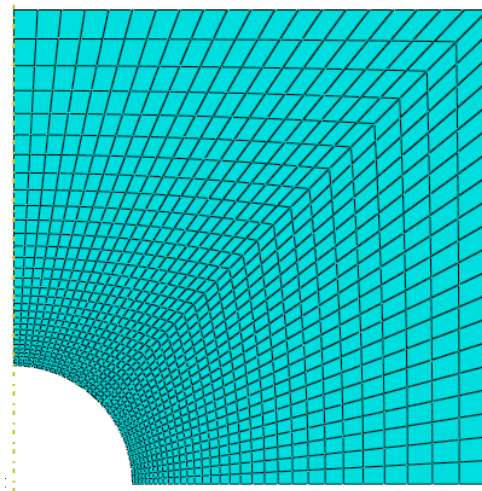
Durant la déformation, la largeur et la hauteur de la cellule deviennent R et b. La déformation macroscopique effective  $E_e$  est alors définie par

$$E_e = 2|E_{33} - E_{11}|/3 \text{ avec } E_{33} = \ln(b/b_0) \text{ et } E_{11} = \ln(R/R_0). \quad (\text{III.2.10})$$

Dans ce qui suit, on travaillera avec  $T=2$  pour comparer avec les résultats de Liang et al.

iii. Maillage

Le maillage utilisé est présenté dans la figure III.2.3.



**Figure III.2.3.** Maillage de la cellule élémentaire.

Les éléments utilisés sont des éléments axisymétriques bilinéaires à 4 nœuds, à intégration complète (CAX4 dans Abaqus).

La taille des éléments varie de 1,22 mm à 0,122 mm, en conformité avec le travail de référence de Liang et al., même si les maillages ne sont pas identiques. Les éléments les plus petits se trouvent au niveau du pore.

iv. Comportement du matériau

Le comportement du matériau, et son interaction avec l'hydrogène, sont identiques à ceux de Liang et al.

Le matériau est considéré élastoplastique, à écrouissage isotrope, et la limite d'élasticité dépend de la concentration d'hydrogène :

$$\sigma_Y(\bar{\varepsilon}_p, c) = \sigma_0(c) \left( 1 + \frac{\bar{\varepsilon}_p}{\varepsilon_0} \right)^N, \quad (\text{III.2.11})$$

où

$$\sigma_0(c) = [(\xi - 1)c + 1] \sigma_0. \quad (\text{III.2.12})$$

$\sigma_0(c)$  représente la limite élastique en présence d'hydrogène, tandis que  $\sigma_0$  est la limite élastique du matériau sans hydrogène ;  $\xi$  est un paramètre phénoménologique qui décrit l'adoucissement du matériau par l'hydrogène.  $c$  est le nombre total d'atome d'hydrogène par atome de métal (voir équation III.2.5). Les paramètres matériau sont repris de [3] et donnés dans le tableau III.2.1.

**Tableau III.2.1** Paramètres utilisés pour le comportement mécanique [3] .

E (MPa)	$\nu$	$\sigma_0$ (MPa)	N	$\xi$
11500	0,34	400	0,1	-99

v. Couplage hydrogène-plasticité

La concentration totale d'hydrogène par atome de métal est déterminée en fonction de la pression hydrostatique et de la déformation plastique. Le détail de cette formulation est donné dans [2,18] et est résumé dans ce qui suit.

Soit une structure chargée mécaniquement ; en chaque point, la concentration en hydrogène diffusif  $c_L$  est alors directement déduite de  $c_L^0$ , qui est la concentration en hydrogène diffusif dans la structure non chargée, et du champ de pression hydrostatique. Aucune équation de diffusion n'est ici nécessaire (il n'y a donc pas besoin de procédure UMATHT pour ces calculs).

La relation entre la concentration d'hydrogène par atome de métal et le champ mécanique est écrite en utilisant une statistique de Fermi-Dirac (voir chapitres II.4.c et I.3.a).  $c_L$  et  $c_T$  sont reliées à la pression hydrostatique et à la déformation plastique équivalente par l'évolution de  $\theta_L$  et  $\theta_T$ , qui sont les taux de remplissage en hydrogène diffusif et piégé :

$$c = \beta [\theta_L(P_H) + \theta_T(P_H, \bar{\epsilon}_p)], \quad (\text{III.2.13})$$

avec

$$\theta_L(P_H) = \frac{\theta_L^0}{(1 - \theta_L^0) + \theta_L^0 K_L} \exp\left(\frac{-P_H \bar{V}_H}{RT}\right), \quad (\text{III.2.14})$$

et

$$\theta_T(P_H, \bar{\epsilon}_p) = \frac{\alpha N_T(\bar{\epsilon}_p)}{\beta N_L} \frac{K_T \theta_L(P_H)}{1 - \theta_L(P_H) + K_T \theta_L(P_H)}. \quad (\text{III.2.15})$$

$N_T$  est le nombre de pièges, et est proportionnel à la déformation plastique équivalente [3].  $K_T = \exp(W_B/RT)$  est la constante d'équilibre dans l'équation d'Oriani [2,4] qui relie la population d'hydrogène diffusif et celle d'hydrogène piégé ;  $W_B$  est l'énergie de piégeage. La température absolue  $T$  est prise égale à 300 K,  $\bar{V}_H$  est le volume molaire partiel de l'hydrogène. Enfin,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des paramètres matériau.

Les paramètres liés à la diffusion de l'hydrogène sont donnés dans le tableau III.2.2.

**Tableau III.2.2.** Paramètres liés à la diffusion de l'hydrogène [3].

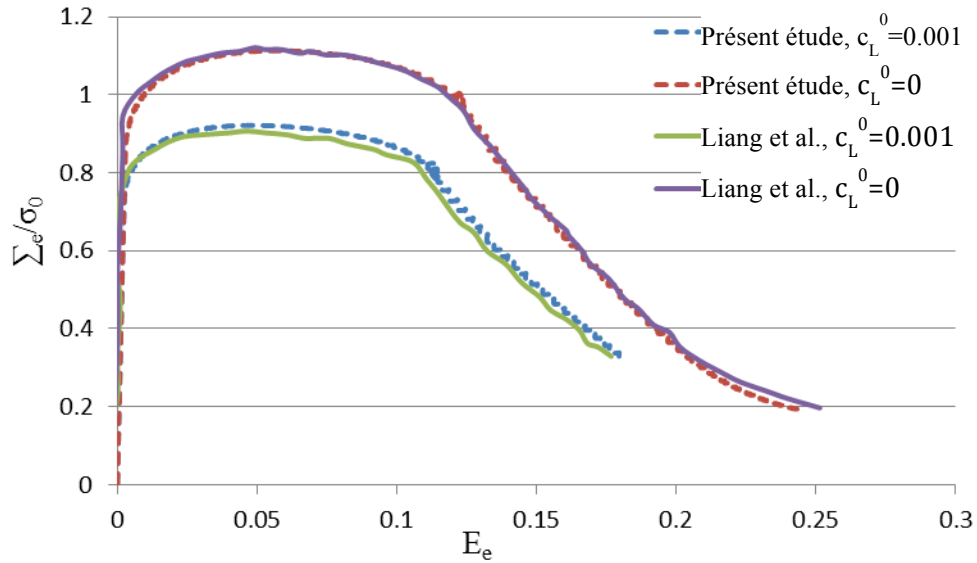
$W_B$ (kJ/mole)	$V_H$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$N_L$ (atomes/m <sup>3</sup> )	$\alpha$	$\beta$
29,2	1,88	$5,55 \times 10^{28}$	1	1

La diffusion de l'hydrogène s'effectue en régime permanent.

Ce couplage a été introduit dans Abaqus en utilisant la procédure UMAT-F (tableau III.1).

vi. Résultats

La figure III.2.4 donne les courbes de la contrainte macroscopique effective normalisée  $\Sigma_e/\sigma_0$  en fonction de la déformation, pour les deux cas  $c_L^0 = 0,001$  H/M et  $c_L^0 = 0$  H/M. Les résultats obtenus ont été superposés sur les courbes de Liang et al. [3].



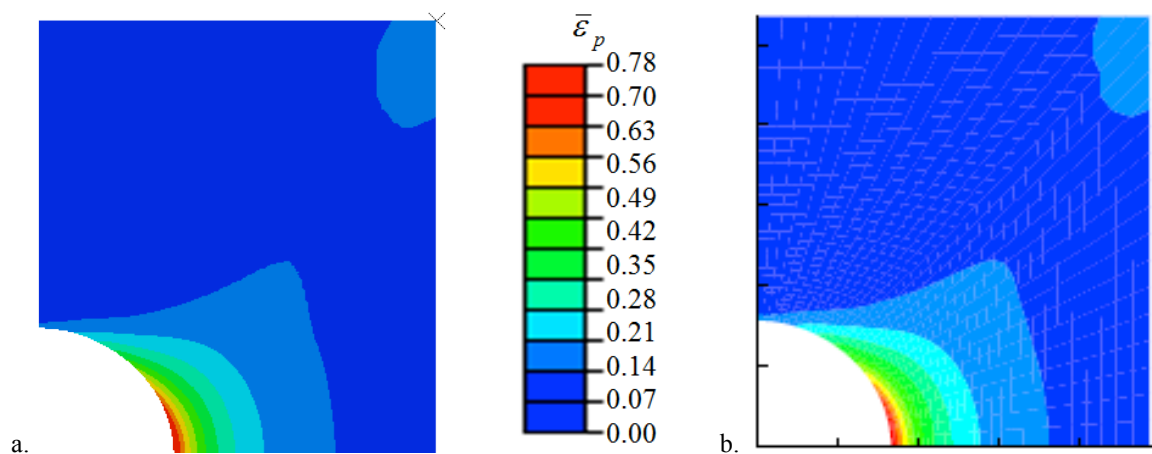
**Figure III.2.4** Comparaison entre les courbes contrainte normalisée-déformation macroscopique issues des procédures développées dans ce travail et de la littérature.

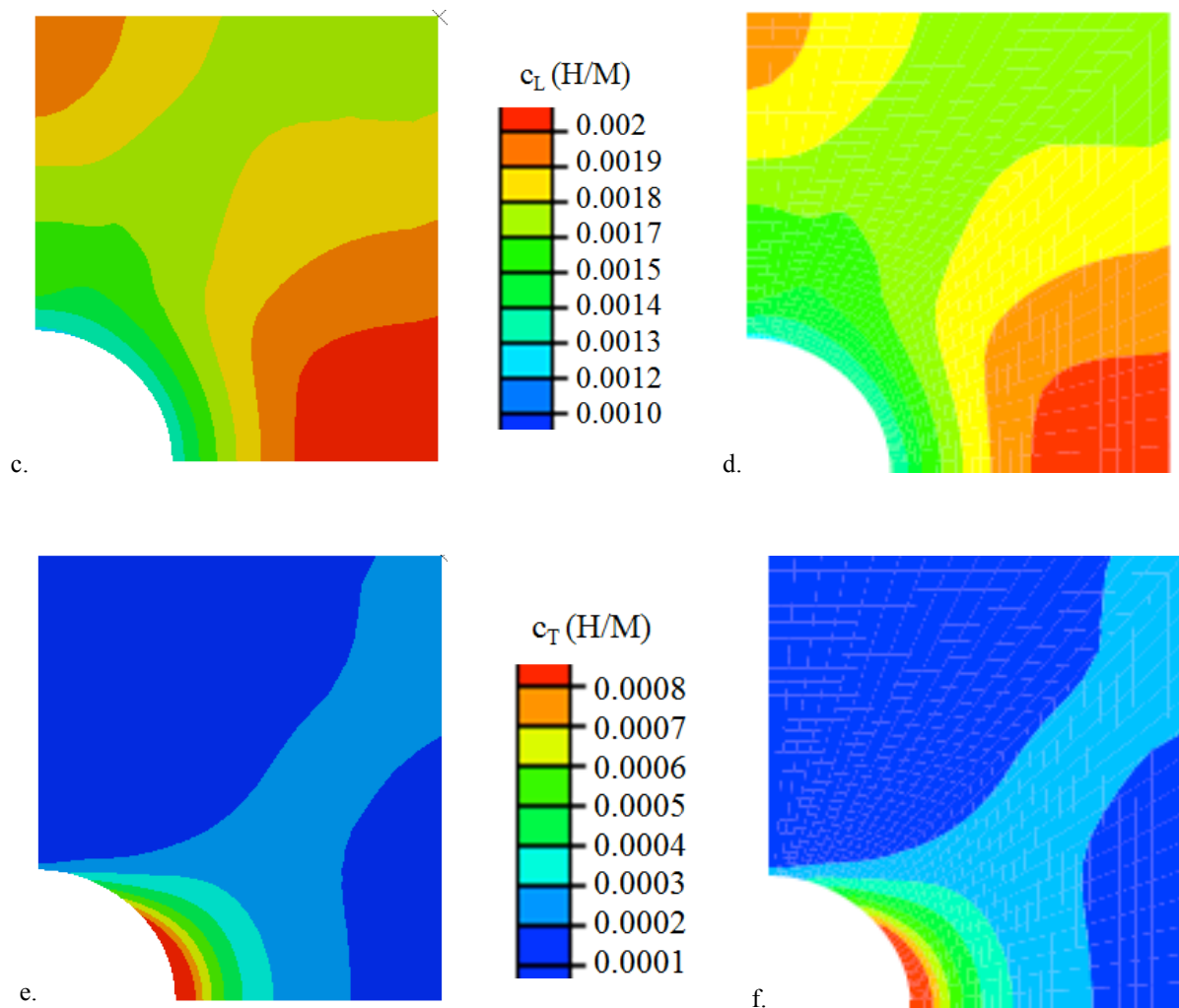
On observe que, quand la déformation macroscopique effective  $E_e$  augmente, la contrainte  $\Sigma_e$  augmente jusqu'à une valeur maximale, à partir de laquelle elle commence à diminuer. Ce point correspond au début de la coalescence des vides, ou encore à la rupture dans la cellule. Au-delà de ce point, la cellule se déforme en mode uniaxial, ce qui augmente la localisation de contrainte au ligament entre les vides voisins [15].

En présence d'hydrogène, la courbe contrainte-déformation est plus basse, à cause de l'effet d'adoucissement du matériau causé par l'hydrogène (équations III.2.11 et III.2.12).

On remarque que, dans les deux cas (avec et sans hydrogène) les résultats obtenus avec nos procédures sont très proches des résultats de Liang et al. [3].

La figure III.2.5 montre les champs de concentration d'hydrogène interstitiel et piégé, pour une déformation macroscopique effective  $E_e=0,062$ . Toutes les cartes sont comparées avec celles issues du travail de Liang et al. [3], pour une même valeur de la déformation  $E_e$ . Dans tous les cas, on observe une très grande similitude entre nos résultats et ceux de la littérature.





**Figure III.2.5** Comparaison calculs effectués avec (a-c-e) les procédures développées et (b-d-f) le travail de référence [3] pour  $E_c=0,062$  : cartes de (a-b) déformation plastique équivalente, (c-d) concentration en hydrogène diffusif  $c_L$  (H/M) et (e-f) piégé  $c_T$  (H/M).

La concentration en hydrogène diffusif est maximale au centre du ligament, entre les vides voisins, là où la contrainte hydrostatique est maximale. Les concentrations maximum et minimum en hydrogène interstitiel calculées sont respectivement 0,002 et 0,00128 H/M contre 0,002 et 0,00125 H/M dans [3] (mesuré approximativement sur la figure III.2.5.d). La différence entre l'étude actuelle et la référence est donc moins de 3% en ce qui concerne le champ d'hydrogène interstitiels  $c_L$ .

L'hydrogène piégé s'accumule au niveau du trou où la croissance de vides induit de grandes déformations plastiques (figure III.2.5.e et III.2.5.f). La concentration de l'hydrogène piégé maximum obtenu est  $7,687 \cdot 10^{-4}$  H/M contre  $8 \cdot 10^{-4}$  H/M dans [3] (mesuré approximativement sur la figure III.2.5.f). On observe ici une différence de l'ordre 4% entre l'étude actuelle et la référence.

On peut conclure de ces calculs que, d'une part, le schéma d'intégration UMAT-F est capable de reproduire avec précision de l'ordre de moins de 4% des résultats de la littérature. Les différences entre deux calculs peuvent être attribuées à :

- des maillages qui ne sont pas parfaitement coïncidents, le maillage n'étant pas précisé dans [3] ;

- la manière d'appliquer la triaxialité (ce qui n'est pas précisé non plus dans [3]) ;
- l'éventuelle différence entre les tolérances dans la résolution du problème par la méthode Newton-Raphson.

Afin de tester les procédures UMAT+UMATHT dans un cas transitoire, un autre exemple de la littérature a été utilisé.

### III. 2. b. Couplage diffusion-champ de contrainte-piégeage

On considère la configuration présentée par Krom et al. [5], et qui sert de support à plusieurs travaux d'implémentation [19,20]. Krom et al. ont repris la configuration utilisée par Sofronis et al. [21], sur laquelle ils ont étudié le transport d'hydrogène au voisinage d'une pointe de fissure, en rajoutant un effet lié à la vitesse de la déformation plastique dans l'équation de transport d'hydrogène.

#### i. Configuration et conditions aux limites

Le domaine d'analyse est un disque 2D de rayon  $L=150$  mm contenant une fissure, représentée par une entaille émoussée de rayon  $b_0=0,01$  mm ( $L=15000 \times b_0$ ) (voir figure III.2.6 ; cette configuration 'SSY' a été décrite dans le chapitre I, section I.3.a). Le disque est soumis à un déplacement imposé sur ses bords, tel que

$$\begin{cases} u_x = \frac{K_I}{2G} \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(3 - 4\nu - 1 + 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right) \\ u_y = \frac{K_I}{2G} \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(3 - 4\nu - 1 + 2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right) \end{cases}, \quad (\text{III.2.16})$$

où  $\theta$  représente l'angle entre l'axe de symétrie du problème et le point considéré (figure III.2.6).  $E$  et  $\nu$  sont les constantes élastiques du matériau.

Cette configuration (*Small Scale Yielding*, plasticité confinée) permet d'imposer un taux constant de facteur d'intensité des contraintes  $K_I$  (mode I) au voisinage de la pointe de la fissure.

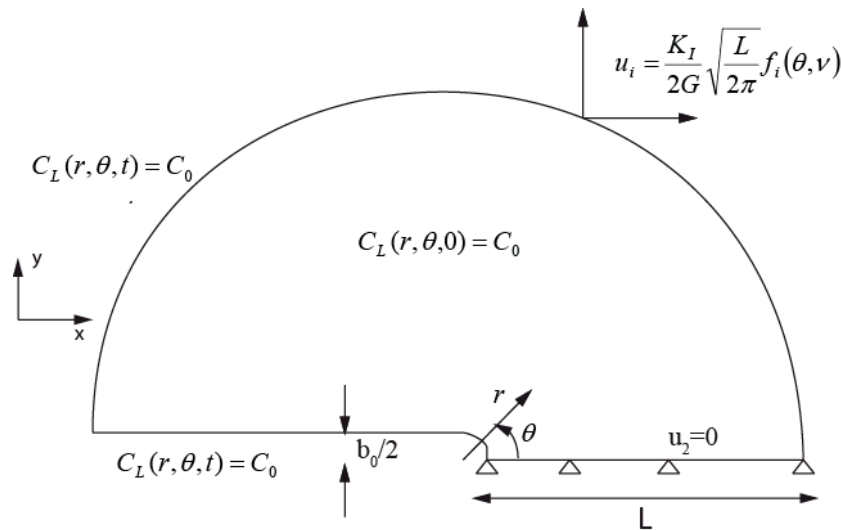
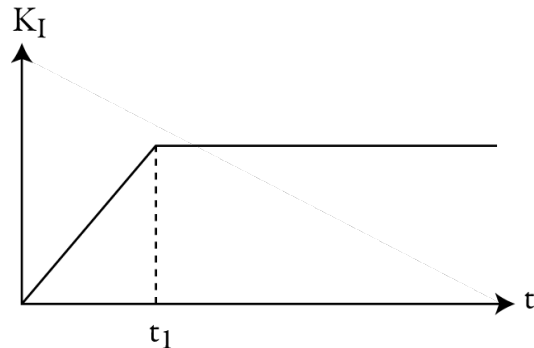


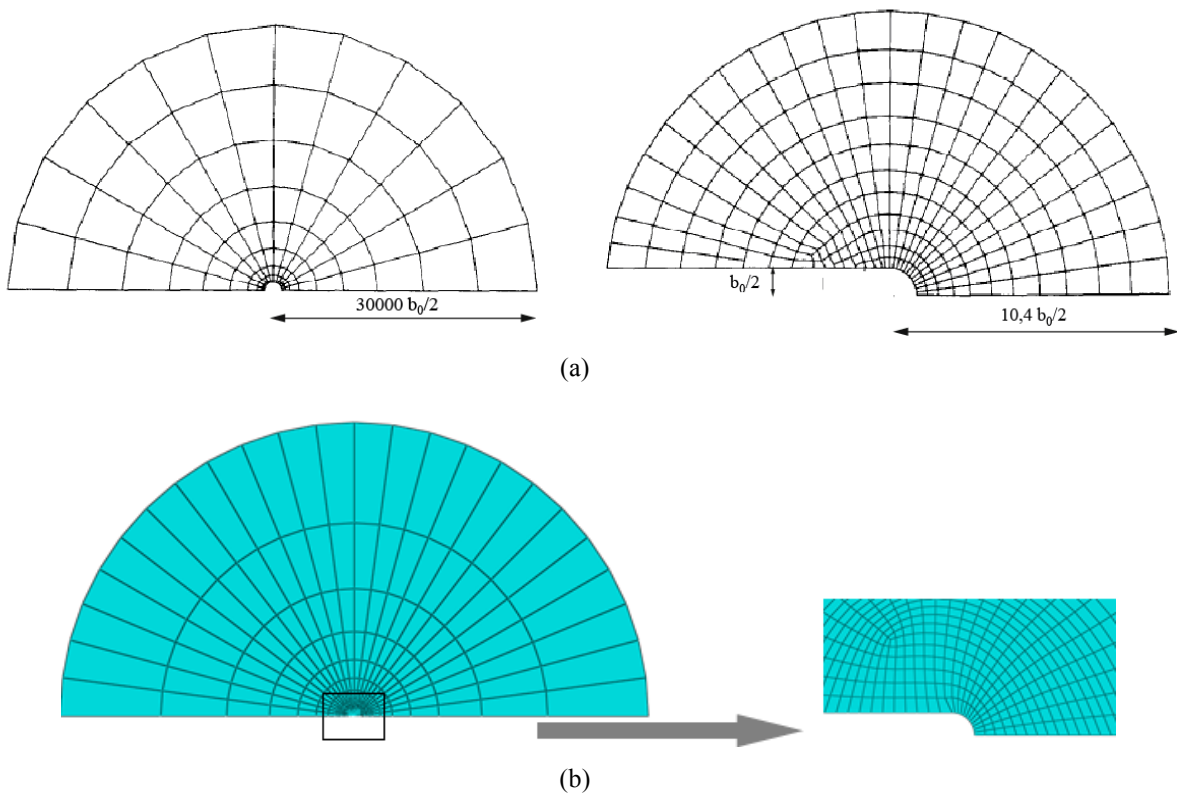
Figure III.2.6. Géométrie du problème et conditions limites.

Le chargement est incrémental : on impose un taux constant du facteur d'intensité de contrainte  $K_I$  pendant un temps  $t_1$ , jusqu'à ce qu'il atteigne la valeur  $89,2 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ . Le déplacement est ensuite maintenu constant pour que la diffusion de l'hydrogène atteigne le régime permanent (figure III.2.7). Ici, seulement une moitié de problème est modélisée ; des conditions de symétrie sont donc imposées sur le ligament en amont de la pointe de la fissure.



**Figure III.2.7.** Variations de la valeur du facteur d'intensité des contraintes.

La concentration d'hydrogène initiale est égale à  $C_0$ , et est imposée sur tout le disque. Elle est ensuite maintenue constante uniquement sur ses bords ; sur le ligament devant la fissure, le flux est fixé à zéro (figure III.2.6).  $C_0$  est égal à  $2,084 \times 10^{21} \text{ atomes/m}^3$ , comme dans le travail de référence [12].



**Figure III.2.8.** Maillage utilisé (a) dans le travail de Krom et al. [5] et (b) dans le présent travail.

## ii. Maillage

Le maillage utilisé est similaire à celui du travail de référence [5], les éléments utilisés sont des éléments bilinéaires à quatre nœuds, à intégration complète, en déformations planes et possédant un ddl de température (CPE4T dans Abaqus) utilisé comme ddl de diffusion



d'hydrogène. Le nombre total d'éléments est de 2700. Au niveau de la pointe de la fissure, la taille des éléments est de 0,005 mm (figure III.2.8).

iii. Comportement du matériau et diffusion couplée

Le comportement du matériau est supposé élastoplastique à écrouissage isotrope, la relation contrainte-déformation étant décrite par la relation

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \left( \frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^{1/n} . \quad (\text{III.2.17})$$

Ce comportement est défini par l'UMAT-VM (tableau III.1).

La diffusion d'hydrogène suit la loi donnée dans le paragraphe I.2.a (équation I.2.17) :

$$\frac{C_T(1-\theta_T)+C_L}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \nabla \left( -D_L \nabla C_L - \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\bar{\varepsilon}_p} \frac{\partial \bar{\varepsilon}_p}{\partial t} = 0 . \quad (\text{III.2.18})$$

Les concentrations d'hydrogène diffusif et piégé sont reliés par la relation proposée par Oriani [4]

$$C_T = \frac{N_T K_T C_L}{K_T C_L + N_L} , \quad (\text{III.2.19})$$

avec  $N_T = 23.26 - 2.33e^{-5.5\bar{\varepsilon}_p}$  [5].

L'équation II.2.18 a été implémentée dans l'UMATHT-G1.

Les paramètres mécaniques du matériau et ceux liés à la diffusion de l'hydrogène sont repris de Krom et al.[5], et donnés dans les tableaux III.2.3 et III.2.4.

**Tableau III.2.3.** Paramètres mécanique du matériau.

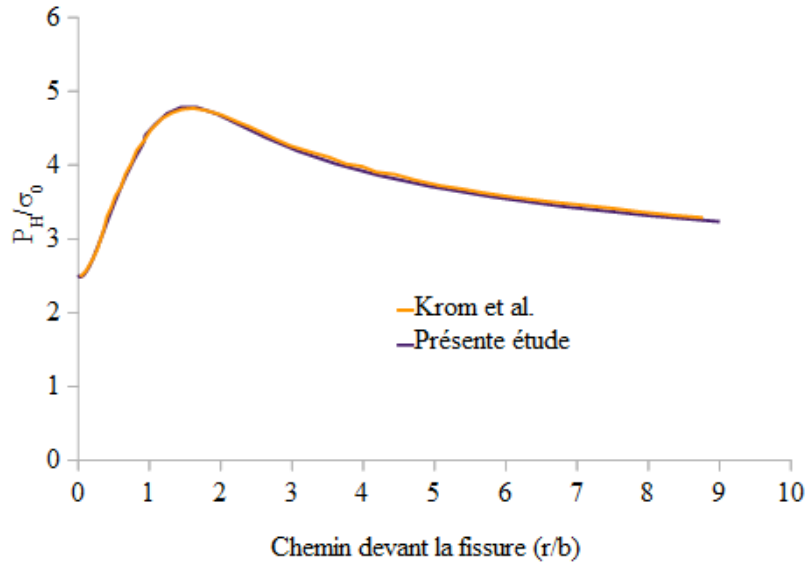
E (MPa)	$\nu$	$\sigma_0$ (MPa)	n
207000	0,3	250	0,2

**Tableau III.2.4.** Paramètres liés à la diffusion du matériau.

$D_L$ (m <sup>2</sup> /s)	$\bar{V}_H$ (m <sup>3</sup> /mol)	$N_L$ (atomes/m <sup>3</sup> )
$1,27 \times 10^{-28}$	$2 \times 10^{-6}$	$5,1 \times 10^{29}$

iv. Résultats

Les résultats sont donnés le long du ligament devant la fissure ( $\theta=0^\circ$ ). La distance à la pointe de fissure r est normalisée par de l'ouverture de la fissure  $b=10b_0$ .

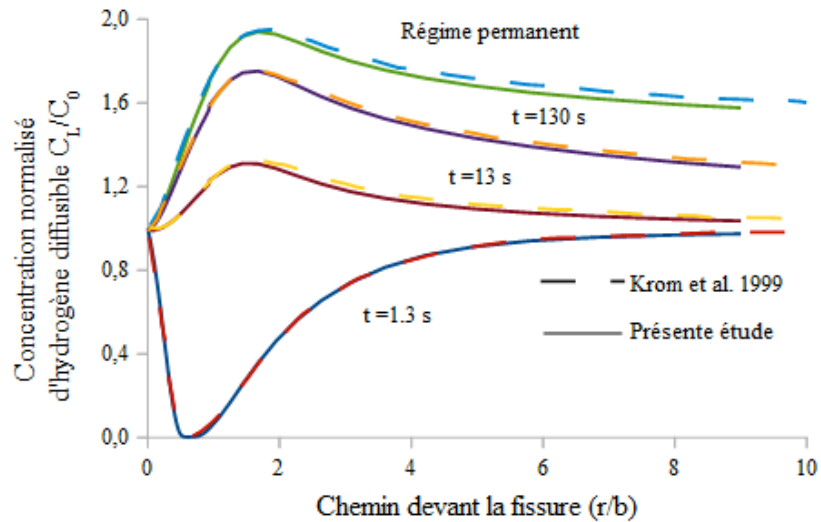


**Figure III.2.9** Comparaison entre les contraintes hydrostatiques normalisées en amont de la fissure pour  $t_1=130$  s (fin du chargement).  $r/b=0$  représente la pointe de la fissure.

Plusieurs temps  $t_1$  sont considérés afin d'étudier l'influence de la vitesse de déformation sur les résultats :  $t_1=1,3$  s, 13 s et 130 s.

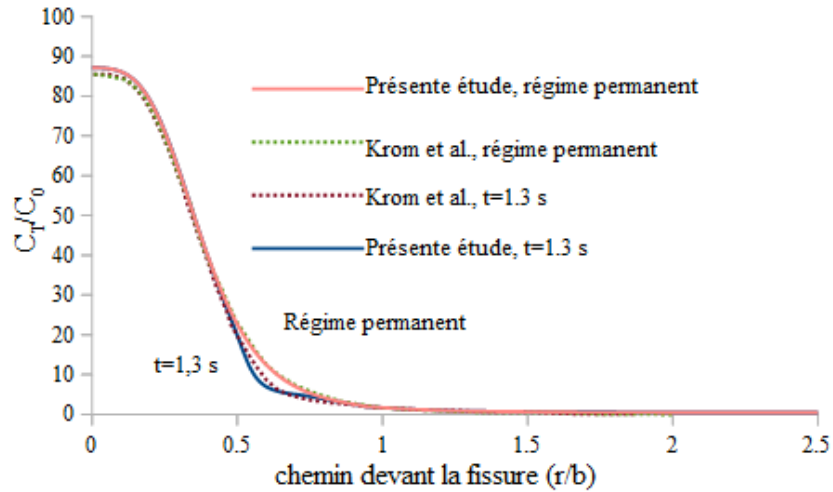
Les résultats mécaniques obtenus sont comparés avec ceux de avec Krom et al. [5], et reportés dans la figure III.2.9 (pour  $t_1=130$  s) : la pression hydrostatique est tracée le long de l'axe de symétrie.

On remarque que le profil de contrainte hydrostatique est le même dans notre calcul et dans ceux de la littérature [5,21]. On notera que la contrainte hydrostatique est maximum pour  $r=1,5 \times b$ .



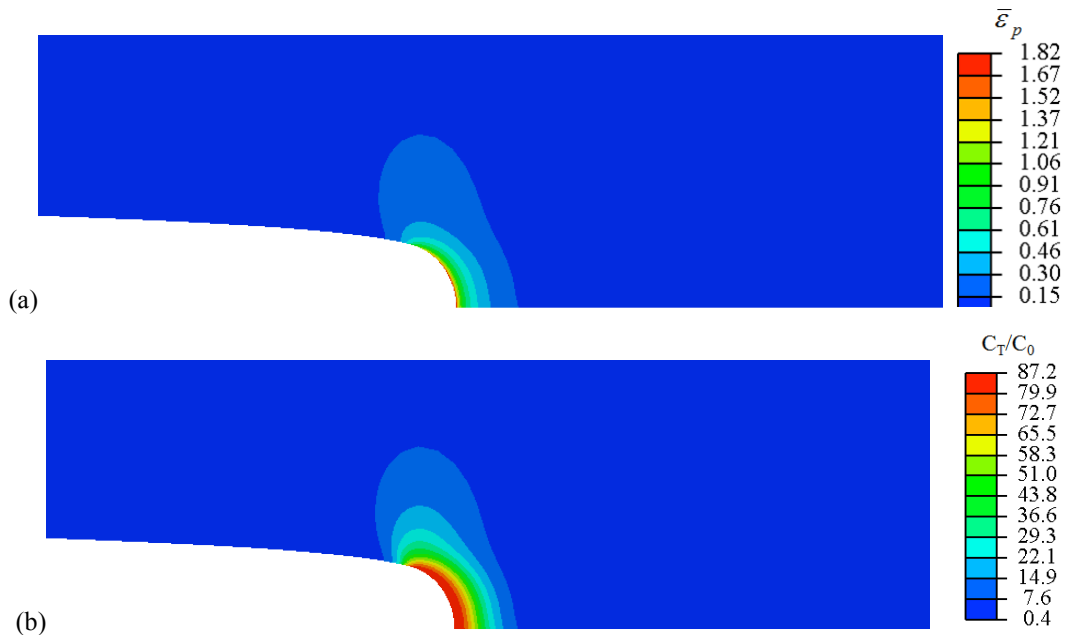
**Figure III.2.10.** Comparaison entre les valeurs d'hydrogène diffusif calculées et celles issue de [5] en avant de la fissure ;  $t_1=130$  s.  $r/b=0$  représente la pointe de la fissure.

L'évolution de la concentration en l'hydrogène diffusif  $C_L$  le long de l'axe de symétrie du problème, à différents temps, est montrée sur la figure III.2.10 ; on a là encore constaté un bon accord avec les résultats de Krom et al [5], pour les différents temps considérés.



**Figure III.2.11** Comparaison entre les valeurs calculées et celles issue de [5] pour la concentration en l'hydrogène piégé à la fin de chargement ( $t_1=1,3$  s) et en régime permanent.  $r/b=0$  représente la pointe de la fissure.

Enfin, on a comparé la concentration de l'hydrogène piégé  $C_T$  le long du plan de symétrie (figure III.2.11). En régime permanent, la courbe obtenue dans cette étude est très proche de celle de Krom [5]. Cependant, une légère différence est remarquée à  $t_1=1,3$  s (vitesse de chargement rapide). Ceci être attribué au fait que Krom et al. [5] prennent en compte la dilatation induite par l'hydrogène, alors que dans notre étude, cet effet est négligé.



**Figure III.2.12.** (a) Carte de la déformation plastique équivalente (temps du chargement  $t_1=1,3$  s) et (b) carte de la concentration normalisée de l'hydrogène piégé  $C_T$  (temps du chargement  $t_1=1,3$  s).

Enfin, pour illustrer la répartition spatiale de l'hydrogène, sur la figure III.2.12 sont données les répartitions de déformation plastique équivalente et d'hydrogène piégé au voisinage de la pointe de la fissure.

Les figure III.2.12 montre une correspondance entre ces déformations plastiques et hydrogène piégé : la déformation plastique maximale se concentre au niveau de la pointe de l'entaille, ce qui conduit à l'accumulation de l'hydrogène piégée à ce niveau.

A l'issue de ces confrontations avec les résultats de la littérature, on peut considérer que les algorithmes développés dans le cadre de ce travail, aussi bien pour la partie diffusion, que pour les parties comportement mécanique et couplage, donnent des résultats satisfaisants par rapport à des travaux de la littérature, aussi bien en régime permanent qu'en transitoire. Les petites différences qui subsistent, et qui ne dépassent pas 3%, peuvent être attribuées à la non-coïncidence du maillage en les deux calculs ou la tolérance dans la résolution du problème par la méthode de Newton-Raphson.

Les approfondissements nécessaires pour améliorer la précision numérique sortent des objectifs du présent travail et les procédures développées seront considérées comme validées.

### III. 2. c. Exemple de couplage hydrogène-plasticité isotrope et endommagement ductile

A titre d'illustration des possibilités offertes par la stratégie d'implémentation retenue, le couplage du modèle GTN avec une diffusion d'hydrogène a été effectué.

#### i. Comportement mécanique

L'évolution de la porosité est due à la croissance des vides existants (avec l'augmentation de la déformation plastique) et la création de nouveaux vides. La nucléation de vides est relié à la déformation plastique équivalente dans la matrice, et suit une loi normale [11], comme expliqué dans la section III.1.b (équations III.1.18 et III.1.20).

$$\begin{cases} \Delta f_n = A_n \Delta \bar{\epsilon}_m^p \\ A_n = \frac{A_0}{s_N \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\bar{\epsilon}_m^p - \epsilon_N}{s_N} \right)^2 \right] \end{cases} \quad (III.2.20)$$

Dans ce qui suit, le couplage diffusion d'hydrogène-modèle GTN a été testé sur une configuration et en posant des hypothèses simples.

La valeur moyenne  $\epsilon_N$  est supposée reliée linéairement à la concentration de l'hydrogène par :

$$\epsilon_N = \epsilon_0 \left( 1 - \frac{C}{C_n} \right), \quad (III.2.21)$$

où  $\epsilon_0$  est la valeur initiale de  $\epsilon_N$ ,  $C_n$  est un paramètre 'matériau', et  $C$  est la concentration totale en hydrogène. La diminution de  $\epsilon_N$  avec  $C$  permet d'augmenter la probabilité de nucléation de pores avec l'hydrogène.

Une simulation a été faite dans Abaqus pour illustrer ce couplage. La diffusion de l'hydrogène est modélisée par une loi de Fick simple (paragraphe I.2.a, équation I.2.1) en régime transitoire. La variable  $\epsilon_N$  est modifiée suivant l'équation III.2.21 dans l'UMAT-GU, où le modèle GTN a été défini (tableau III.1).

Les paramètres mécaniques du matériau fictif (pour une étude numérique) sont présentés dans le tableau III.2.5, l'écrouissage étant supposé linéaire tel que

$$\sigma_Y = \sigma_0 + k \bar{\epsilon}_p, \quad (III.2.22)$$

où  $\sigma_0$  est la limite élastique.

**Tableau III.2.5.** Paramètres du matériau fictif utilisés.

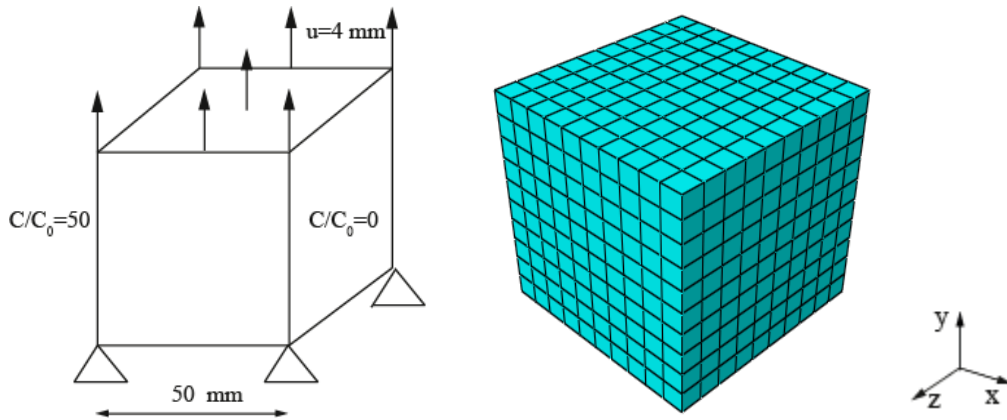
E (GPa)	$\nu$	k (MPa)	$q_i)_{i=1,2,3}$	$\sigma_0$ (MPa)	$\epsilon_N$	$s_N$	$A_0$	$C_n/C_0$	$D_L$ ( $\text{mm}^2/\text{s}$ )	$f_0$
200	0,3	1200	1	400	0,3	0,1	0,04	100	0,1	0,01

ii. Configuration et conditions aux limites

La structure considérée est un cube de 50 mm de côté, soumis à un déplacement imposé sur la face supérieure et à des conditions de symétrie sur la face inférieure (figure III.2.13).

On impose une concentration  $C/C_0=50$  sur une des faces latérale, et  $C/C_0=0$  sur la face opposée. Sur les autres faces, on impose un flux d'hydrogène nul.

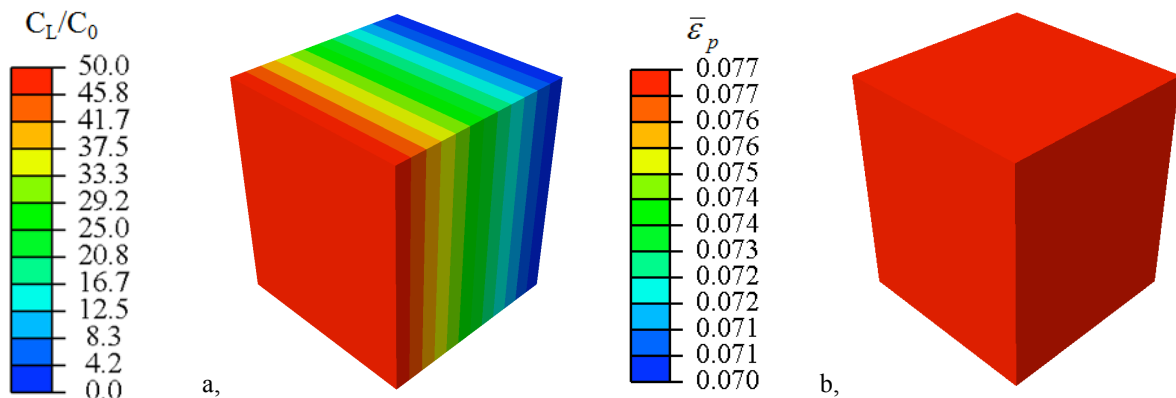
Le maillage est composé de 1000 éléments trilineaires hexaédriques, à intégration complète (figure III.2.13).



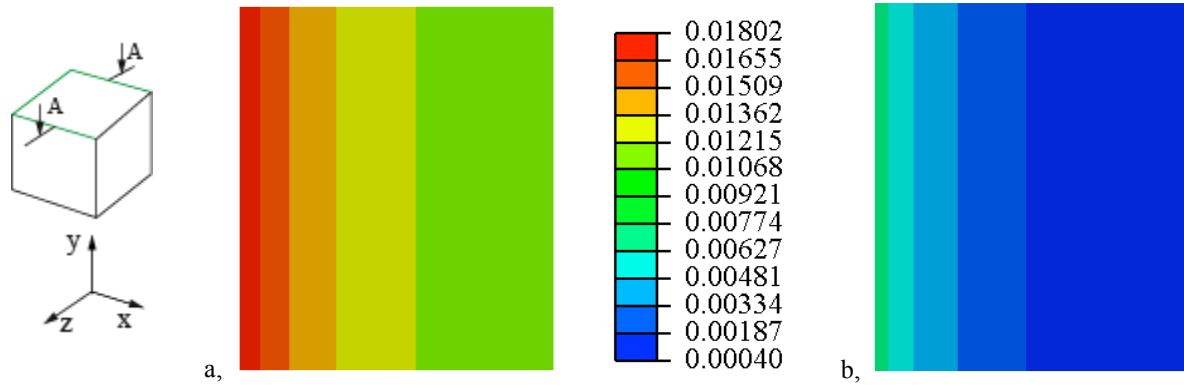
**Figure III.2.13** Conditions aux limites et maillage

iii. Résultats

Dans la figure III.2.14 sont représentés la déformation plastique et la concentration d'hydrogène à la fin du calcul, et sur la figure III.2.15 la porosité totale et la porosité créée.



**Figure III.2.14.** Cartes (a) de la concentration normalisée en hydrogène diffusif et (b) de la déformation plastique équivalente.



**Figure III.2.15.** Carte (a) de la porosité totale et (b) de la porosité créée sur la coupe A-A.

On peut observer sur les figure III.2.14 et III.2.15 l'influence du couplage introduit sur la création de pores : celle-ci est la plus grande là où la concentration est la plus importante.

Cet exemple simple a permis d'appliquer les différents outils développés, suggérant des couplages utilisables dans des calculs de structure non linéaires à partir de lois classiques de plasticité endommageable.

### **III. 3. Conclusion**

Dans ce chapitre, ont été présentés les comportements mécaniques implémentés dans Abaqus avec une procédure utilisateur UMAT, en donnant les grandes lignes de l'algorithme de résolution. Ces implémentations, couplées à de la diffusion transitoire ou permanente, ont été appliquées et confrontées à des configurations de la littérature. La comparaison des résultats a donné des résultats très satisfaisants permettant d'illustrer la validité et la fiabilité de l'implémentation, ainsi que sa polyvalence, malgré quelques légers écarts obtenus sur certains calculs. Un exemple original de couplage entre le modèle GNT et la diffusion transitoire a également été proposé.

Les procédures de couplage peuvent maintenant être appliquées à la modélisation d'un essai de caractérisation de la sensibilité des métaux à l'hydrogène, l'essai en U, support d'une étude paramétrique numérique.

### **Bibliographie**

- [1] *ABAQUS User subroutines references manual 2011.*
- [2] P. Sofronis, Y. Liang, et N. Aravas, *Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys.* European Journal of Mechanics A/Solids, 2001. **20**(6): p. 857-872.
- [3] Y. Liang, et al., *Effect of hydrogen trapping on void growth and coalescence in metals and alloys.* Mechanics of Materials, 2008. **40**: p. 115-132.
- [4] R.A. Oriani, *The diffusion and trapping of hydrogen in steel.* Acta Metallurgica, 1970. **18**(1): p. 147-157.
- [5] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.

- [6] V. Olden, et al., *Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25%Cr duplex stainless steel – Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements*. Engineering Fracture Mechanics, 2009. **76**(7): p. 827-844.
- [7] A.L. Gurson, *Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I-Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Materials*. Journal of Engineering Materials and Technology, 1977. **99**: p. 2–15.
- [8] V. Tvergaard, *Influence of void nucleation on ductile shear fracture at a free surface*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1982. **30**(6): p. 399-425.
- [9] V. Tvergaard et A. Needleman, *Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar*. Acta Metallurgica, 1984. **32**(1): p. 157-169.
- [10] F. Dunne et N. Petrinic, *Introduction to computational plasticity*. 2006: Oxford University Press.
- [11] V. Tvergaard, *Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions*. International Journal of Fracture, 1981. **17**(4): p. 389-407.
- [12] *Abaqus theory manual 2011*.
- [13] C.C. Chu et A. Needleman, *Void Nucleation Effects in Biaxially Stretched Sheets*. Journal of Engineering Materials and Technology, 1980. **102**(3): p. 249-256.
- [14] N. Aravas, *On the numerical integration of a class of pressure-dependent plasticity models*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1987. **24**(7): p. 1395-1416.
- [15] J. Koplik et A. Needleman, *Void growth and coalescence in porous plastic solids*. International Journal of Solids and Structures, 1988. **24**(8): p. 835-853.
- [16] T. Pardoen, *Numerical simulation of low stress triaxiality ductile fracture*. Computers and Structures, 2006. **54**: p. 1641-1650.
- [17] R.C. Lin, et al., *Performing RVE calculations under constant stress triaxiality for monotonous and cyclic loading*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2006. **66**(8): p. 1331-1360.
- [18] Y. Liang, P. Sofronis, et N. Aravas, *On the effect of hydrogen on plastic instabilities in metals*. Acta Materialia, 2003. **51**: p. 2717–2730.
- [19] C.-s. Oh, Yun-Jae, et K.-B. Yoon, *Couple analysis of hydrogen transport using Abaqus*. Journal of solid mechanic and materials engineering, 2010. **4**: p. 908-917.
- [20] C. Moriconi, *Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques*. Thèse doctorat. 2012.
- [21] P. Sofronis et R.M. McMeeking, *Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1989. **37**(3): p. 317-350.

## IV. Application à la simulation d'un essai de pliage en U

Ce chapitre est consacré à l'étude purement numérique d'un essai de pliage en U, essai de caractérisation phénoménologique de fragilisation par l'hydrogène. Une attention particulière est apportée à l'étude paramétrique des conditions d'essai et du couplage mécanique-diffusion.

### IV. 1. Présentation de l'essai

L'essai de pliage en U est un essai de corrosion sous contrainte qui permet de mettre en évidence la rupture différée d'un matériau métallique déformé plastiquement exposé à un milieu hydrogéné [1].

Le principe consiste à plier en forme de U un échantillon de tôle métallique, à le maintenir dans cet état de déformation (par exemple à l'aide d'une fixation par boulon) (figure IV.1.1).

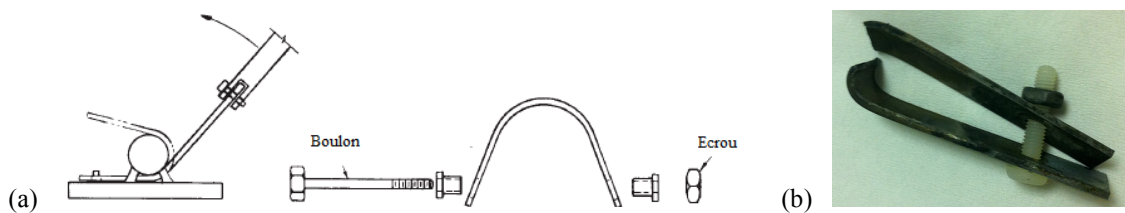


Figure IV.1. 1. (a) Principe de l'essai de pliage en U [2] et (b) FPH sur un acier haute résistance [3].

Cet échantillon est ensuite immergé dans une solution électrolytique produisant des ions hydrogène, qui peuvent pénétrer dans l'échantillon, et sont susceptibles d'entraîner une rupture différée par fragilisation du matériau par l'hydrogène (fig. IV.1.1b).

Dans cet essai, le rayon de courbure théorique du U permet de contrôler approximativement le niveau de déformation atteint dans l'échantillon, qui est généralement estimé à l'aide des formules de résistance des matériaux en flexion [1].

Plusieurs façons de faire le pliage sont présentées dans la norme américaine [1,2] :

- pliage par enroulement ;
- pliage par flexion 3 points ;
- pliage directement par un outil (le calibre) (figure IV.1.2).

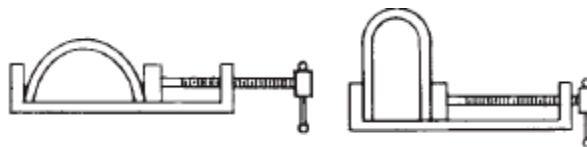


Figure IV.1.2. Pliage directement par un outil [2].

Le cas traité ici correspond au pliage par flexion 3 points, qui présente l'avantage d'une configuration initiale symétrique, comme illustré figure IV.1.3.

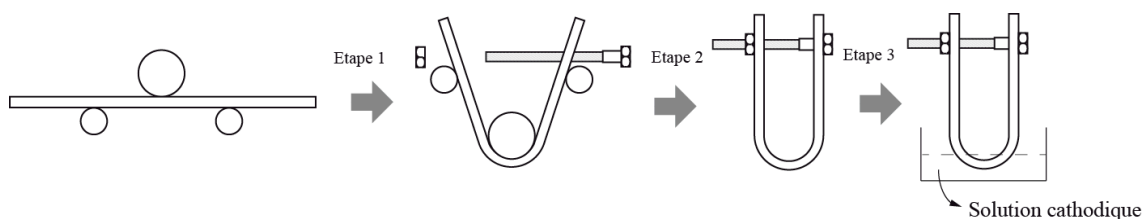


Figure IV.1.3 Principe de l'essai de pliage en U.



La tôle est d'abord déformée en flexion trois points, puis la forme en U est créée et maintenue à l'aide d'un boulon de serrage. Les champs mécaniques issus de cette procédure dépendent notamment du rayon des rouleaux utilisés pour la flexion, de leur écartement, ainsi que de la position du boulon. La simulation numérique par éléments finis de la mise en forme du U permet de préciser l'influence de ces différents paramètres géométriques, ainsi que de l'écroutissage du matériau sur la diffusion et le piégeage ultérieurs de l'hydrogène dans le matériau.

## ***IV. 2. Simulation de l'essai de pliage***

La géométrie du problème est présentée dans la figure IV.2.1. On modélise en 2D un échantillon de longueur 100 mm et d'épaisseur 1,6 mm. R est le rayon du rouleau mobile et D est la distance entre les deux rouleaux d'appui. L représente la position du boulon comptée à partir de l'extrémité de l'échantillon.

### *IV. 2. a. Conditions de chargement*

Le chargement se fait en plusieurs étapes qui sont présentées dans la figure IV.1.3 :

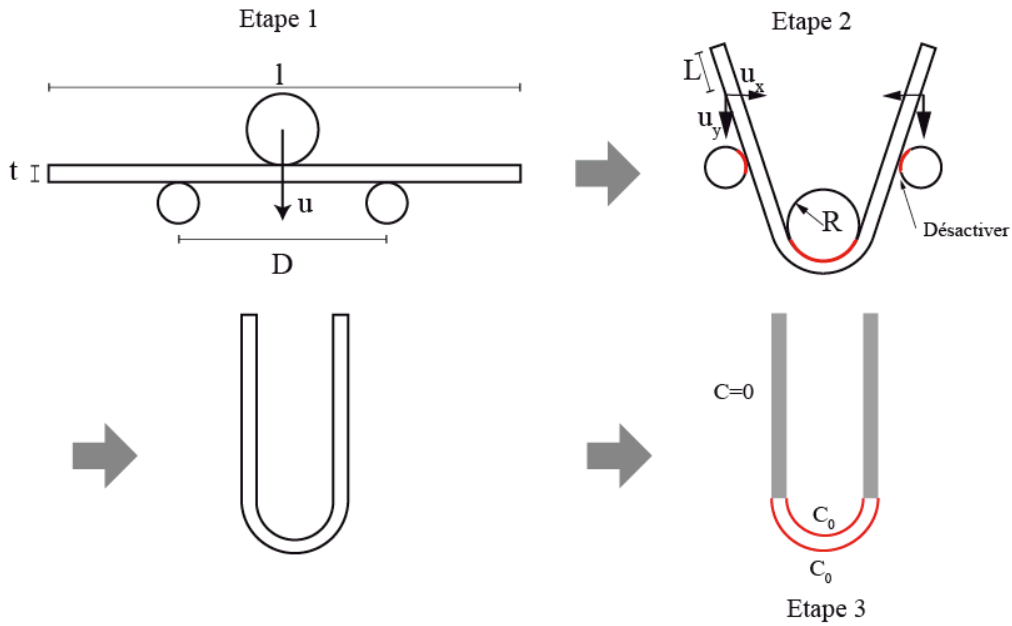
- étape 1 : un déplacement  $u$  est imposé au rouleau central pour ébaucher une forme en V, dont les branches forment alors un angle aigu. A la fin de cette étape, les rouleaux d'appui et le rouleau central sont retirés en désactivant les contacts entre ceux-ci et l'éprouvette ;
- étape 2 : la « mise en place du boulon » est modélisée par un déplacement ponctuel  $(u_x, u_y)$ , imposé à la distance L de l'extrémité libre (« position du boulon ») sur les branches de l'ébauche en V jusqu'à les rendre parallèles et former ainsi la forme en U. La distance entre les branches du U au niveau du « boulon » est maintenue constante ;
- étape 3 : une concentration d'hydrogène  $C_0$  est imposée sur le bord interne et externe de la zone immergée du U pour simuler le chargement cathodique en hydrogène; ailleurs, on impose une concentration nulle (partie hors de la solution).

Le tableau IV.2.1 synthétise les valeurs de déplacement utilisées pour les différentes valeurs de R, L, et D considérées.

**Tableau IV.2.1.** Valeurs des conditions limites imposées.

R ; L ; D (mm)	3 ; 10 ; 18	3 ; 10 ; 20	3 ; 10 ; 22	3 ; 20 ; 22	7 ; 10 ; 22	3 ; 10 ; 24
$u$ (mm)	8,5	12,4	16,3	16,3	13	14,5
$u_x$ (mm)	34,6	34,3	34,29	25	31,8	34,28
$u_y$ (mm)	25,3	24,07	22,85	15,67	17,1	21,5

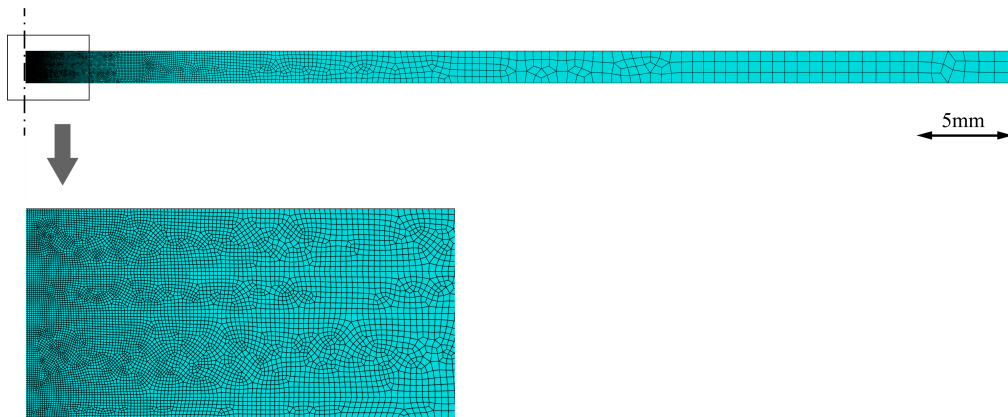
Les contacts entre l'appui et l'échantillon, ainsi qu'entre l'échantillon et le rouleau sont définis sans frottement, et sans interpénétration. On définit la configuration de référence suivante : L=10 mm, D=24 mm, R=3 mm.



**Figure IV.2.1.** Conditions aux limites dans la simulation de l'essai en U.

#### IV. 2. b. Maillage

Le modèle est composé de 20484 éléments bilinéaires à 4 nœuds et à intégration complète (en déformations planes, CPE4 dans Abaqus).



**Figure IV.2.2.** Maillage de l'échantillon, avec zoom sur la zone d'intérêt.

Dans cet essai, on s'intéresse surtout à la zone autour de l'axe de symétrie (indiquée dans la figure IV.2.2), a priori la plus déformée, et où la fissure macroscopique est observée expérimentalement, initiée depuis le bord en traction [1]. Par conséquent, le maillage est plus fin dans cette zone. Les tailles d'éléments ont été choisies de telle manière à ce que les résultats soient indépendants du maillage. L'élément le plus petit mesure 0,016 mm et le plus grand mesurent respectivement 0,8 mm (figure IV.2.2).

#### IV. 2. c. Matériau

Le comportement mécanique est supposé élasto-plastique à écrouissage isotrope, la surface de plasticité étant définie par

$$\sigma_{eq} - \sigma_Y(\bar{\epsilon}_p) = 0, \quad (IV.2.1)$$

où  $\sigma_{eq}$  est la contrainte équivalente de Von Mises et  $\bar{\epsilon}_p$  la déformation plastique équivalente.

L'élasticité est définie par un module d'Young et un coefficient de Poisson tels que  $E=20000$  MPa et  $\nu=0,3$ . On considère en première approximation un simple écrouissage linéaire :

$$\sigma_Y = \sigma_0 + k\bar{\epsilon}_p, \quad (IV.2.2)$$

avec  $k=1200$  MPa, et une limite élastique  $\sigma_0=906$  MPa. Ces paramètres fictifs ont été inspirés des caractéristiques mécaniques de l'acier dual-phase utilisé dans [1].

### IV. 3. Influence des paramètres géométriques sur les champs mécaniques

Une étude paramétrique a été effectuée pour étudier la sensibilité des champs mécaniques dans la zone de courbure du U pour différentes configurations, définies par le rayon R, la position L du boulon et l'écart D entre les rouleaux d'appui. Le tableau IV.3.1 résume les valeurs utilisées.

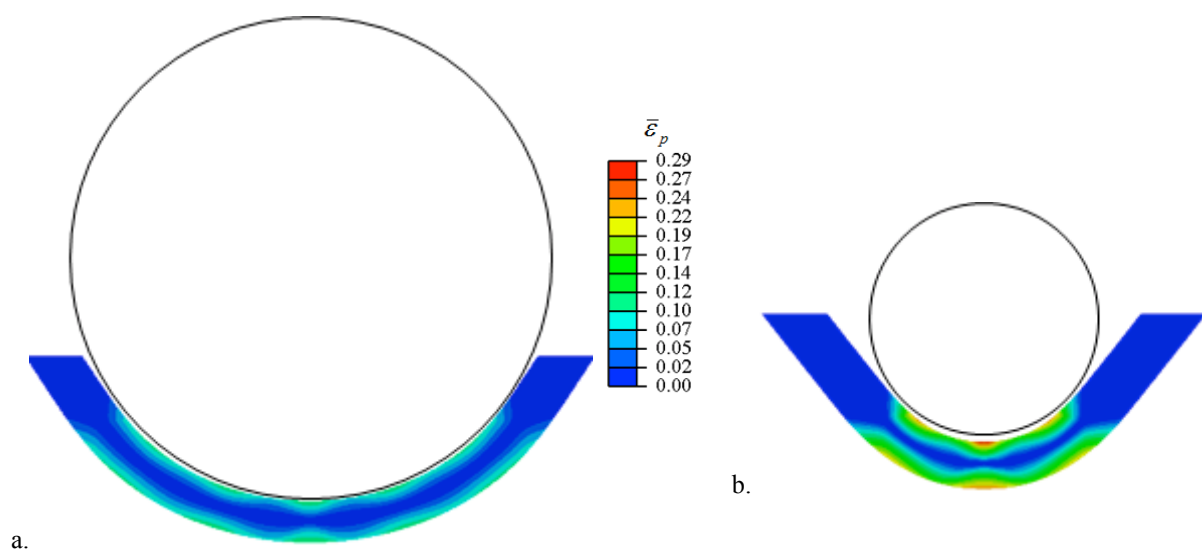
**Tableau IV.3.1.** Paramètres géométriques utilisés dans les simulations.

R (mm)	L (mm)	D (mm)
3; 7	10; 20 ; 30	18; 20; 22

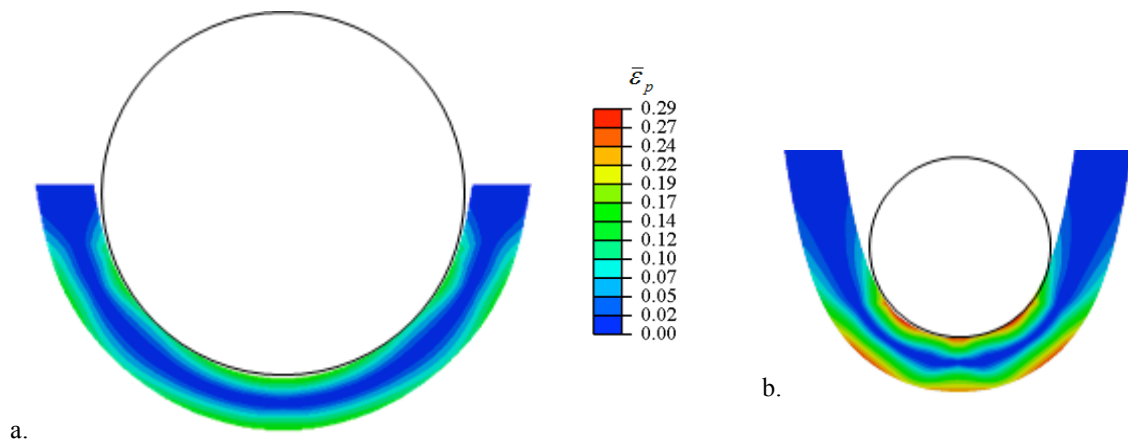
Pour tous les calculs, lorsque la valeur de l'un des paramètres (R,L,D) n'est pas précisé, c'est qu'il est pris égal à sa valeur dans la configuration de référence.

#### IV. 3. a. Influence du rayon du rouleau R

Des simulations de pliage en U sont faites pour les rayons  $R=3$  et  $7$  mm, D et L ayant les valeurs de la configuration de référence. La figure IV.3.1 présente la déformation plastique obtenue pour les différents rayons du rouleau à l'issue des 2 étapes de pliage.



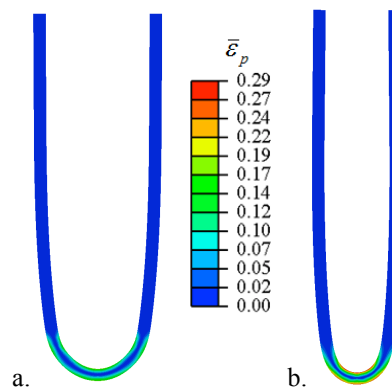
Avant la mise en place du boulon, à la fin de l'étape 1.



A la fin du pliage, fin de l'étape 2.

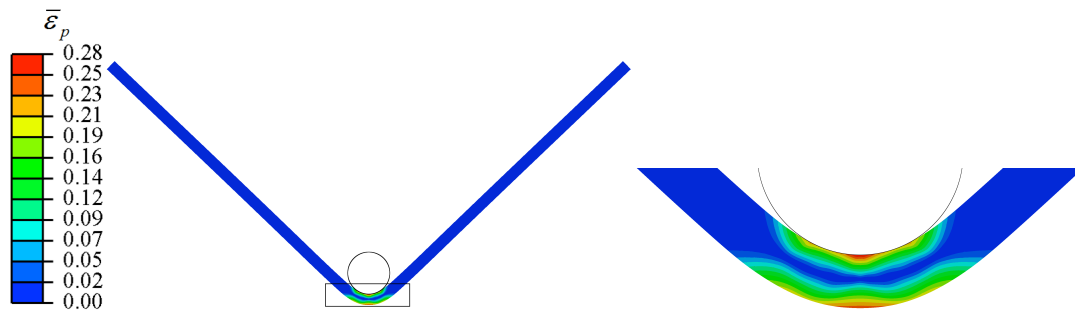
**Figure IV.3.1.** Déformation plastique équivalente dans la tôle dans la zone la plus déformée après chaque étape de la formation du U pour (a) R=7 mm et (b) R=3 mm.

Pour cette flexion autour d'un rouleau de rayon fixé, on peut attendre une déformation plastique plus importante quand le rayon diminue. Ainsi, la déformation plastique équivalente pour le cas R=3 mm (maximum de l'ordre 29%) est beaucoup plus grande que celle obtenue pour le cas R=7 mm (maximum de l'ordre 14%). L'estimation selon la formule de résistance de matériau  $\bar{\epsilon}_p = t/(2(2R + t))/\sqrt{3}$  [1] donne une déformation plastique équivalente maximale 23% et 11% pour le cas R=3 mm et R=7 mm (l'épaisseur de l'éprouvette étant t=1,6 mm). Les déformations équivalentes obtenues dans les simulations sont plus élevées que celles estimées par la formule théorique.



**Figure IV.3.2.** Déformées totale à la fin de l'étape 2 de l'éprouvette pour (a) R=7 mm et (b) R=3 mm.

On remarque que la mise en place des boulons « fictif » (la distance entre 2 branches est maintenue constante) provoque pour le rayon R=3 mm une déformation plastique qui est maximum quand les 2 branches de l'échantillon forment un angle voisin de 45° (fin de l'étape 1 du pliage, la déformation plastique équivalente maximum de 29% est atteint), cette valeur maximum ne varie pas dans le processus de formation du U (étape 2). Ceci est dû au changement de mode de déformation entre les deux étapes du pliage : quand la tôle s'enroule autour du rouleau central, la déformation plastique est relativement bien répartie au niveau du contact. Cependant, à partir d'un certain déplacement (u=8,5 mm), le contact entre le rouleau et la tôle se localise sur deux zones symétriques par rapport au centre du rouleau (figure IV.3.3).

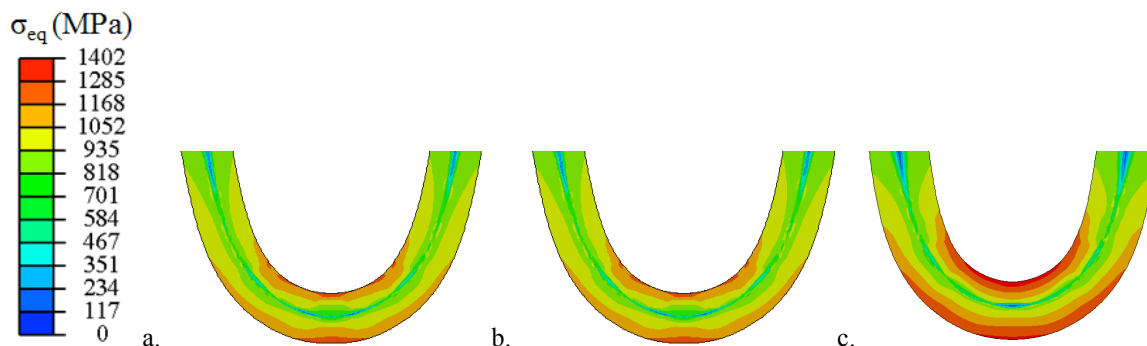


**Figure IV.3.3.** La déformation plastique équivalent correspondant à déplacement imposé  $u=8,5$  à l'étape 1 et l'agrandissement sur le zone d'intérêt.

Lorsque les rouleaux sont enlevés, la déformation se localise dans les zones déjà fortement déformées, accentuant la formation de zones fortement plastifiées de part et d'autre de l'axe de symétrie, et diminuant le rayon apparent du U. Ce phénomène semble d'autant plus important que  $R$  est faible, comme illustré par les figures IV.3.1 et IV.3.2.

#### IV. 3. b. Influence de la position du boulon de serrage ( $L$ )

Pour étudier l'influence de la position du boulon sur le champ mécanique, trois simulations de pliage avec différentes valeurs de  $L$  : 10 mm, 20 mm et 30 mm, ont été effectuées, en utilisant  $R=3$  mm. La figure IV.3.4 montre le champ de contrainte équivalente obtenue dans les 3 cas. Les profils sont similaires à la fin du chargement (fin étape 2), mais plus le boulon est proche du rayon du U (plus  $L$  est grand), plus grande est la contrainte obtenue. La valeur de contrainte équivalente maximale s'obtient dans tous les cas sur l'apex du U.



**Figure IV.3.4.** Contrainte équivalente de von Mises à la fin du pliage pour 3 positions différentes du boulon : (a)  $L=10$  mm (b)  $L=20$  mm (c)  $L=30$  mm.

Les profils de contrainte équivalente de von Mises sur le bord externe de la tôle sont présentés sur la figure IV.3.5.

On remarque que pour les trois cas, on obtient la contrainte la plus grande au niveau de l'apex du U (point M), comme attendu. Cependant, on note également des pics de contraintes au voisinage de l'axe de symétrie. Ces pics correspondent aux zones à forte déformation plastique située de part et d'autre de l'axe de symétrie, et créés par la mise en place du boulon (voir le paragraphe IV.3.a sur l'influence du rayon  $R$ ). On remarque que plus  $L$  est grand (plus le boulon est mis proche de la zone courbée du U), plus ces pics sont importants, ce qui correspond à une plus grande localisation de la déformation lors du passage de l'ébauche en flexion à la forme en U finale (figure IV.3.1). Inversement, plus  $L$  est faible, plus la contrainte se localise au niveau de l'axe de symétrie de l'échantillon.

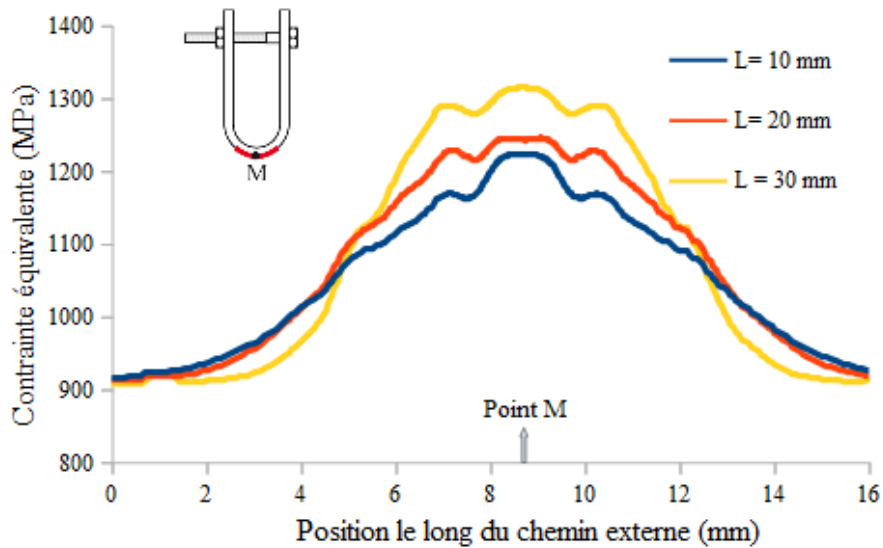


Figure IV.3.5. Contrainte sur le bord externe de l'échantillon pour L=10, 20 et 30 mm.

IV. 3. c. Influence de l'écart entre les appuis (D)

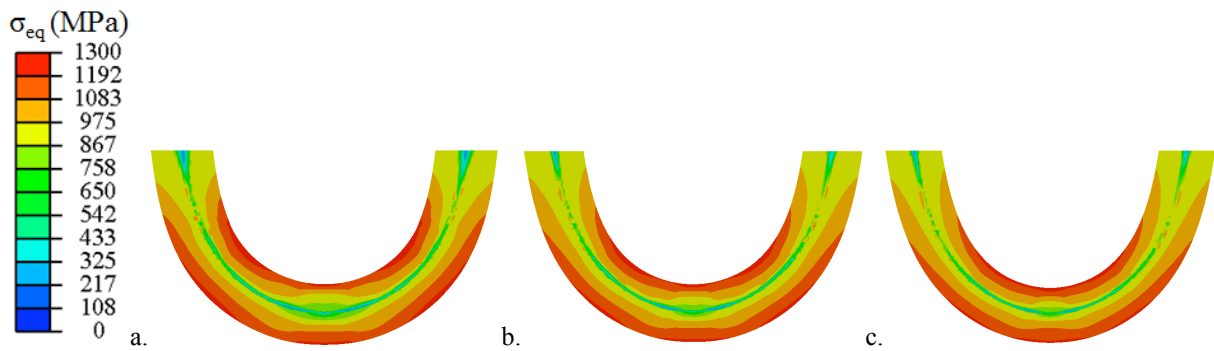


Figure IV.3.6. Contrainte équivalente de von Mises à la fin du pliage (fin de l'étape 2) pour 3 valeurs de D : (a) D=18 mm (b) D=20 mm (c) D=22 mm.

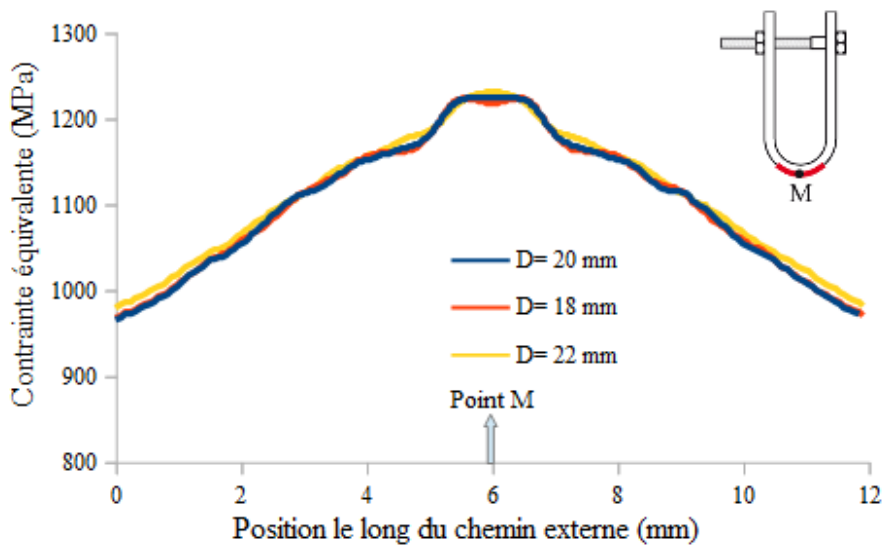


Figure IV.3.7. Contrainte sur le bord externe de l'échantillon pour D=18, 20 et 22 mm.

Trois calculs ont été effectués, pour D=18, 20 et 22 mm. Ces valeurs sont choisies suffisamment grandes pour que les appuis n'empêchent pas l'ébauche de l'éprouvette lors de l'étape 1.

Sur la figure IV.3.6 on remarque que le profil de contrainte équivalente pour les trois cas est presque identique, ce qui est confirmé par les profils de contrainte équivalente sur le bord externe de la tôle tracés sur le graphique IV.3.7.

Dans la gamme de valeurs considérées le paramètre D influe donc peu sur la contrainte Von Mises.

#### *IV. 3. d. Conclusion*

Les simulations précédentes montrent que les paramètres géométriques de l'essai de pliage en U peuvent influencer fortement la répartition des champs de contraintes ou déformations, qui s'éloignent nettement des approximations basiques de la flexion simple, d'autant que les niveaux de déformation plastique atteints sont relativement élevés (typiquement 30% en déformation équivalente). Avec les dimensions utilisées, la position à laquelle la distance entre branches du U est imposée, i.e. la position du boulon, a une incidence notable sur la distribution des champs mécaniques. L'étude de sensibilité a permis également de montrer que la configuration de référence choisie est un bon compromis pour localiser la contrainte équivalente maximale au niveau de l'apex de l'éprouvette, zone attendue de risque de rupture dans les études expérimentales.

### ***IV. 4. Etude paramétrique sur la diffusion et le piégeage de l'hydrogène***

Pour les valeurs de L et D de la configuration de référence, la variation de la concentration d'hydrogène dans la tôle est étudiée en fonction de divers paramètres : le rayon R, la loi d'écroutissage du matériau, la relation entre hydrogène piégé et diffusif, et les conditions limites en hydrogène.

Dans tous les calculs, les paramètres liés à la diffusion de l'hydrogène sont issus de [4,5] : le coefficient de la diffusion d'hydrogène est  $D_L=3.10^{-7}$  cm<sup>2</sup>/s, le volume partiel molaire de l'hydrogène est  $\bar{V}_H=2.10^{-6}$  m<sup>3</sup>. On suppose, sauf dans le paragraphe IV.4.d, que les deux populations d'hydrogène sont reliées par [6]

$$C_T=(a+b \bar{\varepsilon}_p)C_L, \quad (IV.4.1)$$

avec a=0,1 et b=49. Cette relation a été implémentée dans la procédure UMATHT-G1 (tableau III.1), avec la diffusion couplée d'hydrogène.

L'hydrogène absorbé dans l'échantillon au cours du temps peut se déterminer par

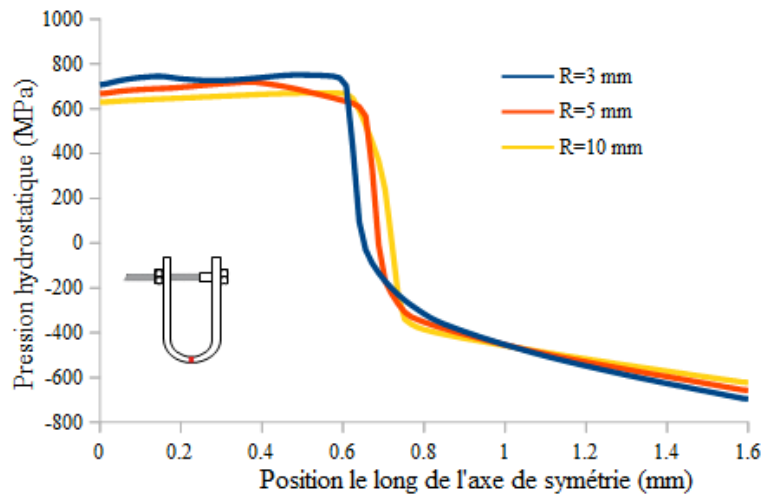
$$Q_{absorbé} = \sum_{k \in \{pt Gauss\}} V_k (C_T^k + C_L^k). \quad (IV.4.2)$$

Cette quantité est calculée à l'aide d'un script Python en se servant des valeurs de la concentration d'hydrogène  $(C_T^k + C_L^k)$  aux points d'intégration k et leurs volumes associés  $V_k$ .

Enfin, sauf dans le paragraphe IV.4.b, le comportement mécanique de la tôle est celui donné dans le paragraphe IV.2.c.

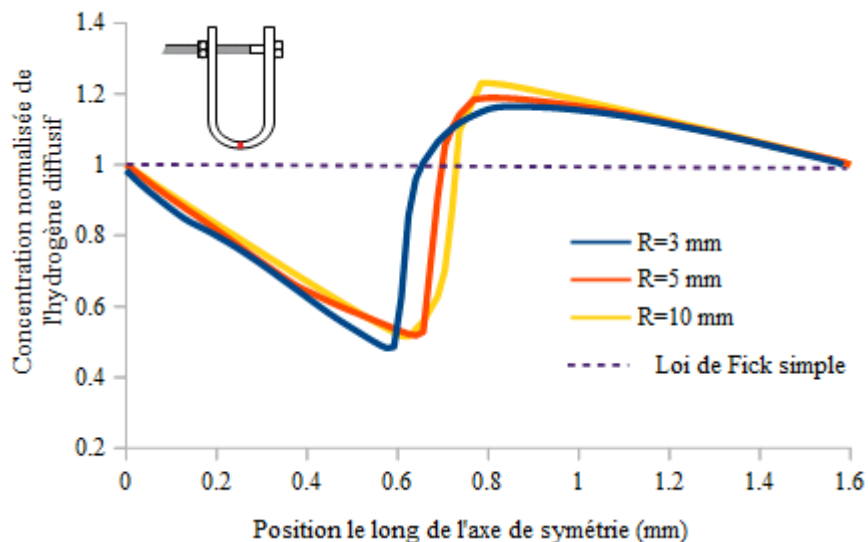
#### IV. 4. a. Influence de R.

Des calculs ont été effectués avec  $R=3, 5$  et  $10$  mm. Sur la figure IV.4.1 est tracée l'évolution de la pression hydrostatique  $P_H$  le long de l'axe de symétrie.



**Figure IV.4.1.** Variation de la pression hydrostatique le long de l'axe de symétrie (la position 0 correspond au bord interne du U).

Comme attendu la pression hydrostatique est minimale sur le bord externe pour les 3 calculs, zone où la traction est prédominante. Les trois courbes sont assez similaires, ce qui laisse prévoir qu'il y aura peu d'influence du rayon de rouleau sur la répartition de l'hydrogène diffusif, au moins au voisinage de l'axe de symétrie. Les profils de la concentration de l'hydrogène diffusif le long de l'axe de symétrie sont tracés sur la figure IV.4.2, en régime permanent.



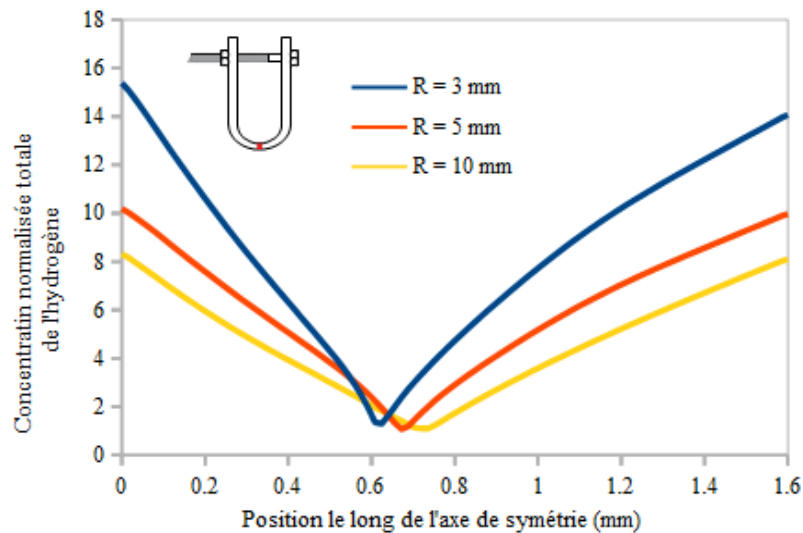
**Figure IV.4.2.** Concentration normalisée de l'hydrogène diffusif  $C_1/C_0$  le long de l'axe de symétrie en régime permanent (0 correspond au bord interne du U).

La concentration de l'hydrogène diffusif est maximale au voisinage de la fibre moyenne pas sur le bord externe (lieu de fissuration macroscopique causée par l'hydrogène [1]), alors que l'on aurait pu attendre une concentration maximale là où la pression hydrostatique est minimale (la pression hydrostatique est définie négative en traction). Ceci est dû au fait que la concentration est imposée sur les bords externes, et égale à  $C_0$ . Avec ces conditions, en



régime permanent, sans l'influence de la pression hydrostatique, la répartition de l'hydrogène est uniforme (trait pointillé dans la figure IV.4.2). Or, l'équation I.2.19 montre que l'hydrogène se diffuse vers la zone en traction (donc pour une pression hydrostatique négative). Donc, il y a effectivement une compétition entre les conditions aux limites imposées et le modèle de diffusion (la diffusion est pilotée par le gradient de la concentration d'hydrogène et la pression hydrostatique) sur la distribution spatiale de l'hydrogène.

Sur la figure IV.4.3, la concentration totale de l'hydrogène est tracée, toujours en régime permanent.



**Figure IV.4.3.** Concentration normalisée de l'hydrogène totale  $C/C_0$  le long de l'axe de symétrie en régime permanent pour différents rayons de rouleau (0 correspond au bord interne du U).

La concentration totale de l'hydrogène est nettement plus grande, sur le bord externe en tous les cas, que l'hydrogène diffusif, à cause de la relation entre  $C_L$  et  $C_T$  utilisée (équation IV.4.1) et du fait que dans les 3 cas, la déformation plastique équivalente est maximale (et donc la concentration de l'hydrogène piégé est maximal) sur les bords internes et externe.

Quand le rayon augmente, la déformation plastique équivalente sur l'axe de symétrie diminue, donc la concentration de l'hydrogène piégé diminue. En plus, l'hydrogène piégé est dominant par rapport à l'hydrogène diffusif (l'équation IV.4.1). Par conséquent, la concentration totale d'hydrogène, qui est la somme de la population piégé et diffusif, diminue quand le rayon du rouleau augmente (figure IV.4.3).

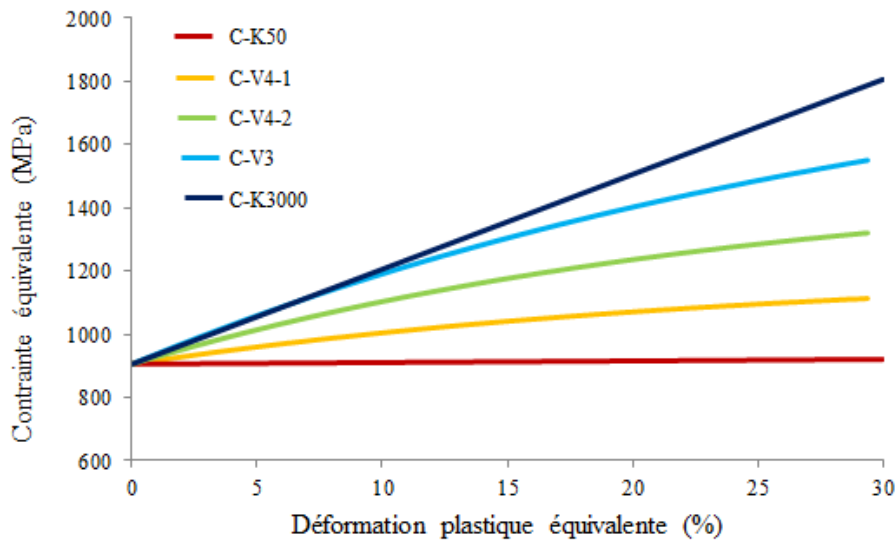
Les quantités d'hydrogène absorbé dans ces trois cas sont présentées dans le tableau IV.4.1.

**Tableau IV.4.1.** Quantité d'hydrogène absorbé dans l'échantillon en fonction de R.

Simulation	R=3 mm	R=5 mm	R=10 mm
Quantité totale d'hydrogène absorbé ( $C_0 \cdot \text{mm}^3$ )	119,72	113,52	87,46

#### IV. 4. b. Influence de l'érouissage sur la quantité d'hydrogène absorbé

##### i. Comportements mécaniques utilisés



**Figure IV.4.4.** Comportements mécaniques utilisés dans l'étude paramétrique.

Deux types de lois d'érouissage isotrope ont été utilisés pour une même limite d'élasticité  $\sigma_0=906$  MPa :

- érouissage linéaire défini par un taux d'érouissage  $k$  constant

$$\sigma_Y = \sigma_0 + k\bar{\varepsilon}_p. \quad (\text{IV.4.3})$$

Des calculs ont été effectués pour  $k=3000$  MPa (simulation notée C-K3000) et pour  $k=50$  MPa (simulation notée C-K50), pour traduire respectivement un taux d'érouissage élevé ou faible ;

- un érouissage saturant de type Voce

$$\sigma_Y = \sigma_0 + R_{\text{sat}} \left(1 - e^{-C\bar{\varepsilon}_p}\right) \quad (\text{IV.4.4})$$

défini par les constantes  $R_{\text{sat}}$  et  $C$ . Dans ce cas la contrainte de saturation est  $\sigma_0 + R_{\text{sat}}$  et le taux d'érouissage décroît de  $R_{\text{sat}}$  à zéro. Les valeurs utilisées sont données dans le tableau IV.4.2.

**Tableau IV.4.2.** Les paramètres  $R_{\text{sat}}$  et  $C$  utilisés dans l'étude paramétrique.

Nom de la simulation	$R_{\text{sat}}$ (MPa)	$C$
C-V3	1100	3
C-V4-1	300	4
C-V4-2	600	4

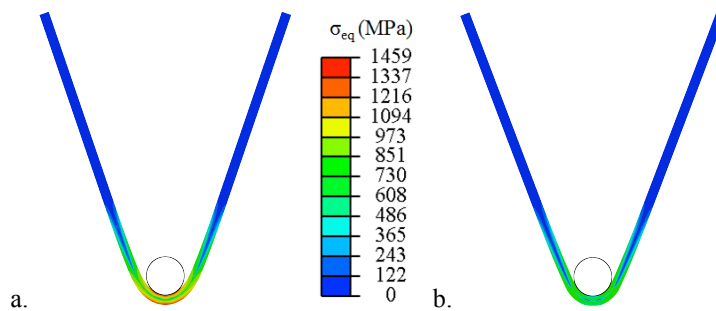
Les différents comportements sont illustrés par la figure IV.4.4.

Les conditions du calcul, comme le maillage et les conditions limites, sont identiques à celles des calculs précédents (section IV.4.a). Le calcul de diffusion est effectué en régime permanent.

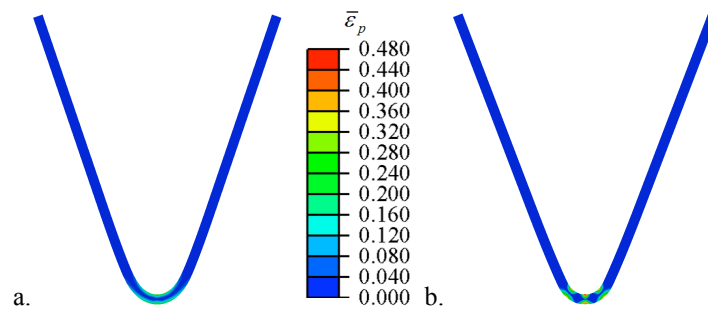
Les résultats obtenus sont présentés dans les figures IV.4.5 à IV.4.16. On présente ici le champ de contrainte équivalente de Von Mises (figure IV.4.9), de la pression hydrostatique (figure IV.4.10), de la contrainte principale maximale (figure IV.4.11), de la déformation plastique équivalente (figure IV.4.12), de la concentration en hydrogène diffusif (figure IV.4.13) et de la concentration en hydrogène piégé à la fin du calcul (figure IV.4.15).

ii. Résultats : champs mécaniques

La figure IV.4.5 représente les champs de contrainte équivalente dans tous les calculs à la fin de l'étape 1 (pliage par flexion 3 points, fig. IV.2.1, section IV.2.a). A cette étape du calcul, la déformée globale est largement dominée par les conditions aux limites cinématiques imposées par le rayon fixé et les conditions de contact sans frottement, et dépend ainsi peu de la loi d'écrouissage, comme illustré par la figure IV.4.5.

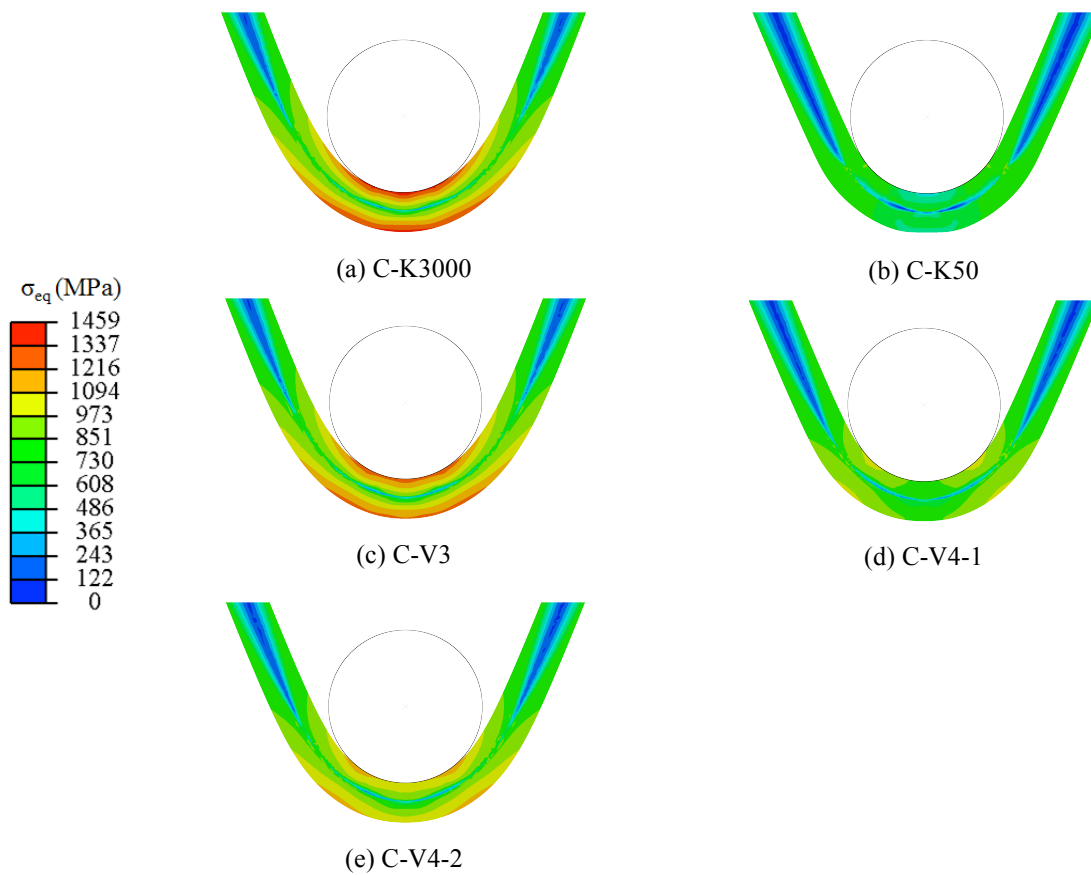


**Figure IV.4.5.** Déformée globale et isovaleurs de contrainte équivalente en fin d'étape 1 pour (a) C-K3000 et (b) C-K50.



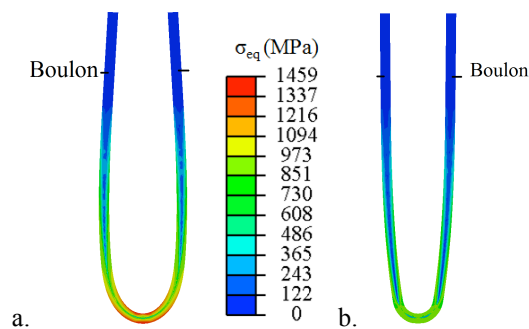
**Figure IV.4.6.** Déformée globale et isovaleurs de déformation plastique équivalente en fin d'étape 1 pour (a) C-K3000 et (b) C-K50.

La déformation plastique équivalente est maximale dans la zone pliée et atteint 47% pour le calcul C-50 et 25% pour le calcul C-3000 comme illustré figure IV.4.6. Les niveaux de contrainte les plus élevés sont obtenus pour le calcul C-K3000 et les plus faibles pour le calcul C-K50 ce qui est cohérent avec la hiérarchie des courbes d'écrouissage.

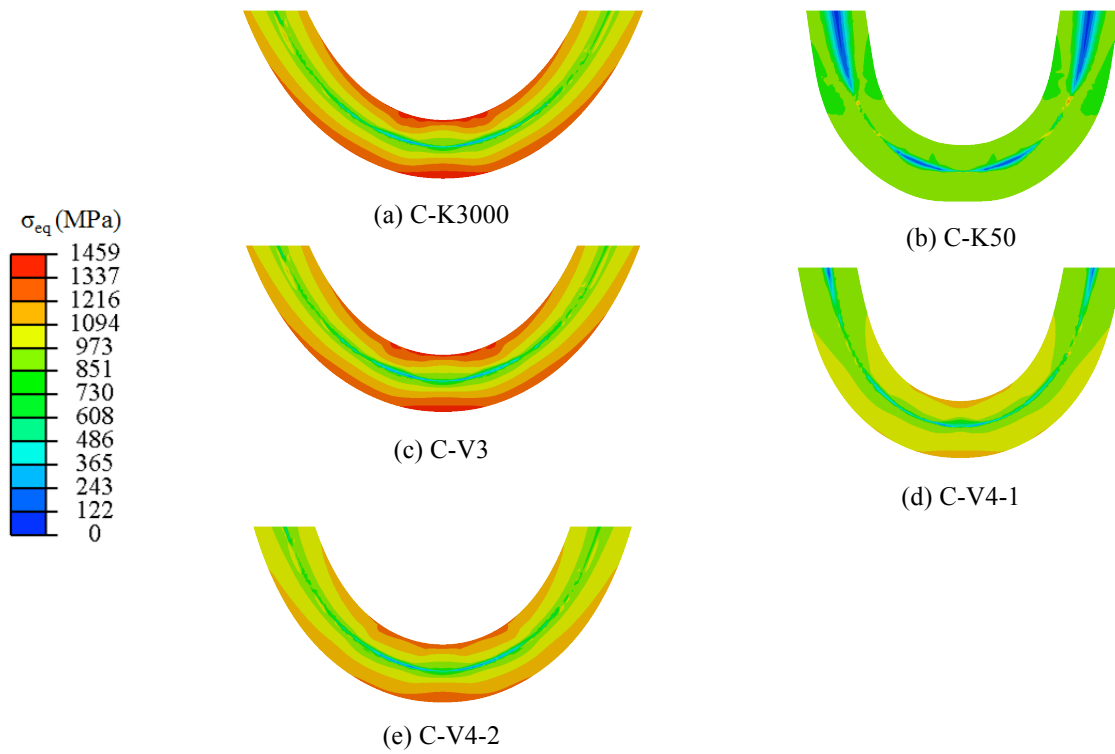


**Figure IV.4.7.** Contrainte équivalente de von Mises dans la tôle à la fin de l'étape 1 de pliage pour différents cas d'écroissage.

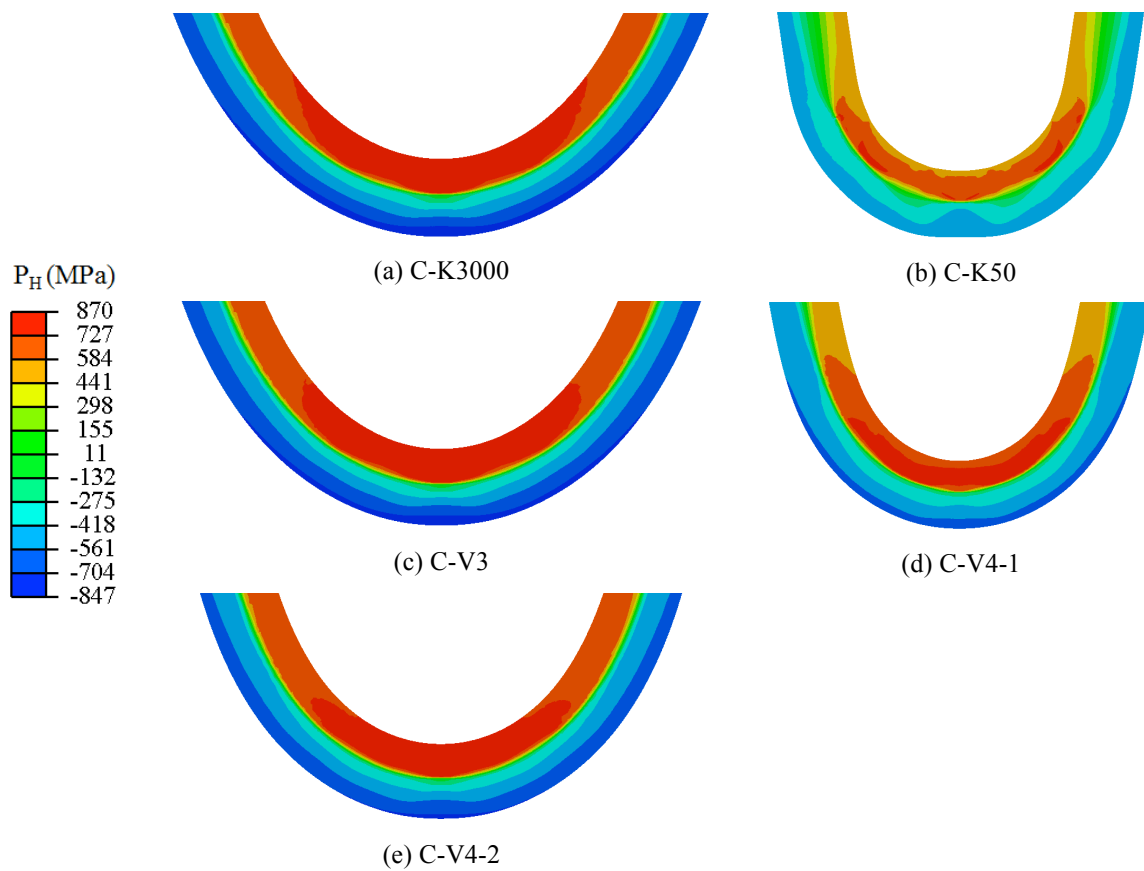
A la fin du pliage (fin de l'étape 2) par contre, après retrait des rouleaux et rapprochement des branches du U pour simuler la mise en place du boulon, les configurations déformées sont très différentes selon l'écroissage, comme illustré figure IV.4.8 pour les calculs C-K3000 et C-K50.



**Figure IV.4.8.** Déformée totale de l'éprouvette pour les calculs (a) C-K3000 et (b) C-K50 à la fin du pliage en U (étape 2).



**Figure IV.4.9.** Contrainte équivalente de von Mises dans la tôle déformée en U, à la fin de l'étape 2, pour différentes lois d'érouissage.

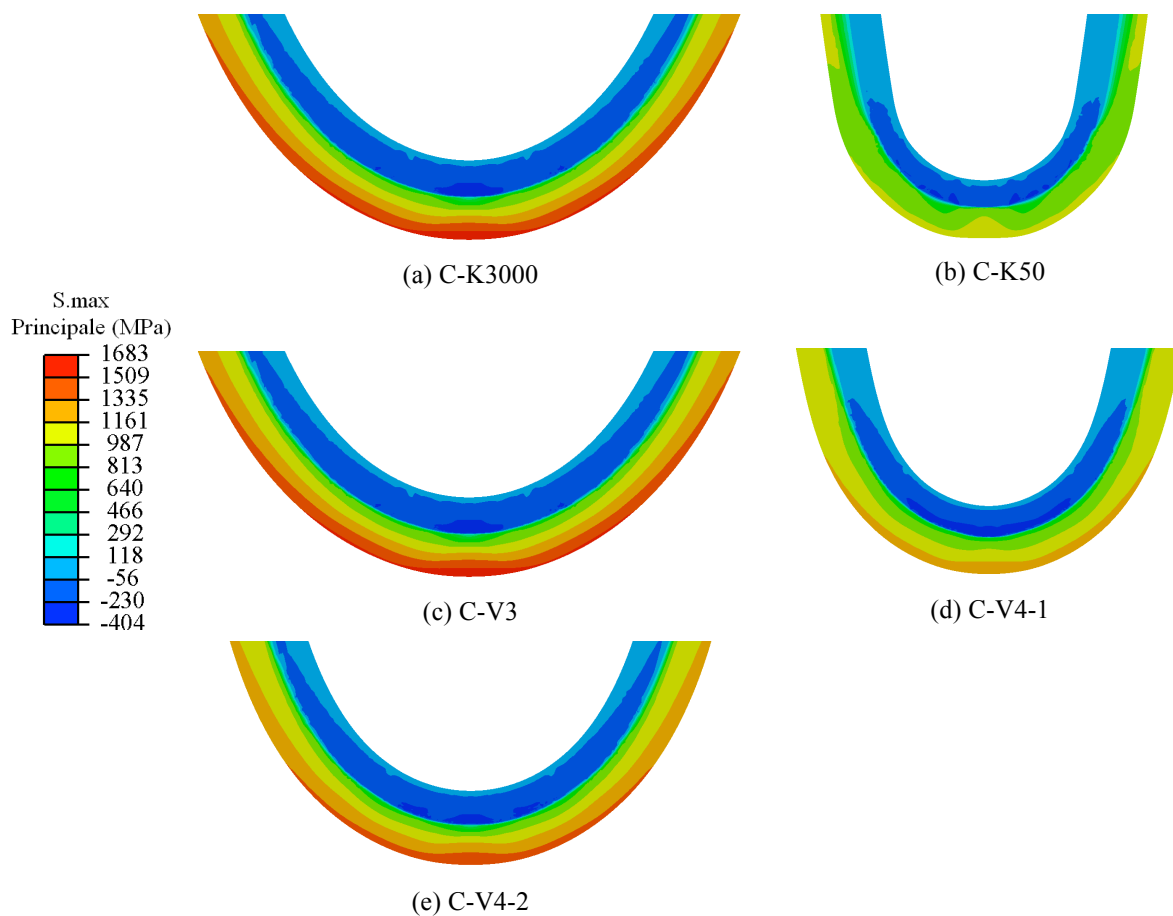


**Figure IV.4.10.** Pression hydrostatique dans la tôle déformée en U, à la fin de l'étape 2, pour différentes lois d'érouissage.

Sur la figure IV.4.9, on montre les champs de contrainte équivalente dans tous les calculs. On remarque des évolutions sensibles par rapport à l'étape 1 (figure IV.4.7) ; l'augmentation des niveaux de contraintes est cohérente avec la hiérarchie des courbes d'érouissage.

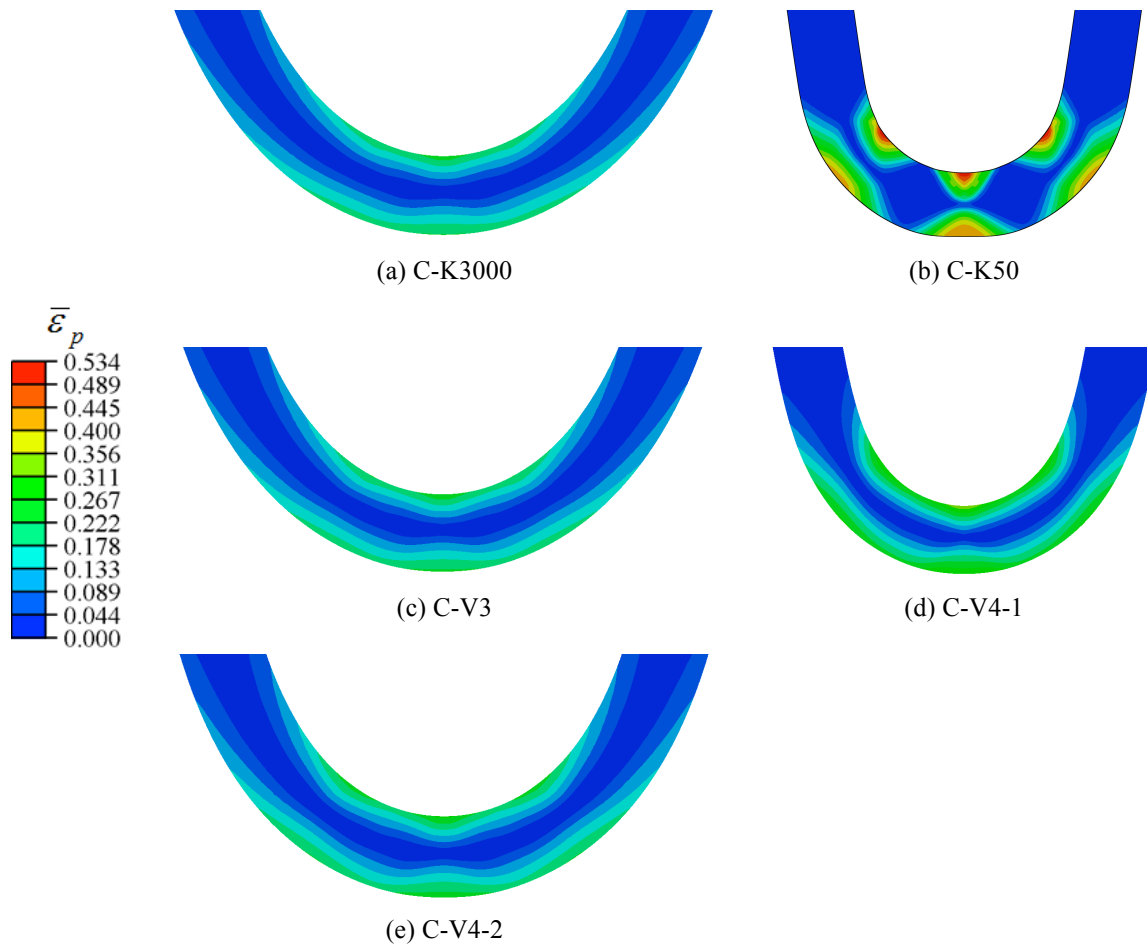
Le champ de la pression hydrostatique (figure IV.4.10) présente une distribution globalement similaire dans les simulations a, c, et e, où la pression hydrostatique est maximale dans une large zone à partir de la fibre intérieure de part et d'autre de l'axe de symétrie du U, tandis que la pression est maximale à l'intérieur de l'échantillon pour les calculs b et d. Pour toutes les simulations cependant la pression est minimale (et donc la dilatation volumique maximale) sur la fibre extérieure.

Sur la figure IV.4.11, on présente la distribution spatiale de la contrainte principale maximale. Dans tous les cas, on constate bien que l'échantillon est en compression dans la fibre interne et en traction dans la fibre externe.



**Figure IV.4.11.** Contrainte principale maximale dans la tôle déformée en U, à la fin de l'étape 2, pour différentes lois d'érouissage.

Sur la figure IV.4.12 sont tracées les cartes de déformation plastique équivalente.



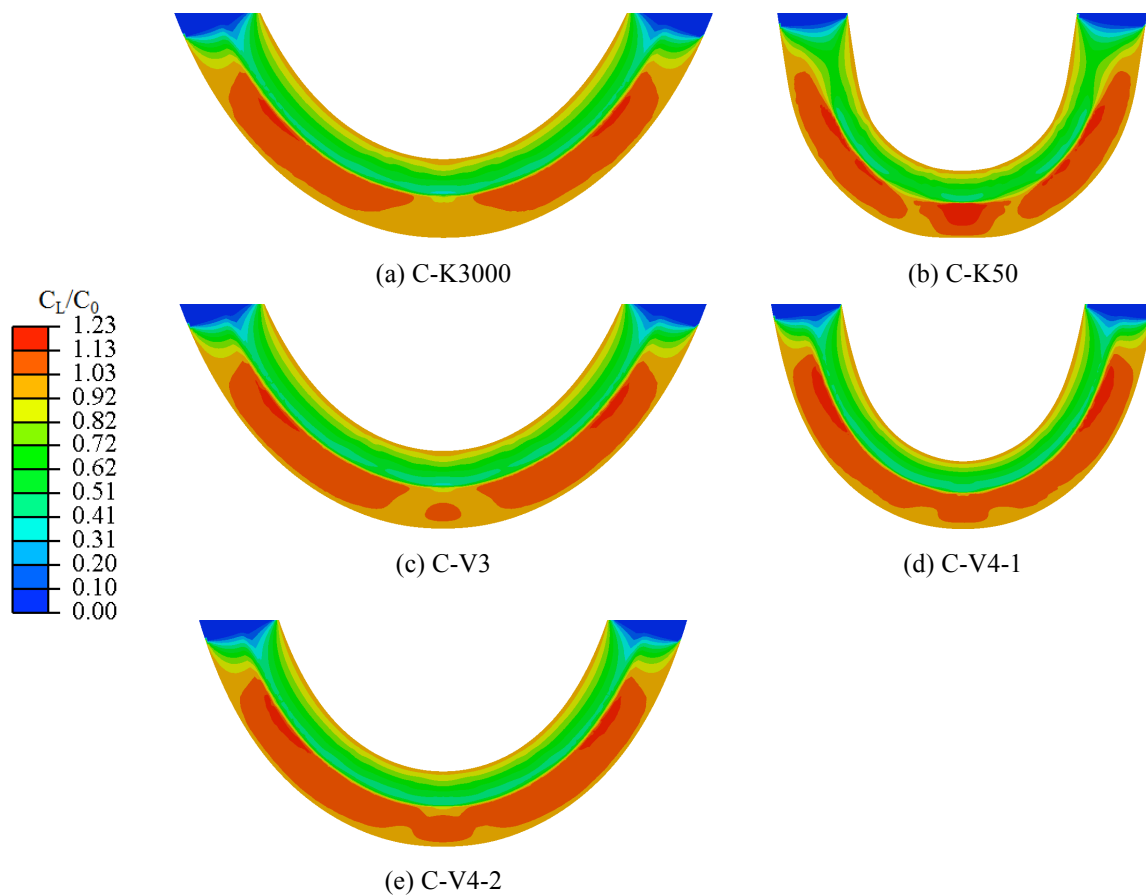
**Figure IV.4.12.** Déformation plastique équivalente dans la tôle déformée en U, pour différentes lois d'écroutissage.

On remarque dans la figure IV.4.12 que les champs de déformation plastique dans toutes les simulations sont très proches, avec une déformation équivalente maximale de l'ordre de 30%, sauf pour le calcul C-K50. Dans ce dernier cas, la déformation plastique est extrêmement localisée en trois endroits, d'une part sur l'axe de symétrie de l'éprouvette, et d'autre part, sur deux zones symétriques par rapport à cet axe. Ces trois zones correspondent aux zones de contact successif entre le rouleau et l'éprouvette. Dans ce cas, la déformation plastique équivalente atteint plus de 50%.

Dans toutes les simulations, sauf pour K-50, on remarque que la déformation plastique équivalente cumulée est du même ordre de grandeur à l'intérieur et à l'extérieur du U.

La distribution spatiale de la déformation plastique lors de l'étape finale du pliage en U est donc très sensible à la loi d'écroutissage, du fait des conditions de surfaces libres supplémentaires, qui produit une forte localisation lorsque le taux d'écroutissage est faible.

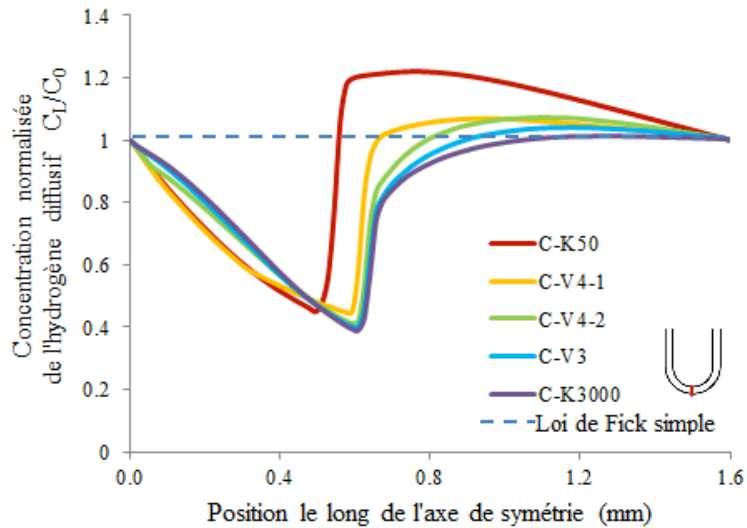
iii. Résultats : diffusion



**Figure IV.4.13.** Concentration normalisée en hydrogène diffusif dans la tôle déformée en U, pour différentes lois d'écroutissage.

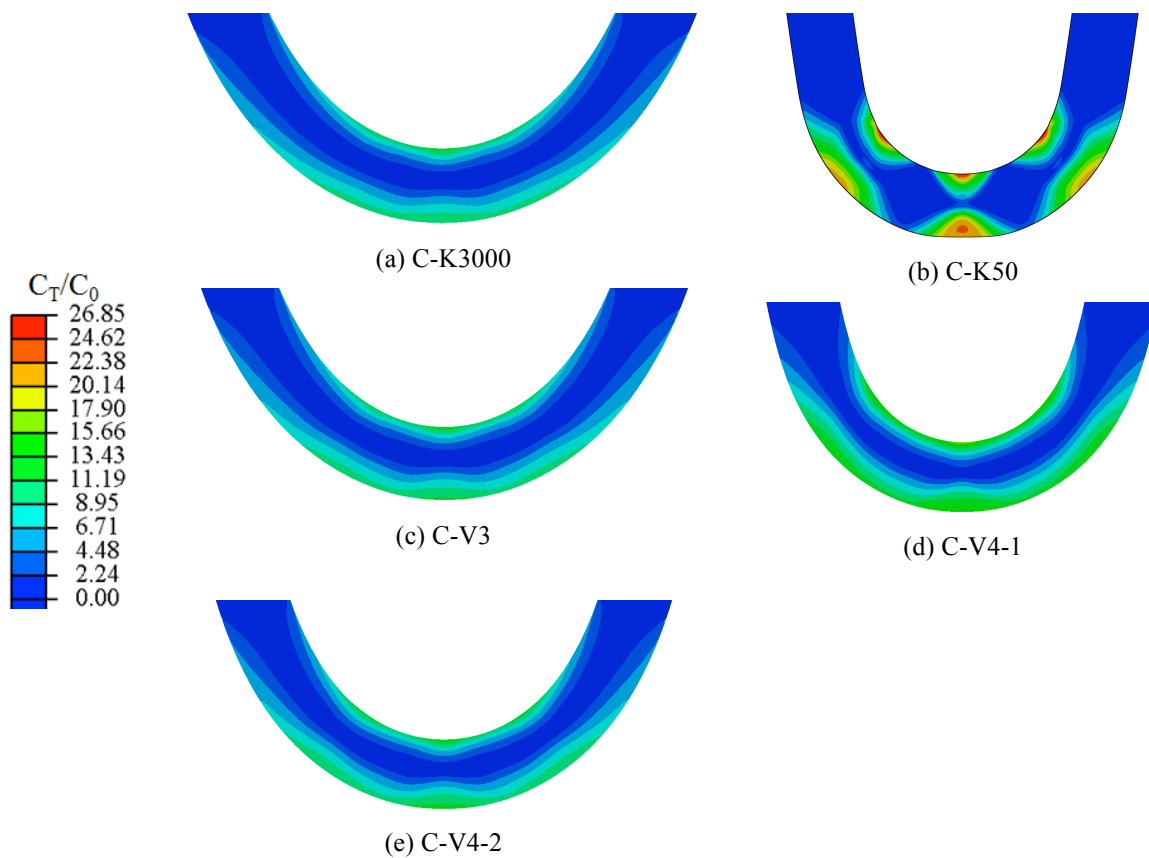
La distribution spatiale de la concentration d'hydrogène diffusif, présentée dans la figure IV.4.13, comporte, dans les cinq simulations, une concentration identique en fibre interne et en fibre externe, à cause des conditions aux limites imposées. Entre les deux sont visibles deux larges zones de surconcentration (côté fibre externe) ou sous-concentration (côté fibre interne). Les lieux de concentrations maximales dépendent des lois d'écroutissage, et sont davantage situés au milieu de l'épaisseur dans des zones symétriques pour les calculs a, c, et e, alors qu'ils concernent aussi la zone axiale dans le calcul b. On peut remarquer que la concentration n'est pas maximale à l'apex du U, zone dans laquelle une distribution hétérogène est observée, plus ou moins qualitativement liée à la distribution spatiale de la pression hydrostatique (figure IV.4.10).





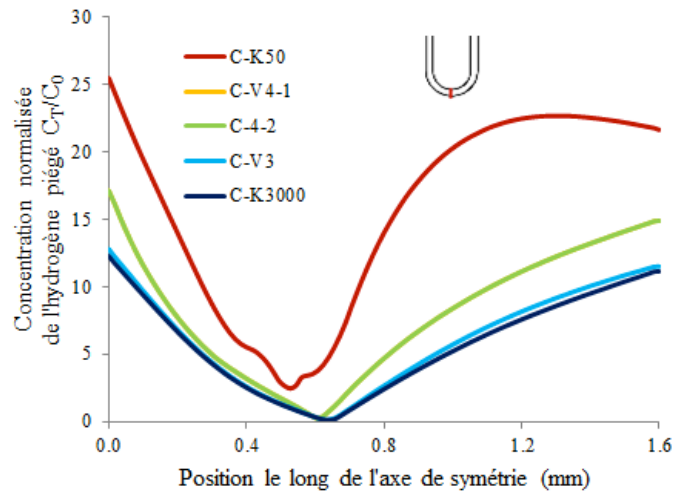
**Figure IV.4.14.** Variation de la concentration normalisée d'hydrogène diffusif  $C_T/C_0$  le long de l'axe de symétrie du U pour les différentes lois d'écroutissage (0 correspond au bord interne du U).

La figure IV.4.14 montre l'effet de la loi d'écroutissage sur le profil de concentration en hydrogène diffusif le long de l'axe de symétrie du U. On remarque que les minimums de la concentration de l'hydrogène diffusif se décalent vers l'intérieur du U pour le taux d'écroutissage le plus faible.



**Figure IV.4.15.** Concentration normalisée en hydrogène piégé dans la tôle déformée en U, pour différentes lois d'écroutissage.

La concentration de l'hydrogène piégé (figure IV.4.15) montre une correspondance directe avec la déformation plastique présentée dans la figure IV.4.12, ce qui est logique car l'hydrogène piégé est influencé par la déformation plastique. On constate ainsi que la forte localisation de la déformation plastique dans le calcul C-K50 induit des surconcentrations très importantes de l'hydrogène piégé, avec un facteur de l'ordre de 20 sur les bords externes avec les valeurs utilisées. Ces calculs soulignent donc l'importance des hétérogénéités de déformation plastique dans le couplage avec l'hydrogène.



**Figure IV.4.16.** Variation de la concentration normalisée d'hydrogène piégé  $C_T/C_0$  le long de l'axe de symétrie (0 correspond au bord interne du U).

Le profil de concentration d'hydrogène piégé le long de l'axe de symétrie (figure IV.4.16), montre également les similarités entre les différents lois d'écroutissage, avec une tendance à l'augmentation de la concentration d'hydrogène piégé lorsque le taux d'écroutissage ( $d\sigma_{eq} / d\bar{\epsilon}_p$ ) diminue. On note également un piégeage plus important à l'intérieur du U que sur l'apex. Pour le calcul K-50, le profil est de forme nettement différente compte-tenu des hétérogénéités de déformation : dans ce cas, les évolutions respectives de la déformation plastique et de l'hydrogène diffusif impliquent un maximum d'hydrogène piégé, donc un maximum d'hydrogène total (comme l'hydrogène piégé est dominant par rapport à l'hydrogène diffusif) dans une zone chargée en traction qui n'est plus à l'apex du U, mais légèrement en dessous.

Afin de comparer les calculs avec un indicateur global, dans le tableau IV.4.3, on donne les quantités totales (normalisée par  $C_0$ ) d'hydrogène contenues dans le U en régime permanent (équation IV.4.2)

**Tableau IV.4.3.** Quantité d'hydrogène absorbé dans l'échantillon.

Ecroutissage	C-K50	C-V4-1	C-V4-2	C-V3	C-K3000
Quantité totale d'hydrogène absorbé ( $C_0 \cdot \text{mm}^3$ )	109,77	104,49	94,55	89,26	87,29

Ces valeurs permettent de constater que plus l'écroutissage est important (la contrainte d'écoulement est importante), moins il y a d'hydrogène dans le U. En effet, on remarque que de l'écroutissage est relié à la répartition de la déformation plastique sur les bords internes et externes de l'échantillon (figure IV.4.12) : moins il est fort, plus la déformation plastique se

localise dans certaines zones (et atteint de fortes valeurs), et donc plus la quantité d'hydrogène piégé augmente.

On remarque enfin que la relation choisie entre déformation plastique, hydrogène diffusif et piégé induit des quantités d'hydrogène absorbées bien plus importantes que pour une diffusion sans piégeage. Dans ce cas (équation I.2.10), les quantités totales d'hydrogène diffusif absorbé sont montrées dans le tableau IV.4.4.

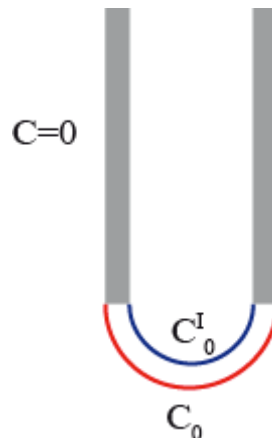
**Tableau IV.4.4.** Quantité d'hydrogène diffusif absorbé dans l'échantillon pour une diffusion sans piégeage.

Simulation	C-K50	C-V4-1	C-V4-2	C-V3	C-K3000
Quantité totale d'hydrogène diffusif absorbé ( $C_0 \cdot \text{mm}^3$ )	16,52	16,3	16,25	16,17	16,11

#### IV. 4. c. Influence des conditions aux limites en hydrogène

Dans les calculs effectués jusqu'à présent, les conditions aux limites en hydrogène étaient supposées identiques sur les faces interne et externe du U. Cependant, comme la face interne est en compression et la face externe est en traction (cf figure IV.4.11), il est légitime de supposer que la concentration d'hydrogène absorbée sur la face intérieure soit plus faible que sur la face extérieure.

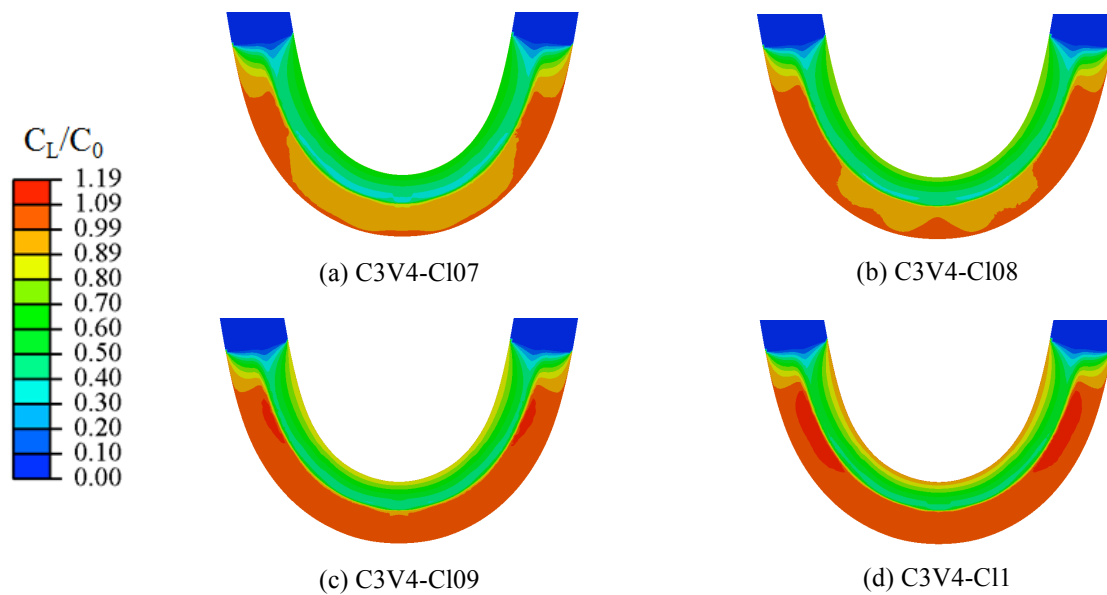
Dans ce paragraphe, on se propose de modifier les conditions aux limites sur le bord intérieur du U (figure IV.4.17), en imposant une valeur constante de concentration  $C_0^I < C_0$  sur le bord interne. Quatre cas ont été testés, avec  $C_0^I = 0,7C_0$ ,  $0,8C_0$ ,  $0,9C_0$  et  $C_0$ . Ces 4 calculs sont notés C3V4-C107, C3V4-C108, C3V4-C109 et C3V4-C111 respectivement.



**Figure IV.4.17.** Conditions aux limites en hydrogène sur les bords interne et externe du U.

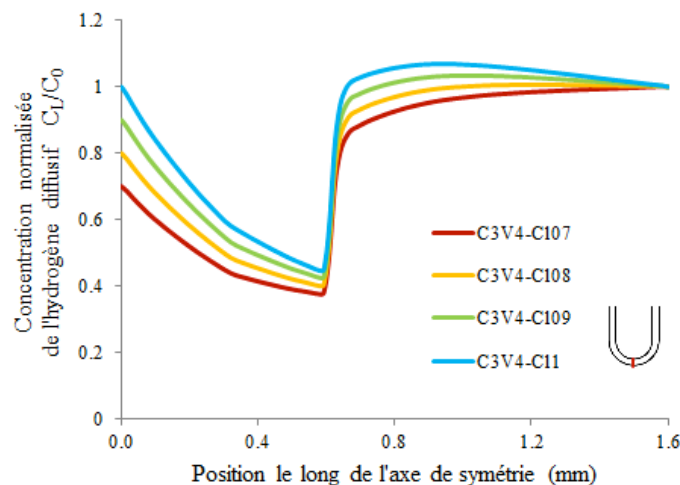
Le matériau utilisé est la même que celui décrit dans la section IV.4.b, avec une loi d'érouissage de Voce ( $R_{\text{sat}}=300$  MPa et  $C=4$ ). Tous les résultats sont présentés en régime permanent.

Pour cette série de simulations, on obtient le même champ mécanique que dans le calcul C-V4-1 présenté dans la section précédente. Les figures IV.4.18 et IV.4.19 présentent la concentration en hydrogène diffusif et en hydrogène piégé pour les quatre calculs.



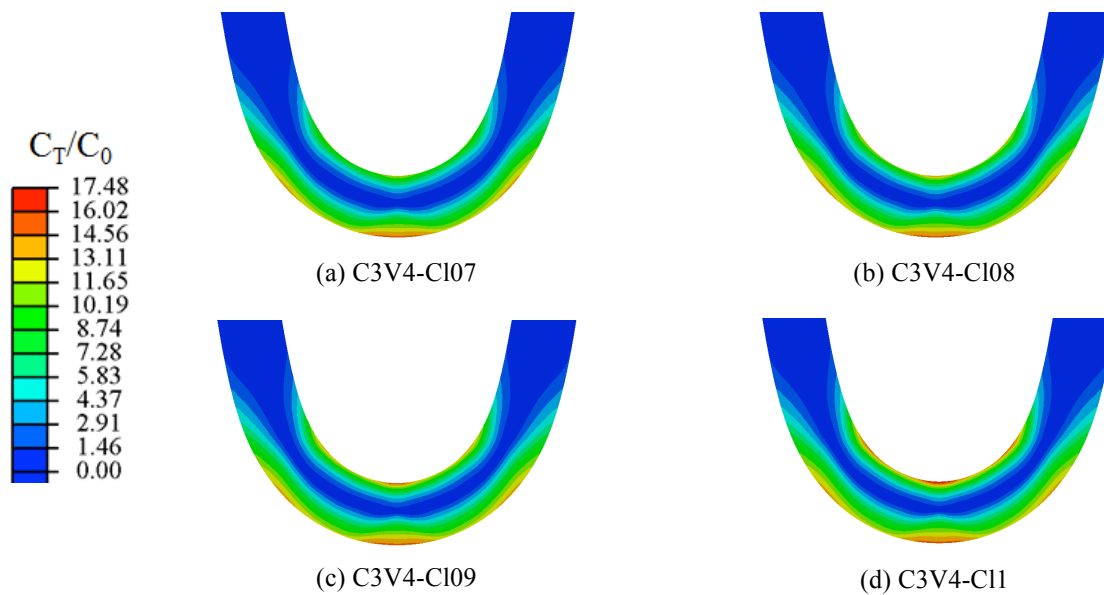
**Figure IV.4.18.** Concentration normalisée en hydrogène diffusif pour différentes conditions aux limites en hydrogène.

Dans la figure IV.4.18, les 2 bandes de concentration (sur-concentration et sous-concentration) en hydrogène diffusif correspondent dans tous les calculs, à une zone en « compression » ( $P_H$  positif) et une zone en « traction » ( $P_H$  négatif). On remarque cependant que la diminution de la valeur de la condition limite en hydrogène sur le bord interne du U diminue également les valeurs maximales de la répartition d'hydrogène dans la partie en traction. Ces résultats sont illustrés par la figure IV.4.19, qui montre la variation de la concentration en hydrogène diffusif le long de l'axe de symétrie pour les quatre calculs.



**Figure IV.4.19.** Variation de la concentration normalisée d'hydrogène diffusif  $C_L/C_0$  le long de l'axe de symétrie (0 correspond au bord interne du U).

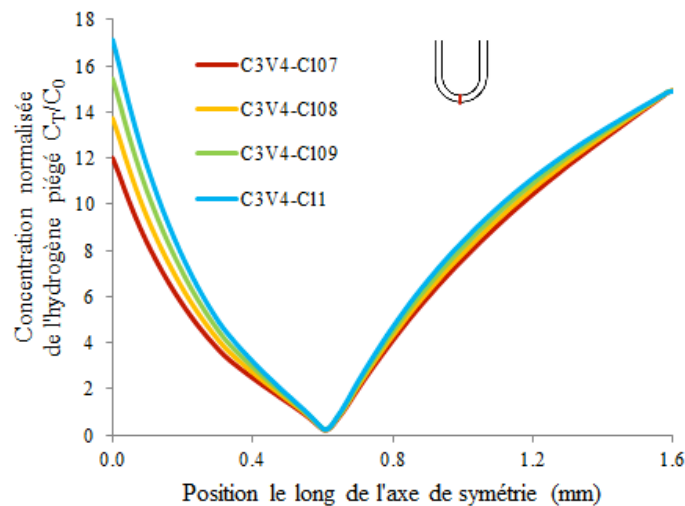
Près du bord interne du U, les profils de concentration présentent le même profil, avec des valeurs moins importantes que pour le calcul C3V4-C11. Au voisinage du bord externe, la concentration évolue progressivement avec les conditions aux limites sur le bord interne pour atteindre une valeur maximale dans le calcul et C3V4-C11.



**Figure IV.4.20.** Concentration normalisée en hydrogène piégé pour différentes conditions limites en hydrogène.

La distribution de concentration d'hydrogène piégé (figure IV.4.20), est faiblement modifiée en dehors du bord interne du U, où la condition limite imposée est modifiée. La concentration d'hydrogène piégé est alors maximale sur le bord externe dans les calculs C3V4-CI07 et C3V4-CI08, alors que dans les calculs C3V4-CI09 et C3V4-CI11, la concentration de l'hydrogène piégé est maximum à la fois sur les bords interne et externe.

Le profil de concentration en hydrogène piégé le long de l'axe de symétrie est tracé sur la figure IV.4.21 pour les 4 conditions aux limites.



**Figure IV.4.21.** Variation de la concentration normalisée d'hydrogène piégé  $C_T/C_0$  le long de l'axe symétrique (0 correspond au bord interne du U).

On constate que la variation de la condition limite en hydrogène sur le bord interne influence très peu la répartition en hydrogène piégé dans la partie en traction de la tôle ( $P_H$  négatif). Dans la partie en compression ( $P_H$  positif), la variation de  $C_T/C_0$  est un peu plus marquée pour assurer la condition aux limites imposée sur le bord interne, mais reste limitée. Dans le tableau IV.4.5, on donne la quantité totale d'hydrogène absorbée, en régime permanent, pour les différents calculs.

**Tableau IV.4.5.** Quantité d'hydrogène absorbée dans l'échantillon.

Simulation	C3V4-CI07	C3V4-CI08	C3V4-CI09	C3V4-CI11
Quantité totale d'hydrogène absorbé ( $C_0 \cdot \text{mm}^3$ )	91,57	96	100,4	104,49

*IV. 4. d. Influence du lien entre  $C_L$  et  $C_T$ .*

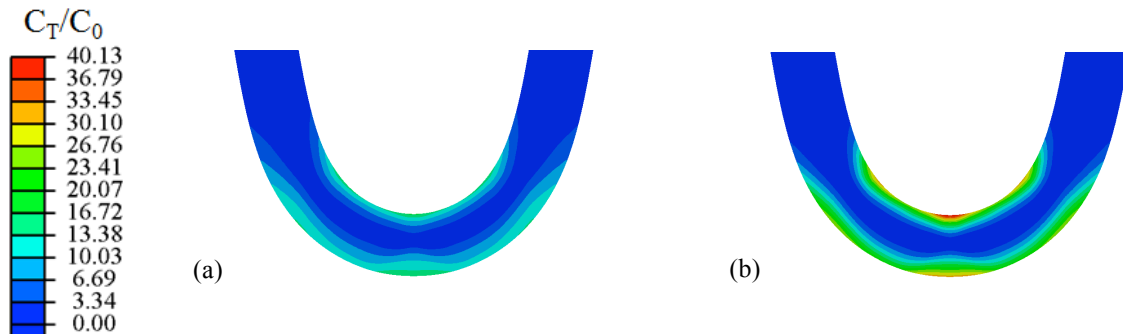
Dans les calculs précédents, le lien entre hydrogène diffusif et hydrogène piégé est donné par la relation d'Olden (équation IV.4.1), basée sur le travail de Taha et Sofronis [7]. Ces auteurs, à partir de la relation proposée par Oriani [8], ont établi que la relation entre les concentrations d'hydrogène diffusif et d'hydrogène piégé peut s'écrire :

$$C_T = \frac{N_T(\bar{\epsilon}_p)K_T C_L}{K_T C_L + N_L}. \quad (\text{IV.4.5})$$

Afin de comparer cette formulation avec celle utilisée jusqu'à présent, elle a été implémentée dans la procédure UMATHT-G. Les paramètres  $N_T$ ,  $K_T$ ,  $N_L$  ont les mêmes valeurs que dans la section III.2.b [5]. Ces deux calculs sont notés C-V4-O (équation IV.4.5) et C-V4-1 (IV.4.1).

Pour les deux calculs, les conditions limites sont décrits dans la section IV.4.b avec une loi d'érouissage de Voce ( $R_{\text{sat}}=300$  MPa et  $C=4$ ). Les champs mécaniques et la répartition en hydrogène diffusif sont ceux du calcul C-V4-1 présenté dans la section IV.4.b. Sur la figure IV.4.22 est donnée la carte de la concentration d'hydrogène piégé pour les deux calculs.

On remarque que cette concentration est environ deux fois plus importante dans le calcul C-V4-O que dans le calcul C-V4-1, ce qui est confirmé par la figure IV.4.21, où la variation de  $C_T/C_0$  est tracée le long de l'axe de symétrie du U.



**Figure IV.4.22.** Concentration d'hydrogène piégé pour les calculs (a) C-V4-1 et (b) C-V4-O.

On remarque que la formulation d'Oriani a tendance à moins localiser l'hydrogène piégé au voisinage de l'axe de symétrie. Cet effet est sans doute dû à l'aspect saturant de cette formulation pour les fortes valeurs de  $C_L$  et  $\bar{\epsilon}_p$ .

*IV. 4. e. Conclusion*

Les simulations présentées ont montré l'influence de différents paramètres sur le profil de la concentration de l'hydrogène. La dimension  $R$  du rouleau central et la loi d'érouissage du matériau influence la distribution de déformation plastique dans l'échantillon, ce qui est directement lié à la concentration de l'hydrogène piégé.

Plus R augmente, moins la concentration en hydrogène piégé est grande et donc, moins l'hydrogène est absorbé dans l'échantillon. Il en est de même lorsque l'écroutissage (contrainte d'écoulement) augmente.

Cependant, la quantité d'hydrogène absorbée dépend également de paramètres difficilement quantifiables, comme les conditions aux limites, ou la relation entre  $C_T$  et  $C_L$ . L'étude paramétrique sur les conditions aux limites a montré que les modifications en hydrogène total n'étaient pas très importantes lorsque les conditions aux limites à l'intérieur du U évoluaient. Par contre, sa répartition semble être grandement influencée par le lien  $C_T-C_L$ .

Dans le chapitre suivant, le domaine d'application de l'implémentation de l'équation de diffusion couplée est étendu au cas d'un agrégat polycristallin tridimensionnel.

## ***Bibliographie***

- [1] Y. Toji, et al., *Evaluation of Hydrogen Embrittlement for High Strength Steel Sheets*. Materials Science Forum, 2009. **638-642**: p. 3537-3542.
- [2] ASTM, *Standard Practice for Making and Using Stress-Corrosion Test Specimen*, in G30-97. 2003.
- [3] A. Bouétard, *Rapport de stage, LSPM*. 2013.
- [4] A.B. Hadzipasic, J. Malina, et M. Malina, *The Influence of Microstructure on Hydrogen Diffusion and Embrittlement of Multiphase Fine-Grained Steels with Increased Plasticity and Strength*. Chem. Biochem. Eng. **25(2)**: p. 159-169.
- [5] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47(4)**: p. 971-992.
- [6] V. Olden, et al., *Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25%Cr duplex stainless steel – Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements*. Engineering Fracture Mechanics, 2009. **76(7)**: p. 827-844.
- [7] A. Taha, Sofronis, P., *A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement*. Engineering Fracture Mechanics, 2001. **68(6)**: p. 803-837.
- [8] R.A. Oriani, *The diffusion and trapping of hydrogen in steel*. Acta Metallurgica, 1970. **18(1)**: p. 147-157.

## V. Interaction hydrogène-plasticité dans un polycristal.

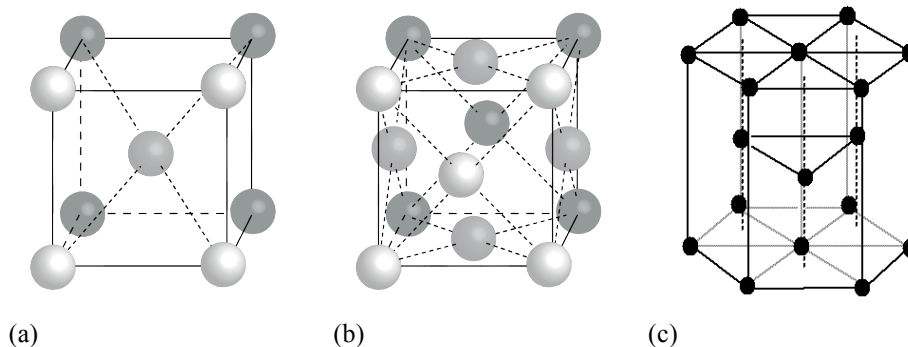
Dans les structures métalliques, la nature polycristalline du matériau est une source d'hétérogénéités pour les champs mécaniques, en raison de l'anisotropie de comportement local (élasticité et (visco)plasticité), sensible à l'orientation cristalline. Dans un contexte de couplage entre la diffusion de l'hydrogène et la déformation plastique, la prise en compte de l'anisotropie d'origine cristalline est susceptible d'influencer la répartition spatiale des populations d'hydrogène diffusifs et piégés, et leur évolution avec le temps.

On se restreint ici à l'adaptation à l'élasto(visco)plasticité cristalline de la formulation du couplage diffusion-champ mécanique (équation I.2.19), dont l'expression à l'échelle du cristal mériterait des approfondissements tant théoriques qu'expérimentaux qui sortent du cadre de ce travail.

Les outils numériques développés dans les chapitres précédents sont adaptés et appliqués ici à des structures polycristallines, nécessitant la prise en compte de géométries particulières et de lois de comportement du monocristal. L'extension de ce couplage mécanique-diffusion est ensuite appliquée au cas du pliage en U, en appliquant à un VER polycristallin les conditions de chargement issu du calcul global 3D.

### V. 1. Comportement d'un monocristal

Un matériau cristallin se caractérise par un arrangement périodique des atomes selon une structure cristallographique, définie par sa maille élémentaire. Dans le cas des matériaux métalliques usuels, les structures cristallographiques les plus courantes sont la structure cubique centrée c.c (ex : Fe- $\alpha$ , Nb, Mo,...) (figure IV.1.1a), la structure cubique à faces centrées c.f.c (ex : Al, Ni, Cu, Fe- $\gamma$ ....) (figure IV.1.1b), ou encore la structure hexagonale compacte h.c (Ti, Zr, Mg,...) (figure IV.1.1c).



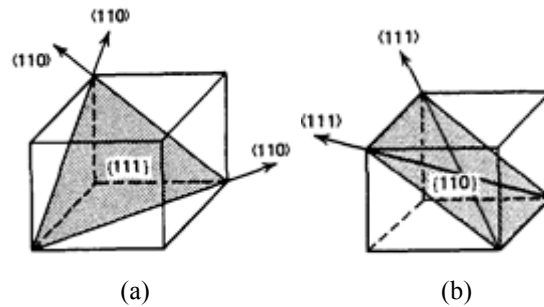
**Figure V.1.1.** Type de structures cristallines classiques dans les matériaux métalliques usuels : (a) cubique centré, (b) cubique face centré et (c) hexagonale compacte.

#### V. 1. a. Notions sur la plasticité cristalline

On se place dans le cas des cristaux dont la déformation plastique est due au glissement des dislocations, dans les directions denses de plans denses de la structure cristalline, qui constituent les « systèmes de glissement ». Chaque système de glissement ( $\alpha$ ) est défini par un plan de glissement (normal à un vecteur  $n^\alpha$ ) et une direction de glissement dans ce plan (dans la direction du vecteur  $m^\alpha$ ). Dans ce qui suit, les symboles  $\{ \}$  et  $\langle \rangle$  indiquent respectivement les plans et les directions d'une même famille. La figure V.1.2 illustre les systèmes de glissement facile  $\{111\}\langle 1-10 \rangle$  de la structure cfc et  $\{1-10\}\langle 111 \rangle$  de la structure cc.



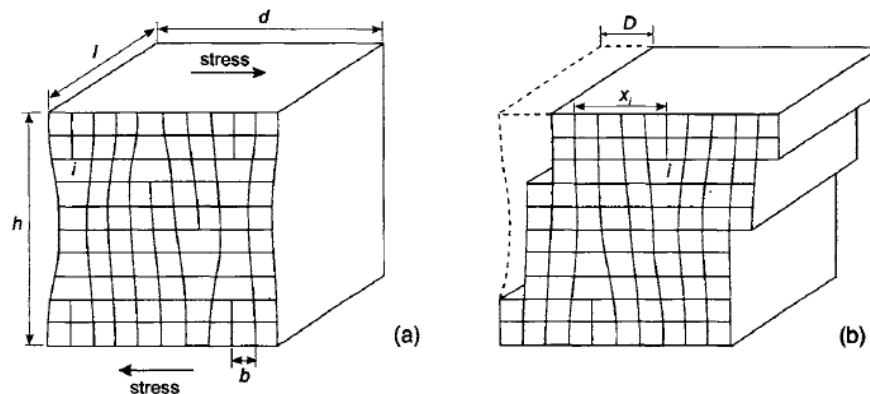
Dans les deux cas, le nombre total de systèmes est égal à 12 si les deux sens de glissement sont autorisés par système : 3 directions  $\langle 110 \rangle$  dans chacun des 4 plans  $\{111\}$ , ou 2 directions  $\langle 111 \rangle$  dans chacun des 6 plans  $\{110\}$ . Si les deux sens de glissements ne sont pas équivalents, le nombre de système de glissement est de 24.



**Figure V.1.2.** (a) Plan de glissement (111) et directions de glissement  $\langle 110 \rangle$  dans ce plan. (b) Plans de glissement (110) et directions de glissement  $\langle 111 \rangle$  dans ce plan.

Le mouvement collectif des dislocations sur un système de glissement conduit à l'échelle mésoscopique à la notion de « glissement plastique »  $\gamma$  qui permet de décrire la déformation du cristal dans le cadre de la mécanique des milieux continus : dans un cristal de volume  $h \times l \times d$  (voir figure V.1.3), le déplacement d'une dislocation d'une longueur  $l$  à travers le plan de glissement contribue d'une valeur  $b$  (la longueur de vecteur de Burgers [1]) au déplacement total  $D$ . Si il y a  $N$  dislocations qui se déplacent d'une valeur  $x_i$   $_{i=1, \dots, N}$ , alors le glissement plastique  $\gamma$  total est donné par [1] :

$$\gamma = \frac{D}{h} = \frac{b}{hd} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (\text{V.1.1})$$



**Figure V.1.3.** (a) Dislocations coin soumises à une cission résolue et (b) déplacement total  $D$  causé par le glissement de  $N$  dislocations. La dislocation  $i$  s'est déplacé de  $x_i$  [1].

Si l'on introduit la densité de dislocation  $\rho$  (la longueur totale de dislocations par unité de volume) telle que  $\rho = (Nl/hld)$ , l'équation V.1.1 devient

$$\gamma = b\rho\bar{x} \text{ avec } \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (\text{V.1.2})$$

Pour les cristaux obéissant à une loi de cission réduite critique (loi de Schmid), la plasticité sur un système de glissement ( $\alpha$ ) se produit lorsque la cission résolue  $\tau^\alpha$  sur ce système

atteint une valeur critique caractéristique de l'état du matériau, et qui augmente au cours de la déformation plastique à cause de l'écroutissage. La cission résolue  $\tau^\alpha$  est telle que

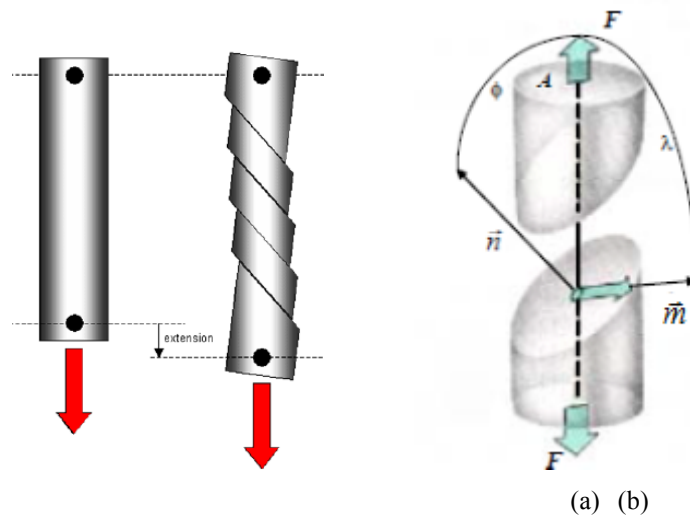
$$\tau^\alpha = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha + \mathbf{n}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) : \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{V.1.3})$$

où  $\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes local et  $\otimes$  symbolise le produit tensoriel.

Dans le cas d'un barreau de section droite A soumis à une force de traction F conduisant à une contrainte de traction homogène F/A, la cission résolue sur le système de glissement défini par les angles  $\phi$  et  $\lambda$  (figure V.1.4.a) que font respectivement la normale au plan de glissement et la direction de glissement avec l'axe de traction s'écrit

$$\tau = \frac{F}{A} \cos \lambda \cos \phi. \quad (\text{V.1.4})$$

Le coefficient géométrique  $\cos \lambda \cos \phi$  s'appelle le facteur de Schmid du système de glissement considéré, sa valeur maximale est 0.5.



**Figure V.1.4.** Mode de déformation par glissement dans un monocristal en traction : (a) schéma de principe et (b) repérage du plan de glissement  $\mathbf{n}$  et de la direction de glissement  $\mathbf{m}$  par rapport à l'axe de traction. [2]

### V. 1. b. Loi de comportement du monocristal

L'anisotropie élastique du cristal est prise en compte par les valeurs des coefficients de la matrice d'élasticité  $\mathbf{C}$ , telle que  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$ , où  $\mathbf{C}$  représente le tenseur d'élasticité du cristal. Dans le cas de la symétrie cubique, 3 coefficients indépendants suffisent pour caractériser l'élasticité anisotrope, notés  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  en notation de Voigt.

La plasticité cristalline est basée sur la loi de Schmid pour les systèmes de glissement facile considérés. Elle nécessite de définir les relations entre le taux de glissement  $\dot{\gamma}^\alpha$  sur un système ( $\alpha$ ), et la cission résolue  $\tau^\alpha$ . En adoptant une formulation viscoplastique (permettant la régularisation des équations de la plasticité indépendante du temps, à condition que la sensibilité à la vitesse introduite soit très faible) de type loi puissance entre vitesse de glissement et cission résolue, on peut écrire [3,4]

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{a} \left( \frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}} \right) \left| \frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}} \right|^{n-1}. \quad (\text{V.1.5})$$

$\dot{a}$  est une vitesse de glissement de référence arbitraire,  $n$  est un paramètre qui caractérise une sensibilité à la vitesse de déformation (qui doit être suffisamment grand pour approximer la plasticité insensible à la vitesse de chargement), et  $g^{\alpha}$  est la cission critique sur le système  $\alpha$ . L'évolution de  $g^{\alpha}$  qui définit l'écroissage est décrite ici par [3]

$$\dot{g}^{\alpha} = \sum_{\substack{\text{système de} \\ \text{glissement } \beta}} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{\beta}, \quad (\text{V.1.6})$$

où  $h_{\alpha\alpha}$  et  $h_{\alpha\beta, \alpha \neq \beta}$  représentent respectivement les modules d'auto-écroissage et d'écroissage latent :

$$h_{\alpha\beta, \alpha \neq \beta} = q h_{\alpha\alpha} \quad \text{et} \quad h_{\alpha\alpha} = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right|. \quad (\text{V.1.7})$$

$h_0$ ,  $\tau_0$  et  $\tau_s$  sont respectivement le module d'écroissage initial, la cission résolue initiale et à saturation [5] ;  $\gamma$  représente le glissement cumulé sur tous les systèmes de glissement

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_t |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt. \quad (\text{V.1.8})$$

### V.1.c. Paramètres mécaniques

Dans la suite de ce chapitre, en vue d'applications expérimentales futures, on considère un polycristal composé de Fer- $\alpha$ . La structure cristalline est de type cc. Les valeurs des constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  sont données dans le tableau V.1.1 [6].

**Tableau V.1.1.** Paramètres élastiques du matériau.

$C_{11}$ (MPa)	$C_{12}$ (MPa)	$C_{44}$ (MPa)
236900	140600	116000

On se restreint aux 12 systèmes de glissement de type  $\{110\}\langle 111 \rangle$  [7]. Les paramètres d'écroissage utilisés, dont les ordres de grandeur sont compatibles avec le comportement en traction de monocristaux de Fer- $\alpha$  [8], sont reportés dans le tableau IV.1.2.

**Tableau V.1.2** Paramètres d'écroissage identifiés pour le Fer  $\alpha$ .

$\tau_0$ (MPa)	$\tau_s$ (MPa)	$h_0$ (MPa)	$n$	$\dot{a}$ ( $s^{-1}$ )	$q$
30	100	175	20	0,001	1,1

La prise en compte d'un tel comportement dans le code Abaqus a nécessité la modification d'une procédure UMAT, qui avait été développée initialement par Huang [9]. En particulier, le schéma de calcul du gradient de la pression hydrostatique a été introduit pour des maillages 3D, en considérant des éléments à 8 nœuds tri-linéaires et à intégration complète. L'UMAT a

également été intégrée aux autres procédures utilisateurs (voir le chapitre 2, section II.3) pour permettre la modélisation du problème de diffusion couplée.

Le comportement cristallin est défini dans le repère de la maille cristalline élémentaire [100], [010], [001] de chaque cristal, dont l'orientation dans le repère macroscopique global est imposée par une procédure utilisateur ORIENT [10]. Un polycristal de texture isotrope est obtenue par la génération aléatoire des angles d'Euler ( $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ ) qui définissent l'orientation des axes de la maille cristalline élémentaire dans le repère global (de l'échantillon).

#### V. 1. d. Paramètres de diffusion

Les paramètres de l'équation diffusion de l'hydrogène dans le Fe- $\alpha$  polycristallin (équation I.2.19) sont issus de la littérature [11,12], et donnés dans le tableau V.1.3.

**Tableau V.1.3** Paramètres de diffusion de l'hydrogène pour Fe- $\alpha$  [11,12].

$D_L$ (m <sup>2</sup> /s)	$V_H$ (m <sup>3</sup> /mol)	$N_L$ (atomes/m <sup>3</sup> )
0,0127x10 <sup>-6</sup>	2x10 <sup>-6</sup>	5,1x10 <sup>29</sup>

## V. 2. Définition d'un VER

### V. 2. a. Définition d'un VER

Afin de pouvoir assurer une transition d'échelle cohérente entre les calculs globaux et les calculs sur polycristal, il faut que le comportement mécanique macroscopique dans le calcul global soit identique au comportement moyen du polycristal. Dans ce but, le comportement moyen d'un agrégat polycristallin, composé de grains de Fe- $\alpha$  ayant le comportement donné au paragraphe V.1 a été identifié, ce qui nécessite d'abord de définir les caractéristiques d'un VER.

#### i. Définition du volume élémentaire représentatif (VER)

Hill [18] dans une étude sur l'élasticité de composites a défini qu'un VER est un volume qui contient d'assez d'inclusions pour que le module effectif total du matériau soit indépendant de la traction et du déplacement imposés sur ses surfaces (à condition que ce chargement soient macroscopiquement uniforme). On peut comprendre ce « macroscopiquement uniforme » par le fait que le chargement varie autour d'une valeur moyenne avec une amplitude négligeable par rapport aux dimensions du VER. Drugan [19] évoque dans son étude une définition du VER en reconnaissant la nature statistique de la microstructure du matériau : le VER doit être suffisamment grand pour représenter la microstructure du matériau. Il doit alors contenir l'échantillonnage de toutes les configurations microstructurales possibles dans la microstructure du matériau. Hashin [20] se base sur l'homogénéité statistique du VER dans le matériau, c'est à dire que les champs comme la contrainte, la déformation d'un VER sont statistiquement homogènes (leurs moments statistiques comme la moyenne, la variance sont identiques pour différents VERs dans un corps hétérogène du matériau). La moyenne d'un champ sur un VER est aussi la moyenne sur le corps hétérogène du matériau. Le VER est alors utilisé pour déterminer les propriétés effectives pour un volume du matériau homogénéisé.

## ii. Définition des caractéristiques du VER en élément finis

Différents paramètres influent sur le comportement moyen d'un polycristal déterminé par simulation éléments finis, comme :

- le nombre de grains du polycristal ;
- le nombre d'éléments finis par grain ;
- le type d'élément finis ;
- le type d'intégration dans les éléments finis.

A ces paramètres, s'ajoutent également les conditions aux limites appliquées sur le polycristal. Ces conditions aux limites doivent satisfaire la transition de l'échelle macroscopique à l'échelle du VER : la déformation ou la contrainte macroscopique imposée sur le VER doivent être égaux à la moyenne des déformations microscopiques ou des contraintes microscopiques dans le VER. Pour simuler un VER  $\Omega$ , Hill [21], suivi par Suquet [22], propose deux conditions limites classiques :

- une déformation homogène :  $\underline{u} = \bar{\underline{E}}\underline{x}$  sur frontière externe  $\partial\Omega$  du VER,  $\bar{\underline{E}}$  étant la déformation macroscopique imposé sur l'agrégat ;
- une contrainte homogène :  $\underline{\sigma n} = \underline{\Sigma n}$  sur la frontière  $\partial\Omega$  du VER,  $\underline{\Sigma}$  étant la contrainte macroscopique imposé sur l'agrégat.

Un VER est défini comme étant un polycristal pour lequel le comportement moyen est indépendant des paramètres de discrétisation.

## iii. Détermination du VER

La détermination d'un VER doit toujours être faite avec précaution : il doit être suffisamment large pour contenir assez de grains pour être représentatif macroscopiquement du matériau, mais ne doit pas être trop grand non plus pour des raisons de temps de calcul.

Barbe [13] considère qu'un VER doit contenir assez de grains pour avoir une microstructure représentative, et que chaque grain doit contenir un nombre suffisant de points d'intégration pour obtenir une description raisonnable des variations spatiales de la contrainte et de la déformation. Il a montré que, dans le cas d'un polycristal, 200 grains contenant chacun 661 points d'intégration est une configuration minimale. Ses calculs s'effectuent avec un maillage composé d'éléments hexaédriques à 20 nœuds et 27 points d'intégration.

De leur côté, Diard et al. [23] ont choisi de simuler un polycristal (cas d'un alliage de zirconium Zy-4) composé de 447 grains, discrétisée en  $28^3$ ,  $18^3$  et  $8^2 \times 7$  éléments tétraédriques quadratiques à intégration complète (élément C3D20 dans Abaqus, 27 points d'intégration). Sur la courbe macroscopique contrainte-déformation, ils ont remarqué une très faible différence entre les trois cas de calculs. Ils en ont déduit qu'un maillage grossier, composé d'un seul élément par grain (27 point d'intégration par grain) est suffisant pour prédire le comportement macroscopique.

Pour déterminer la taille optimale d'un polycristal (avec une loi cristalline utilisée pour le cuivre), Salahouelhadj et al. [24] ont considéré un cube composé de  $50^3$  grains (chaque élément représente un grain). A partir de ce cube, différents 'sous-polycristaux' cubiques, composés de  $n^3$  grains sont extraits à des positions variables. Pour chaque valeur de  $n$ , ils ont tracé la dispersion des courbes contrainte moyenne-déformation moyenne pour les sous-polycristaux. Les éléments utilisés sont des hexaèdres linéaires à 8 nœuds. Ils ont remarqué

qu'avec  $n=8$  (512 grains), on a une différence de 2% entre les courbes extrêmes de comportement. Cette différence passe à 1,5% si l'on double le nombre des grains dans le polycristal. Ils en ont déduit que, dans leur cas, un VER doit être composé de 512 grains pour une déformation macroscopique appliquée de 1%.

Des résultats similaires ont été obtenus par Ren et al. [25]. Ils ont supposé qu'en terme de propriétés élastiques macroscopique, il est suffisamment précis de mailler un grain par un élément fini. La taille minimum d'un VER obtenu pour un polycristal de cuivre est de 484 grains.

Nygards et al [26] ont modélisé un polycristal d'un acier biphasé ferrite/perlite composé de seulement 5 grains. La structure périodique de grains est générée utilisant un algorithme de Voronoï. Ils ont montré que ce polycristal, soumis à des conditions aux limites périodiques, suffit pour générer la courbe représentative contrainte-déformation.

#### iv. Eléments finis utilisés

Le type d'élément fini utilisé a aussi une influence sur la courbe moyenne contrainte-déformation de l'agrégat.

En effet, si l'on utilise des éléments hexaédriques, le maillage généré est régulier, mais il ne représente pas bien les joints de grains (si le maillage n'est pas assez fin au joint de grain), ce qui pourrait modifier le champ mécanique au voisinage de ces joints de grain [23]. Un maillage avec des éléments tétraédriques donne une bonne description qui respecte la morphologie de grains, particulièrement pour les joints de grains. Cependant, une attention doit être portée sur le type d'interpolation utilisée pour un élément de géométrie donnée : les éléments tétraédriques linéaires surestiment souvent le comportement moyen d'un VER tandis que l'élément tétraédrique quadratique apporte un comportement moyen raisonnable qui est proche de celui obtenu par un schéma d'homogénéisation [27].

Barbe [13] a montré que les éléments hexaédriques linéaires à 8 nœuds sont trop rigides par rapport à aux éléments hexaédriques quadratiques, ce qui conduit à une courbe contrainte-déformation plus élevée. Il a utilisé ces éléments quadratiques à 20 nœuds pour les calculs de VER.

Salahouelhadj et al. [24] ont utilisé des éléments hexaédriques linéaires à 8 nœuds combinés à 8 points d'intégrations.

Musienko et al. [30] ont utilisé des éléments tétraédriques quadratiques à 10 nœuds et à 6 points d'intégration dans des simulations de polycristaux de cuivre dont la microstructure est issue d'une morphologie réelle. 2 maillages ont été générés : l'un composé de 21818 éléments et 94 grains (232 éléments par grain), et l'autre composé de 92927 éléments et 104 grains (environ 893 éléments par grain). Le comportement du matériau est obtenu par une procédure d'identification basée sur le schéma d'homogénéisation de Berveiller et Zaoui [27]. Le comportement moyen contrainte-déformation calculés est le même pour les deux maillages.

Enfin, Diard et al. [23] ont comparé les résultats obtenus sur un polycristal de 100 grains, discrétisé d'une part avec un maillage régulier (composé d'éléments hexaédriques quadratiques) et d'autre part avec un maillage non régulier (d'éléments tétraédriques quadratiques). Les courbes contraintes-déformation moyenne obtenues dans les deux cas sont presque identiques.

**Tableau V.2.1** Synthèse des travaux de définition de VER.

	Matériau et loi de comportement	Nombre de grains dans le VER	Nombre d'éléments par grains	EF	Nombre de Point d'intégration par grain
Barbe [13]	CFC (loi d'écroutissage Cailletaud [28])	200	Env. 25	C3D20	661
Diard [23]	Zy-4 (loi d'écroutissage Cailletaud [28])	447	1	C3D20	27
Salahouelhadj et al. [24]	Cuivre (loi d'écroutissage Kalidindi [29])	512	1	C3D8	8
Ren [25]	Cuivre (élasticité)	484	1	CPS4	4
Nygards et al [26]	Acier biphasé ferrite/perlite (Elasticité)	5	71652	C3D10	57249

Les divers travaux portant sur la définition d'un VER sont résumés dans le tableau V.2.1. Dans ce tableau, on désigne par CPS4, C3D8, C3D20 respectivement les éléments linéaire à 4 nœuds (contrainte plane, intégration complète), les éléments hexaédriques linéaires à 8 nœuds (intégration complète) et les éléments hexaédriques quadratiques à 20 nœuds (intégration complète).

En conclusion, on remarque dans la littérature, la construction d'un VER par éléments finis n'est pas unique. Le nombre de grains (pouvant aller de 200 à 500) et le type de maillage varient fortement selon les auteurs, selon le type de problème traité et les objectifs du calcul, et résultent souvent de compromis précision/moyens de calcul.

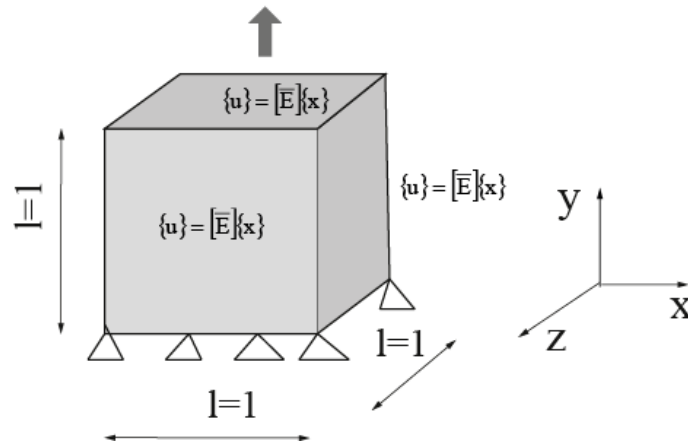
#### *V. 2. b. Identification du comportement moyen d'un VER*

Pour déterminer un agrégat dont le comportement macroscopique est représentatif du matériau polycristallin considéré dans cette étude, plusieurs simulations ont été faites en s'inspirant du paragraphe précédent et en tenant compte

- de la morphologie et des orientations de l'agrégat (nombre de grains) ;
- du nombre d'éléments par grains ;
- du type d'éléments.

##### i. Conditions aux limites et maillage

Le VER, un cube de  $l=1$  mm de côté, est soumis d'une part à un déplacement imposé sur une face  $U=0,3$  mm dans la direction Y (soit 30% d'allongement relatif macroscopique dans cette direction), et sur la surface opposée à des conditions de symétrie (voir figure V.2.1).



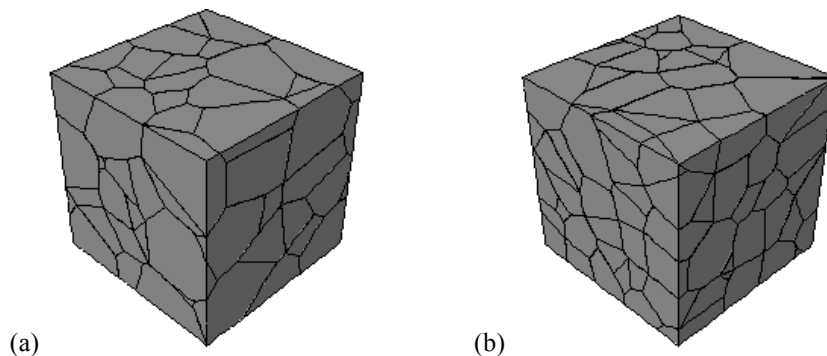
**Figure V.2.1.** Condition limites imposée au VER.

Pour les surfaces latérales, les conditions aux limites en déformation homogène sont utilisées (dans Abaqus, cela revient à définir des ‘equations constraint’ [31], soit des équations entre les degrés de liberté des nœuds en vis à vis sur deux faces du cube, définies automatiquement grâce à un script Python) [32]. Ici, le VER est supposé en traction simple dans la direction Y. Il est donc soumis à un tenseur de déformation macroscopique  $\bar{\mathbf{E}}$  tel que

$$\bar{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} -\nu\bar{E}_{22} & 0 & 0 \\ 0 & U/l & 0 \\ 0 & 0 & -\nu\bar{E}_{22} \end{bmatrix} \text{ en élasticité isotrope,}$$

$$\bar{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} -0,5\bar{E}_{22} & 0 & 0 \\ 0 & U/l & 0 \\ 0 & 0 & -0,5\bar{E}_{22} \end{bmatrix} \text{ en plasticité isotrope.}$$

$\nu$  est ici le coefficient de Poisson du matériau homogénéisé.



**Figure V.2.2.** Exemple d’agrégat composé de (a) 100 grains et (b) 200 grains.

Des agrégats de 50, 100, 200 et 300 grains ont été générés en utilisant une partition de Voronoi [13]. Ces partitions sont générées par le programme Neper [14]. Ce programme crée également un fichier d’entrée Abaqus (\*.inp), qui est alors importé puis traité dans Abaqus CAE grâce à l’écriture de procédures en Python (figure V.2.2). Plusieurs types d’éléments ont été étudiés : les éléments tétraédriques quadratiques (C3D10) et linéaires (C3D4) et des



éléments hexaédriques à 8 nœuds trilineaires à intégration complète (C3D8) et réduite (C3D8R).

Dans un premier temps, on considère seize discrétisations différentes du polycristal. Les agrégats composés de 50, 100, 200 et 300 grains sont maillés avec des éléments C3D10, avec quatre niveaux de raffinement moyen :

- 200 points d'intégrations (PI) par grains (soit 50 éléments par grain en moyenne).
- 340 points d'intégrations par grains (soit 85 éléments par grain en moyenne) ;
- 596 points d'intégrations par grains (soit 149 éléments par grain en moyenne) ;
- 1037 points d'intégrations par grains (soit 259 éléments par grain en moyenne) ;

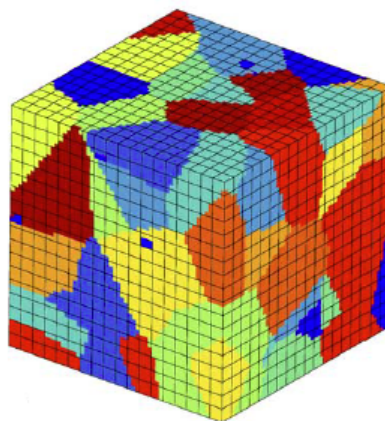
Ensuite, pour étudier l'influence de type d'élément sur le comportement moyen, on considère trois nombres d'éléments différents pour le polycristal composé de 50 grains, maillés avec des éléments C3D4, C3D8 et C3D8R. Ces trois maillages ont par contre le même nombre de points d'intégration moyen par grain, égal à 340.

Au total 19 simulations ont été effectuées, qui correspondent à 19 discrétisations différentes du volume cubique ; elles sont résumées dans le tableau V.2.2.

**Tableau V.2.2** Les différentes discrétisations du polycristal.

	596 PI	1037 PI	200 PI	340 PI
50 grains	C3D10			C3D10, C3D4, C3D8, C3D8R
100 grains				C3D10
200 grains				
300 grains				

Dans ce qui suit, ces simulations seront désignées par n-m-Element, où n et m représentent respectivement le nombre de grains du polycristal et le nombre moyen de points d'intégration par grain (par exemple, 50-596-C3D10 pour un polycristal de 50 grains, maillés avec des éléments C3D10, avec en moyenne 596 points d'intégration par grain).

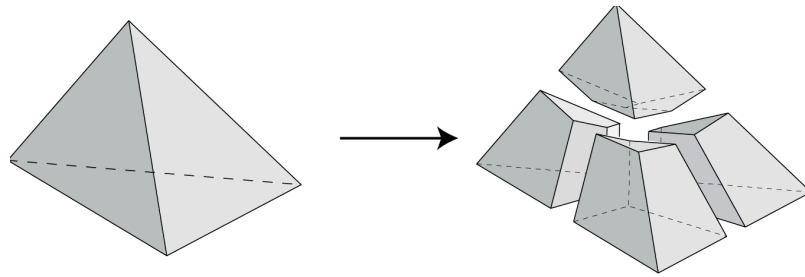


**Figure V.2.3.** Maillage régulier [23].

Le programme Neper crée par défaut un maillage tétraédrique. Ce programme peut également générer des maillages hexaédriques réguliers, ce qui ne donne pas la bonne description d'hétérogénéités intergranulaires si la discrétisation du maillage n'est pas assez fine (figure V.2.3).

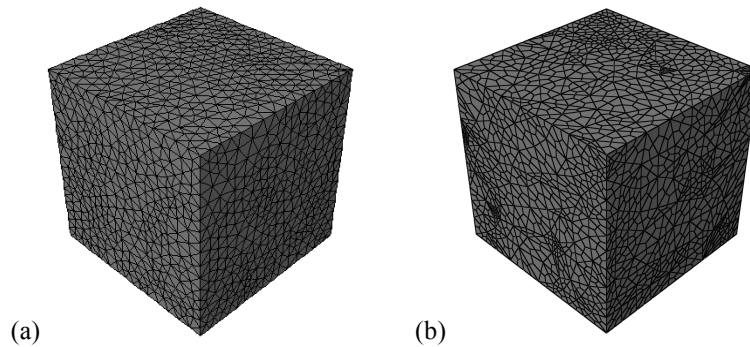
Ce maillage ne peut être créé directement par Abaqus, qui ne génère que des maillages hexaédriques réguliers. Une procédure Python spécifique a alors été écrite pour transformer un maillage tétraédrique irrégulier à quatre nœuds (créé par l'interface d'Abaqus) en un maillage hexaédrique à huit nœuds. Le schéma de cette transformation est donné sur la figure V.2.4. Cette transformation est nécessaire car

- la procédure numérique de couplage mécanique-diffusion (section II.5) n'a été développée que pour des éléments hexaédriques ;
- les tétraèdres sont mieux adaptés que les hexaèdres réguliers, au sens du rapport précision/nb d'éléments et temps de calcul, à la modélisation des interfaces (joints de grains) de la structure polycristalline.



**Figure V.2.4.** Principe de création d'un maillage hexaédrique à partir d'un maillage tétraédrique.

Le résultat de cette transformation est présenté figure V.2.5, pour un agrégat de 200 grains.



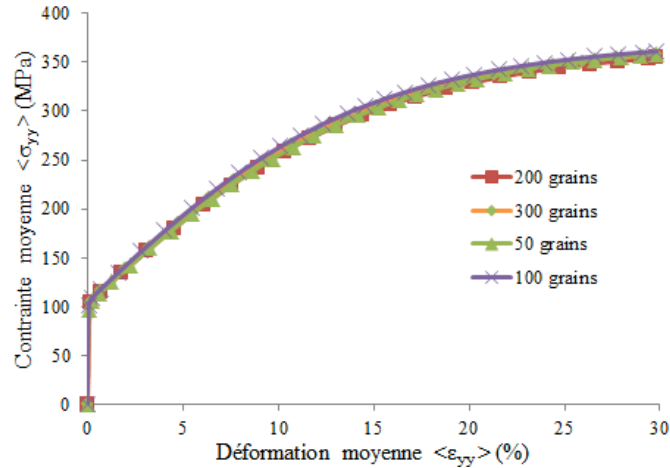
**Figure V.2.5.** (a) Maillage tétraédrique composé de 200 grains, et 600 point d'intégration par grain, et (b) maillage hexaédrique composé de 200 grains avec 1037 point d'intégration par grain.

La courbe globale contrainte moyenne-déformation moyenne est ensuite calculée grâce à une procédure en Python [33] : les valeurs des contraintes et des déformations, calculée à chaque point d'intégration sont récupérées, de même que le volume associé à ce point d'intégration (sortie Abaqus standard IVOL). Ces valeurs permettent d'obtenir la contrainte moyenne et la déformation moyenne :

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{k \in \{\text{pt Gauss}\}} V_k \varepsilon_{ij}^k \quad \text{avec} \quad V = \sum_{k \in \{\text{pt Gauss}\}} V_k \quad \text{volume total de l'éprouvette} \quad (\text{V.2.1})$$

## ii. Résultats

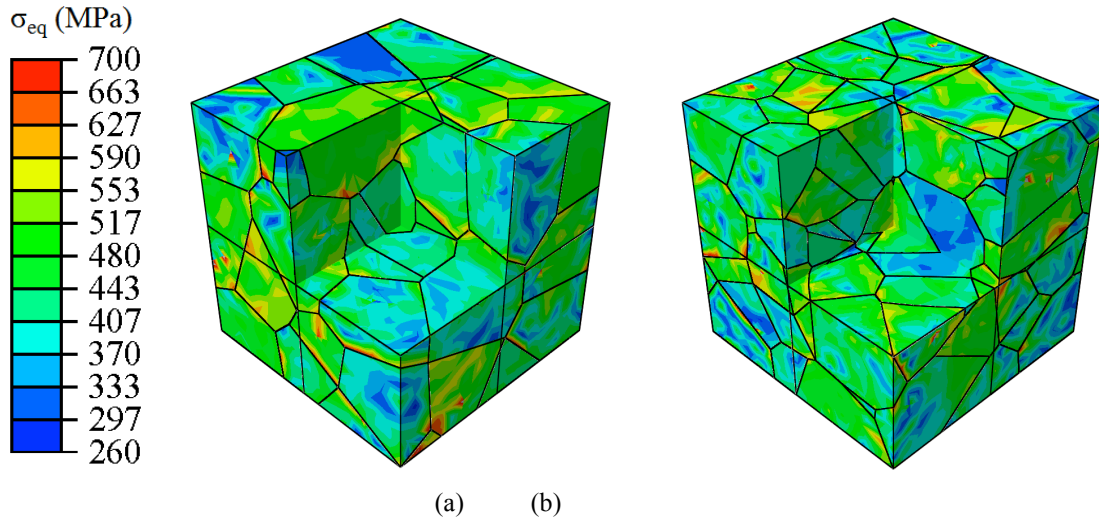
L'influence de la microstructure de l'agrégat (le nombre de grains) est montrée sur la figure V.2.6., où sont tracées les courbes contrainte moyenne  $\langle \sigma_{yy} \rangle$ -déformation moyenne  $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$  dans la direction de traction pour les polycristaux composé de 50, 100, 150 et 200 grains (simulations 50-340-C3D10, 100-340-C3D10, 150-340-C3D10, 200-340-C3D10).



**Figure V.2.6.** Influence du nombre de grain (149 éléments par grains en moyenne) sur la courbe moyenne contrainte-déformation.

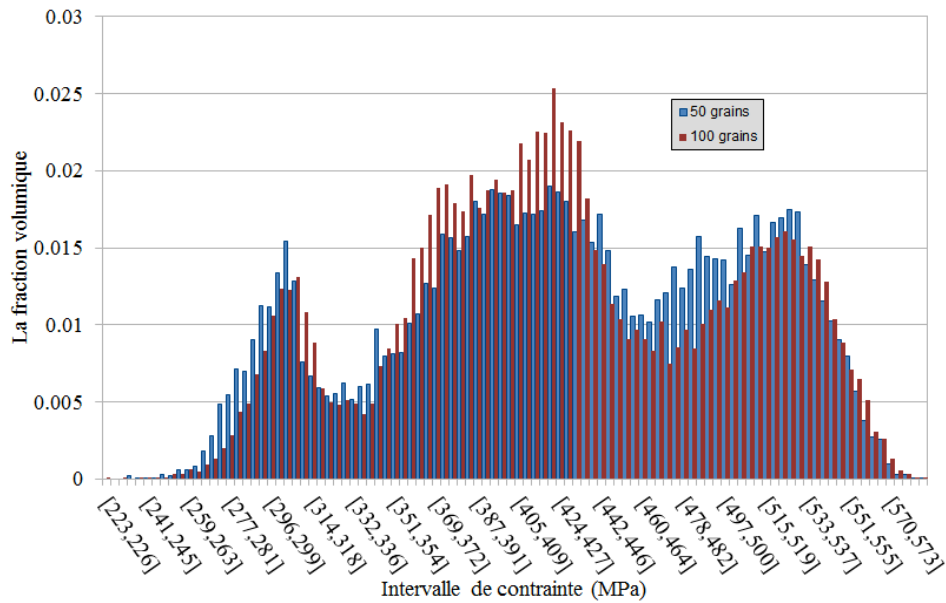
On remarque de très petites différences entre les courbes  $\langle \sigma_{yy} \rangle$ - $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$  pour les différents agrégats. Ce résultat permet de considérer que 50 grains suffisent pour représenter la microstructure du VER, si chaque grain est maillé avec en moyenne 149 éléments tétraédriques quadratiques C3D10.

Sur la figure V.2.7, on a représenté le champ de contrainte équivalente de von Mises pour des agrégats de 50 et 100 grains.



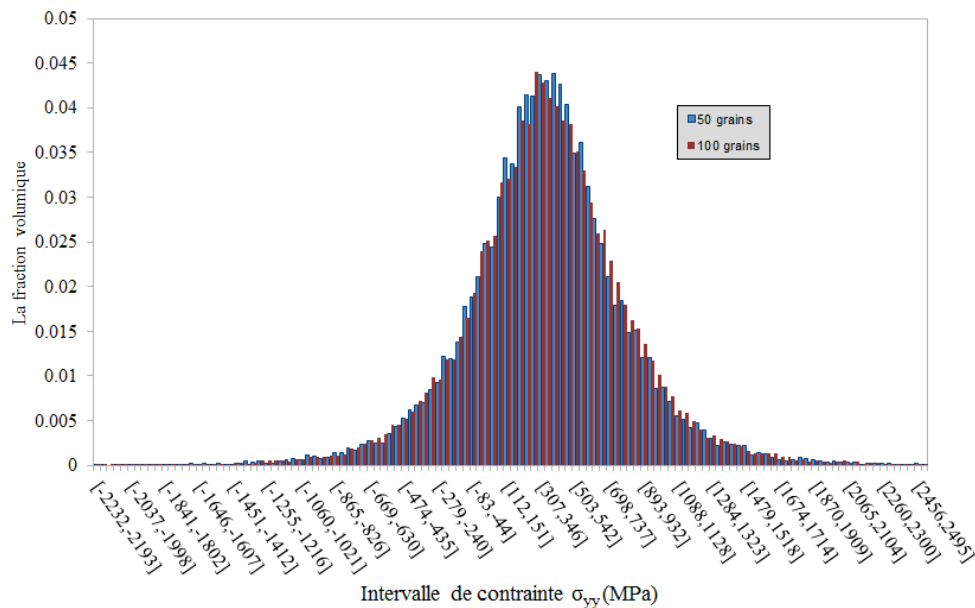
**Figure V.2.7.** Contrainte de von Mises pour les agrégats composé de (a) 50 grains (85 éléments finis C3D10 à intégration complète en moyenne par grains), et (b) 100 grains (85 éléments finis C3D10 à intégration complète en moyenne par grains). La déformation macroscopique est de 30 %. 1/8 du volume des agrégats a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal.

Dans cette figure, on constate que les deux calculs donnent des résultats très voisins en terme de niveau de contrainte, d'étendue spatiale des hétérogénéités, ainsi que d'existence de grains plus faiblement chargés, probablement liées aux différences d'orientations cristallines.



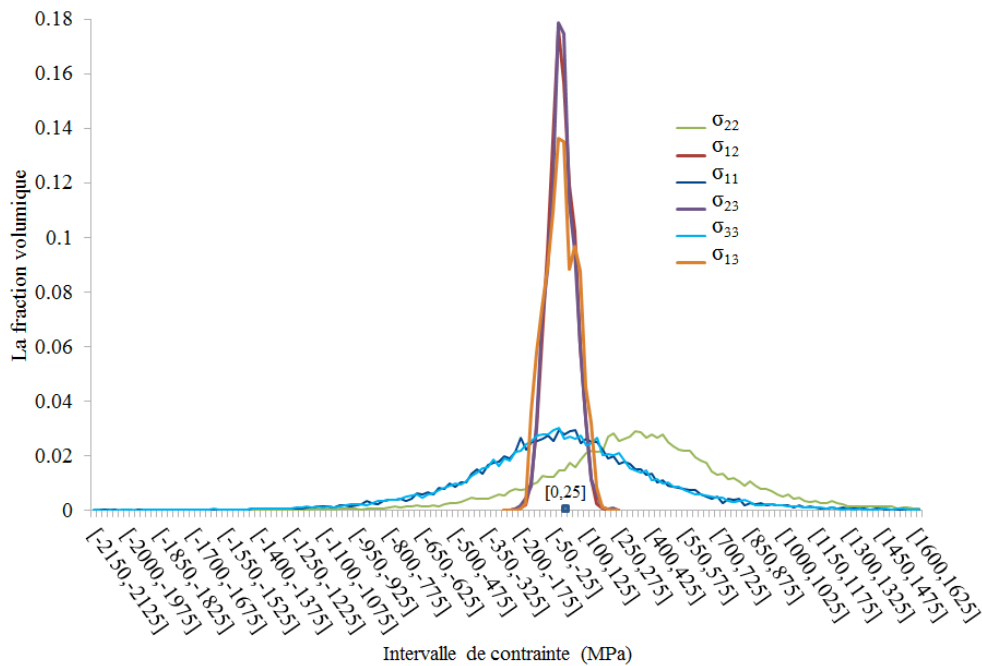
**Figure V.2.8.** Distribution de la contrainte équivalente dans le volume des polycristaux composé de 50 et 100 grains.

La distribution de la contrainte de von Mises dans les agrégats de 50 et 100 grains à la fin du chargement mécanique est représentée sur la figure V.2.8, confirmant l'allure similaire de la distribution dans les 2 agrégats, avec des valeurs maximales de contraintes légèrement plus grande dans l'agrégat de 100 grains



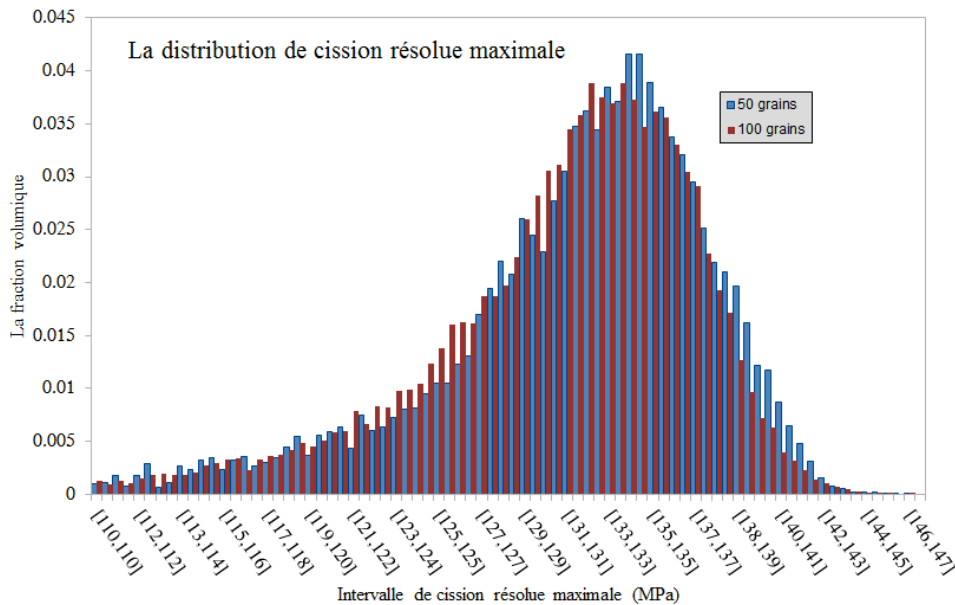
**Figure V.2.9.** Distribution de la contrainte  $\sigma_{yy}$  dans le volume des polycristaux composé de 50 et 100 grains.

La distribution de la contrainte  $\sigma_{yy}$  est représentée sur la figure V.2.9. Une similitude entre deux calculs est notée. Les valeurs présentent une très large dispersion, liées aux hétérogénéités de comportement local, autour d'une valeur moyenne égale à 369 MPa. Cette valeur correspond à celle de la courbe moyenne obtenue (figure V.2.13). Les autres composantes de contrainte, bien que nulles en moyenne, comme le montre leur distribution sur la figure V.2.10, conduisent localement à des états de contraintes complexes, ce qui contribue à la différence des distributions de  $\sigma_{yy}$  et de la contrainte équivalente de von Mises (figure V.2.8), alors qu'elle sont confondues dans le cas isotrope.



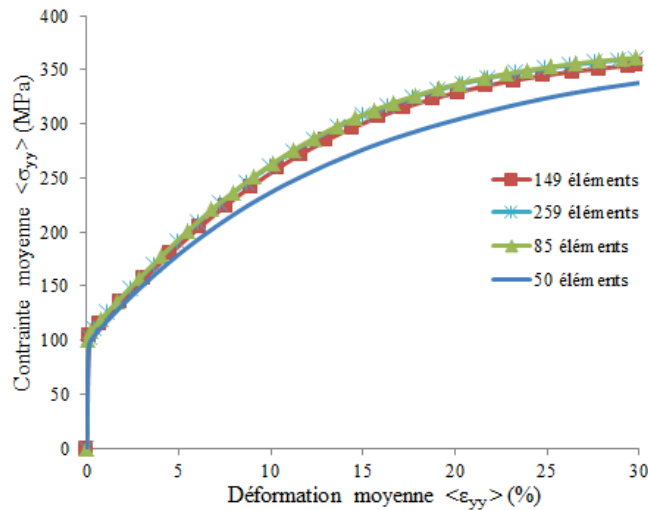
**Figure V.2.10.** Distribution des composants de l'état de contrainte dans le volume du polycristal composé de 50 grains.

Sur la figure V.2.11, est tracée la distribution de la cission résolue maximale parmi les 12 systèmes de glissement, en chaque point d'intégration. On constate à nouveau la forte similitude entre les deux calculs, et que la valeur moyenne est 131 MPa, ce qui suggérerait un facteur de Schmid moyen de l'ordre de 0,35 si l'état de contrainte est supposé uniaxial.



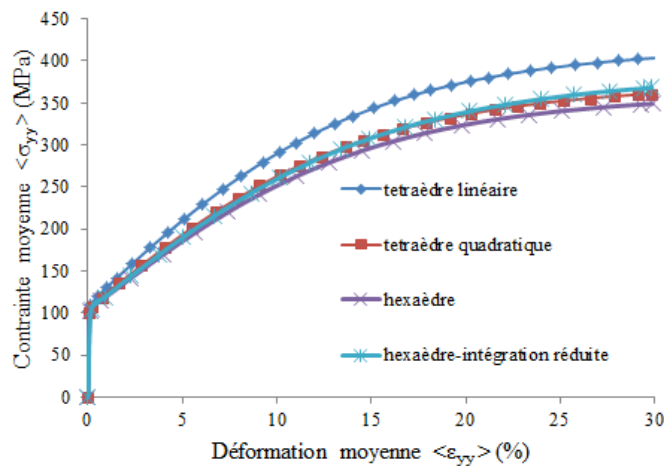
**Figure V.2.11.** Distribution de la cission résolue maximale dans le volume des polycristaux composé de 50 Grains et 100 grains.

En ce qui concerne l'influence du nombre d'éléments (éléments tétraédriques quadratiques, C3D10) sur le comportement de l'agrégat (figure V.2.12), on remarque un écart maximal de 1,5 % entre les calculs avec 89, 149 et 259 éléments par grains en moyenne. Par contre, la courbe globale obtenue avec 50 éléments finis s'éloigne de ces trois derniers calculs. Ces résultats suggèrent que 85 éléments par grains est un nombre minimum d'éléments pour définir un VER.



**Figure V.2.12.** Influence du nombre d'éléments moyen par grains pour un agrégat de 50 grains.

Enfin, sur la figure V.2.13, on a tracé les courbes  $\langle \sigma_{yy} \rangle - \langle \varepsilon_{yy} \rangle$  pour l'agrégat à 50 grains, en considérant un maillage tétraédrique linéaire (C3D4), un tétraédrique quadratique (C3D10), un maillage hexaédrique linéaire (C3D8) (intégration complète) et hexaédrique linéaire (C3D8) (intégration réduite), avec en moyenne 340 points d'intégration par grain (soit respectivement 340, 85, 43 et 340 éléments en moyenne).



**Figure V.2.13.** Influence de type d'éléments (pour un agrégat de 50 grains, avec en moyenne 340 points d'intégration par grains).

Le comportement de l'agrégat composé d'éléments tétraédriques linéaires (C3D4) paraît trop rigide, comme cela avait été noté par Barbe [13]. Ce fait peut s'expliquer par le fait que l'élément tétraédrique ne comporte qu'un seul point de Gauss, ce qui n'est pas suffisant dans certain cas pour calculer correctement les intégrales des champs mécanique dans un élément.

On observe qu'il y a de petites différences (de l'ordre de 1%) entre les courbes obtenues avec des éléments tétraédriques quadratiques et des éléments hexaédriques linéaires (intégration complète). Par contre, on observe une différence de 5% entre les courbes obtenues avec des éléments hexaédriques à intégration complète et à intégration réduite. Cet écart pourrait s'expliquer par les erreurs générées par l'intégration réduite, qui n'est peut-être pas suffisante pour bien prendre en compte la variation des champs mécaniques sur un élément.

A la suite de cette étude de sensibilité à différents paramètres, le choix des paramètres retenus pour définir un Volume Élémentaire Représentatif est synthétisé dans le tableau V.2.3.

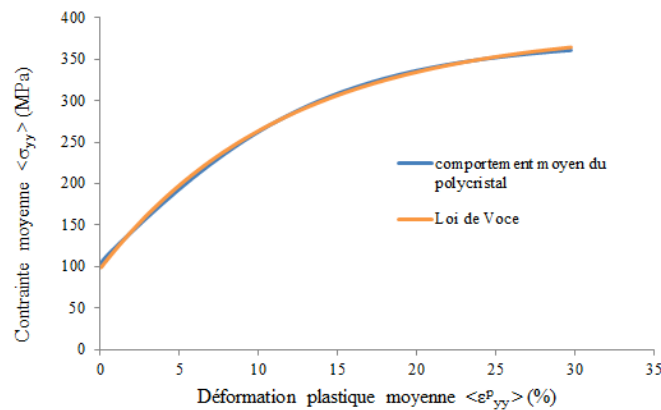
**Tableau V.2.3** Paramètres du VER utilisé.

Nombre de grains dans le VER	Nombre d'éléments/grains	Type d'éléments
50	85	C3D10

La courbe moyenne  $\langle \sigma_{yy} \rangle - \langle \varepsilon_{yy} \rangle$  obtenue avec le VER ainsi défini est présentée sur la figure V.2.14. Sa forme évoquant un caractère saturant, une identification sous forme d'une loi de Voce a été effectuée :

$$\sigma_Y = \sigma_0 + R_{sat} \left( 1 - e^{-C\bar{\varepsilon}_p} \right), \quad (V.2.2)$$

où  $\sigma_0$  est la limite élastique et  $R_{sat}$  et  $C$  sont des paramètres d'écrouissage à identifier.



**Figure V.2.14.** Identification de la loi d'écrouissage macroscopique.

Les paramètres ont été identifiés par moindres carrés et les valeurs retenues sont données dans le tableau V.2.4.

**Tableau V.2.4** Paramètres identifiés pour la loi d'écrouissage macroscopique.

$R_{sat}$ (MPa)	$\sigma_0$ (MPa)	$C$
289,59	97,3	8,53

La définition de ce comportement moyen permet d'envisager des calculs macroscopiques avec un sous-domaine polycristallin. Cette procédure est appliquée plus loin au cas de l'essai de pliage (voir chapitre V.4).

### V. 3. Couplage diffusion-plasticité dans un volume polycristallin

La diffusion à l'échelle du polycristal est étudiée ici dans un polycristal virtuel de  $Fe-\alpha$  construit par une partition de Voronoi [13]. Cette partition est générée par le programme Neper [14]. Le comportement de chaque grain est défini dans Abaqus grâce à l'UMAT de Huang [9] modifiée, et les orientations cristallines par une procédure ORIENT (voir paragraphe V.1.c).



### V. 3. a. Conditions de calcul

Le polycristal, de volume  $1^3 \text{ mm}^3$ , est constitué de grains de Fe- $\alpha$ , qui obéissent à la loi de plasticité cristalline avec les paramètres mécaniques donnés dans les paragraphes V.1.b et c.

La relation entre les concentrations d'hydrogène piégé et diffusif proposée par Olden [15] est supposée toujours valide, en remplaçant la déformation plastique équivalente par le glissement plastique cumulé :

$$C_T = (a\gamma + b)C_L \quad (\text{V.3.1})$$

Les valeurs numériques proposées par Olden pour a et b [15] ont été conservées pour cette étude purement numérique.

Par ailleurs, le glissement cumulé a été introduit dans l'équation de diffusion couplée (équation I.2.19) qui devient :

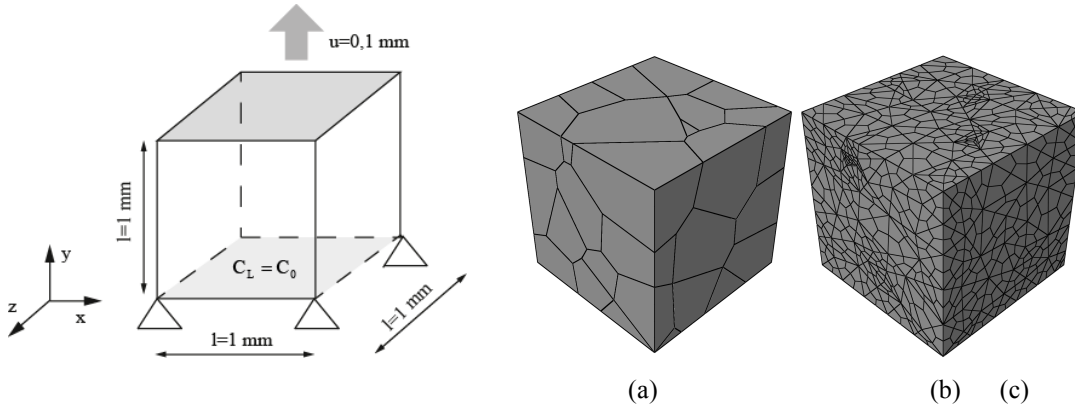
$$\frac{C_T(1-\theta_T) + C_L}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -D_L \nabla C_L - \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \nabla P_H \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial t} = 0. \quad (\text{V.3.2})$$

#### iii. Maillage

Le polycristal est composé de 50 grains. Il est maillé avec 12860 éléments hexaédriques trilineaires à intégration complète (environ 257 éléments par grains), et contenant un degré de liberté thermique (C3D8T dans Abaqus). Le maillage du polycristal est montré sur la figure V.3.1. Ce maillage est transformé en maillage hexaédrique, comme mentionné dans le paragraphe V.2.b.i.

#### iv. Conditions aux limites

Le polycristal est sollicité en traction : un déplacement de 0,1 mm est imposé sur la surface supérieure (figure V.3.1), soit un allongement relatif macroscopique dans la direction de traction égal à 10 %. Sur la face inférieure, des conditions de symétries sont imposées.



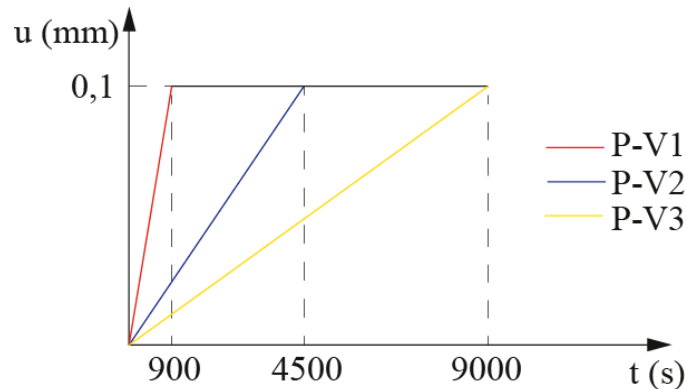
**Figure V.3.1.** (a) Conditions limites, (b) microstructure virtuelle générée par une partition de Voronoi et (c) maillage hexaédrique du polycristal étudié.

Afin d'analyser l'influence de la vitesse de chargement sur la répartition de l'hydrogène dans le volume du matériau (et plus particulièrement, l'influence du terme  $dy/dt$  dans l'équation V.3.2, plusieurs vitesses de déformations ont été imposées :  $1,1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ,  $2,2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  et  $1,1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  (avec un temps de chargement mécanique respectivement de 900, 4500 et 9000 s). Lorsque le déplacement imposé atteint 0,1 mm (étape 1), le chargement mécanique est maintenu constant jusqu'à  $t=9000 \text{ s}$  (étape 2) (figure V.3.2), qui est un temps suffisant pour que l'hydrogène diffuse dans tout le volume. Considérant une diffusion avec la loi de Fick



classique, le temps pour que l'hydrogène parcoure la distance  $x$  est estimé par  $t=x^2/(2D_L)$  [16]. Avec  $t=9000$  s, la distance parcourue par l'hydrogène serait alors  $\sqrt{D_L 2t} \approx 15,1$  mm.

Ces 3 calculs sont désignés respectivement P-V1, P-V2 et P-V3. Les orientations sont distribuées de façon aléatoire, mais sont identiques sur chaque grain pour les trois calculs.

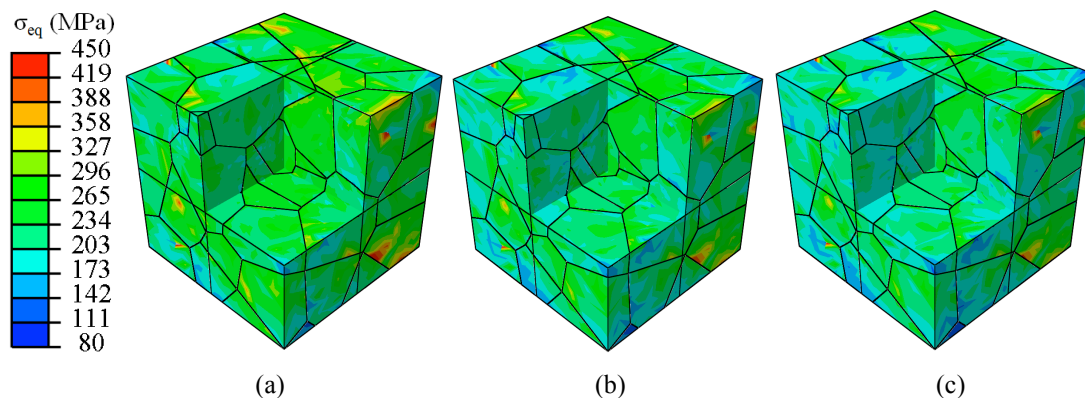


**Figure V.3.2.** Chargements en fonction du temps.

La surface inférieure du polycristal est soumise à une concentration constante en hydrogène  $C_0$ . Sur les autres faces est imposé un flux normal d'hydrogène nul (conditions de symétrie). Les calculs se font en régime transitoire.

### V. 3. b. Résultats

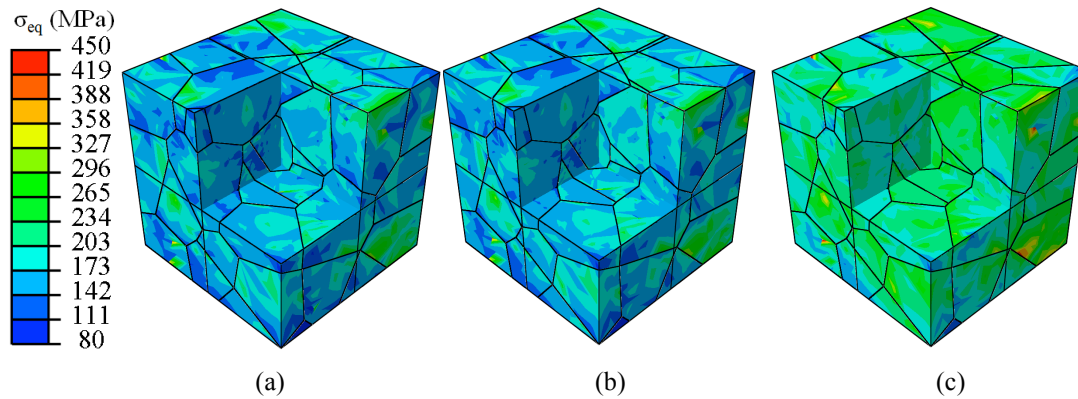
Les résultats des simulations sont présentés sur les figures V.3.3 à V.3.9. La figure V.3.3 et la figure V.3.4 présente le champ de contrainte équivalente pour les trois vitesses de déformation respectivement à fin de chargement mécanique (étape 1) et à  $t=9000$  s.



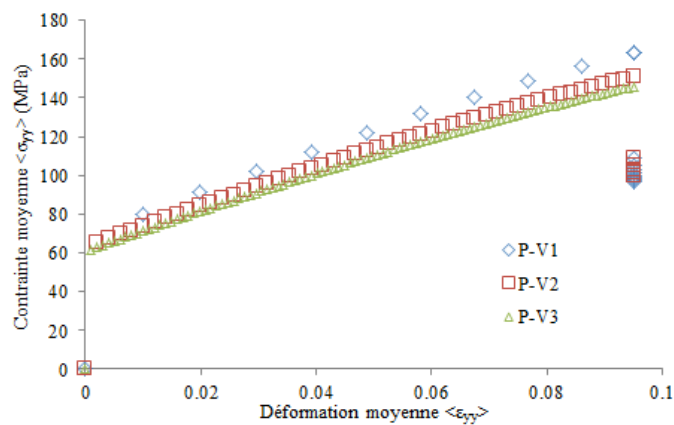
**Figure V.3.3.** Contrainte équivalente de von Mises pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à la fin de chargement mécanique (étape 1). 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal.

A la fin de l'étape 1, le champ de contrainte varie entre 80 et 450 MPa pour les 3 cas, avec des distributions spatiales voisines, mettant en évidence des zones de concentration de contraintes dans certains grains ou au voisinage de certains joints de grain. Cependant, les valeurs de contrainte sont légèrement plus élevées avec le calcul P-V1 dont la vitesse de sollicitation est la plus grande, ce qui est logique pour un comportement mécanique de type viscoplastique (dépendant de la vitesse de sollicitation). Une estimation grossière du rapport des contraintes lorsque la vitesse de déformation est multipliée par 10 donne  $10^{1/20} \approx 1,122$ , ce qui est cohérent avec les valeurs observées, et avec la courbe contrainte-déformation moyenne dans la direction de traction reportée sur la figure V.3.5. Les différences à la fin de l'étape 1

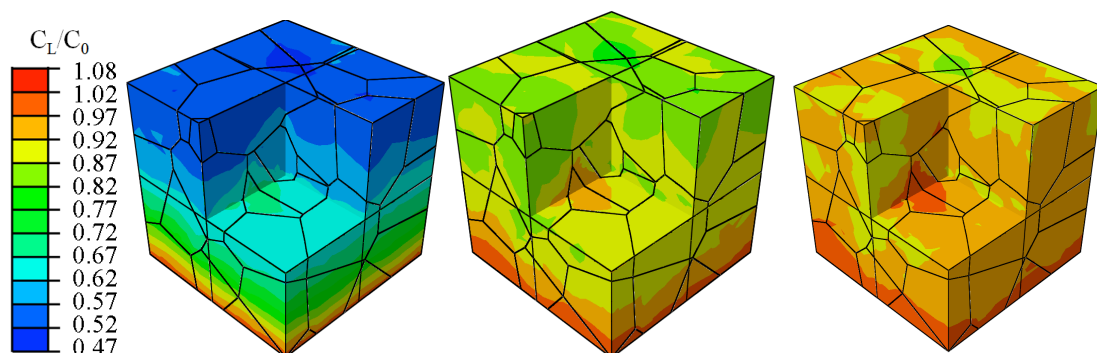
(figure V.3.4) étant attribuées aux effets de vitesse de déformation, les calculs montrent que  $n=20$  n'est donc pas suffisant pour assurer un comportement non visqueux. De même, la diminution sensible des contraintes dans les calculs P-V1 et P-V2 entre la fin de l'étape 1 et la fin du calcul  $t=9000$  s, durée pendant laquelle la déformation est maintenue constante évoque un effet de relaxation lié à l'aspect visqueux du comportement.



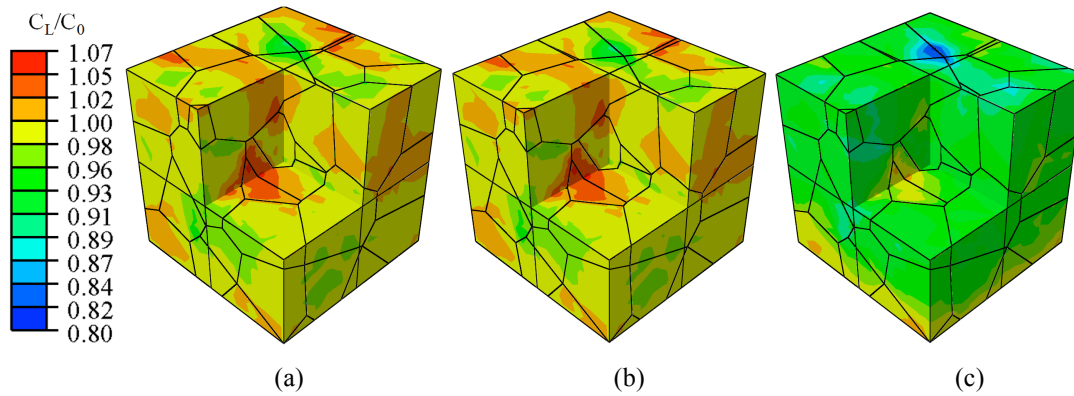
**Figure V.3.4.** Contrainte équivalente de von Mises pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à  $t=9000$  s. 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal.



**Figure V.3.5.** Courbe contrainte moyenne – déformation moyenne dans l'agrégat selon la direction de chargement pour les trois calculs P-V1, P-V2 et P-V3.



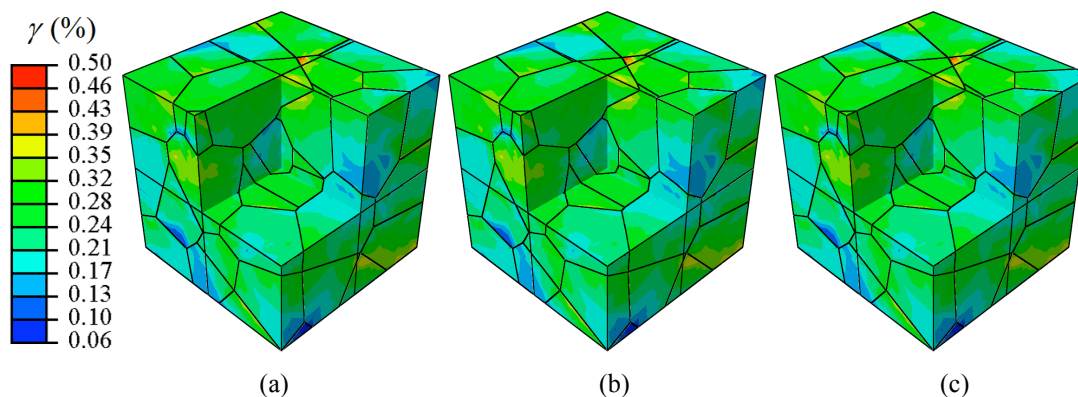
**Figure V.3.6.** Concentrations normalisée d'hydrogène diffusif  $C_L/C_0$  pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à la fin du chargement mécanique (étape 1). 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal.



**Figure V.3.7.** Concentrations normalisée d'hydrogène diffusif  $C_L/C_0$  pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à  $t=9000$  s. 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal.

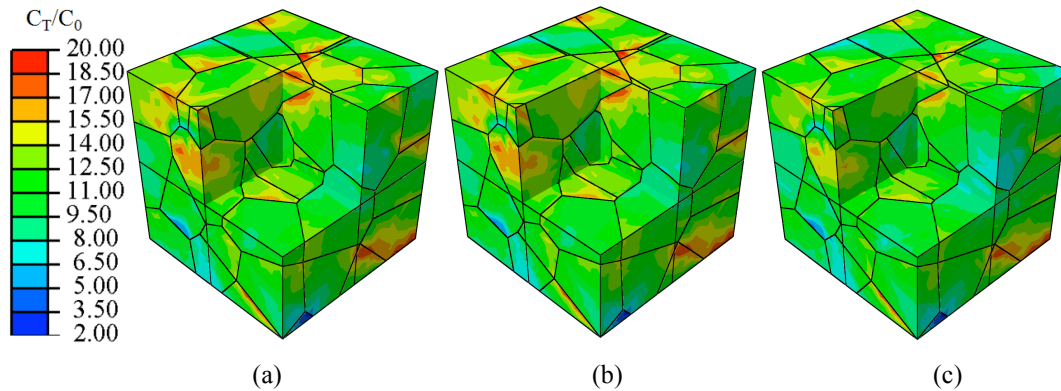
La figure V.3.6 illustre les différences de concentration normalisée d'hydrogène diffusif à la fin de l'étape 1, qui augmente comme attendu quand la vitesse de chargement diminue.

A la fin de l'étape 2 (figure V.3.7) la répartition spatiale de l'hydrogène diffusif est similaire dans les trois calculs, avec des valeurs plus élevées dans les calculs P-V1 et P-V2. A cause de la relaxation du VER dans les calculs P-V1 et P-V2 (figure V.3.5), les champs de contrainte (et donc a priori le champ de pression hydrostatique) y sont plus faibles que dans le calcul P-V3, on aurait donc pu s'attendre au contraire à des champs d'hydrogène diffusif plus faible. Le fait que le piégeage augmente tout au long du calcul P-V3 pourrait expliquer cette différence : en effet, le coefficient de diffusion de l'hydrogène tout au long de ce calcul est le coefficient de diffusion apparent, alors que dans les calculs P-V1 et P-V2, la diffusion de l'hydrogène est modifiée par le piégeage uniquement dans la phase de chargement. Il est cependant difficile de séparer les effets de la viscosité de ceux liée à la diffusion couplée. Il faudrait en effet refaire des simulations en utilisant une valeur de  $n$  beaucoup plus importante pour pouvoir statuer sur l'influence de la vitesse de chargement sur la diffusion et le piégeage d'hydrogène. Par manque de temps, ces calculs n'ont pas pu être faits.



**Figure V.3.8.** Glissement cumulé pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à  $t=9000$  s. 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal

On peut en effet constater que le glissement cumulé (figure V.3.8) est identique dans les trois calculs (car les trois polycristaux sont soumis au même déplacement, ont la même microstructure ainsi que les mêmes orientations).



**Figure V.3.9.** Concentration normalisée d'hydrogène piégé  $C_T/C_0$  pour les simulations (a) P-V1 (b) P-V2 et (c) P-V3 à  $t=9000$  s. 1/8 du volume de l'agrégat a été rendu invisible afin de visualiser les distributions à l'intérieur du polycristal

Dans la figure V.3.9 sont montrées les cartes de la concentration normalisée de l'hydrogène piégé : les concentrations les plus importantes sont au voisinage de certains joints de grains du polycristal. Les cartes de diffusion dans les calculs P-V1 et P-V2 ont un profil similaire et plus important que celui du calcul P-V3, ce qui est certainement lié aux différences entre les cartes d'hydrogène diffusif. Ceci s'explique par le fait que  $C_T$  dépend de  $C_L$  par l'équation V.3.1. Or, la concentration  $C_L$  est plus importante dans P-V1 et P-V2 que dans P-V3 et le glissement cumulé est identique dans les 3 calculs.

La quantité de l'hydrogène absorbé dans le polycristal pour les 3 calculs P-V1, P-V2, P-V3 sont respectivement  $13,06C_0$  ;  $13,02C_0$  et  $12,38C_0$  atomes d'hydrogène (voir chapitre 3, section III.3.d pour plus de détails sur la quantité d'hydrogène absorbé dans l'échantillon). Comme constaté ci-dessus,  $C_T$  et  $C_L$  sont plus grands dans le calcul P-V1 et P-V2, donc la concentration totale aussi  $C_T + C_L$ . Pour les trois calculs, le glissement cumulé est le même, et la seule différence est liée à la répartition en hydrogène diffusif : comme celui-ci est plus important dans le calcul P-V1, c'est donc normal que la quantité totale en hydrogène y soit également la plus importante.

#### ***V. 4. Application à l'essai de pliage en 3D***

La configuration de l'essai en U utilisée dans le chapitre précédent a été considérée pour appliquer la modélisation des interactions hydrogène-matériaux à l'échelle du polycristal dans une structure macroscopique.

##### *V. 4. a. Stratégie de calcul*

Modéliser entièrement l'éprouvette par des polycristaux est très coûteux en temps de calcul et en espace mémoire, le maillage associé étant très fin. Ce type d'approche n'est donc pas envisageable.

Une méthodologie en deux étapes a donc été retenue.

A l'échelle macroscopique, on modélise l'essai global, en attribuant à l'éprouvette un comportement élastoplastique standard à écrouissage isotrope, identifié à l'aide du comportement moyen en traction d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) polycristallin à texture aléatoire isotrope, dont les grains obéissent à la loi de plasticité cristalline définie dans le paragraphe V.1.

On définit ensuite une structure polycristalline dans une zone d'intérêt de l'échantillon, sur laquelle sont appliquées comme conditions aux limites en déplacement ou en concentration d'hydrogène les évolutions temporelles issues du calcul global. Ce transfert de condition limite est effectué en se servant de la procédure 'submodelling' d'Abaqus [17], ou grâce à l'écriture d'une procédure Python si la méthode précédente ne peut être utilisée (dans le transfert de conditions aux limites entre 2 calculs qui ne sont pas dans le même espace de dimension, par exemple le calcul global en 2D/ou 2D axisymétrique et le calcul local en 3D).

#### V. 4. b. Pliage en U - calcul 3D homogène

L'échantillon est de dimensions  $100 \times 10 \times 1,6 \text{ mm}^3$ . Les conditions aux limites appliquées sur cette éprouvette sont les mêmes que celles utilisées dans la simulation de l'essai de pliage en 2D (chapitre 4, section IV.4.b). Les différents paramètres liés à la diffusion d'hydrogène, de même que le lien  $C_L-C_T$ , sont pris identiques à ceux du paragraphe V.2.

##### i. Maillage

On a fait une étude afin de trouver une taille d'éléments qui donne des résultats indépendants du maillage. Celui qui a été retenu est composé de 28416 éléments hexaédriques bilinéaires C3D8, à intégration complète (figure V.4.1). La taille d'élément diminue vers l'axe de symétrie de l'éprouvette, où l'élément le plus petit a une taille de 0,05 mm L'élément fini le plus grand a une taille de 2 mm et est situé aux extrémités de l'éprouvette. Le maillage comporte 32 éléments dans l'épaisseur.

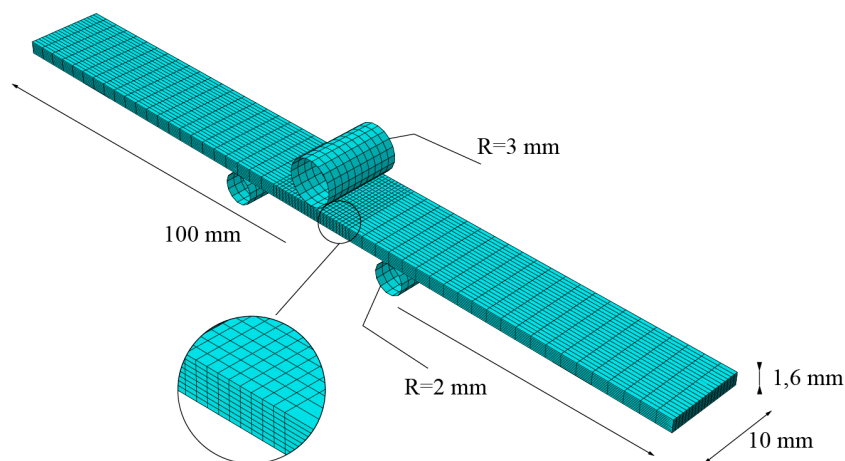
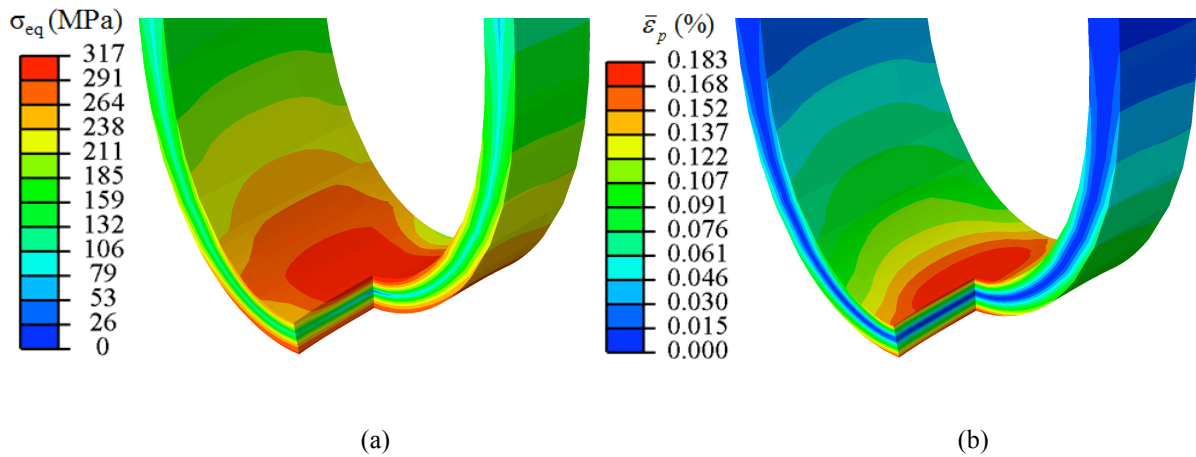


Figure V.4.1. Maillage de la simulation de l'essai de pliage en U.

Le comportement du matériau est supposé élastoplastique à écrouissage isotrope. Les paramètres d'écrouissage ont été identifiés dans la section précédente (tableau V.2.4).

##### ii. Résultats

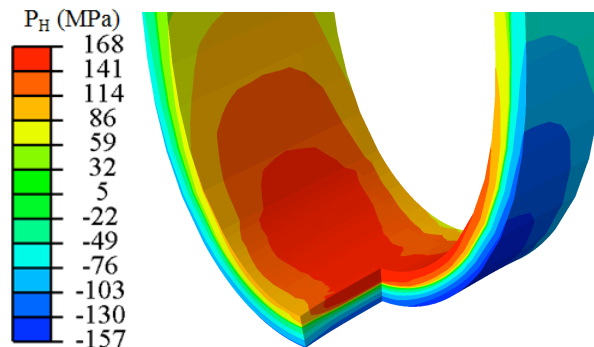
Sur la figure V.4.2, on présente le champ de contrainte équivalente de von Mises et le champ de déformation plastique équivalente.



**Figure V.4.23.** (a) Contrainte de von Mises et (b) déformation plastique équivalente à la fin du chargement mécanique dans l'éprouvette en U. Afin de voir les champs à l'intérieur de la plaque, un quart d'éprouvette a été rendu invisible dans la visualisation des résultats.

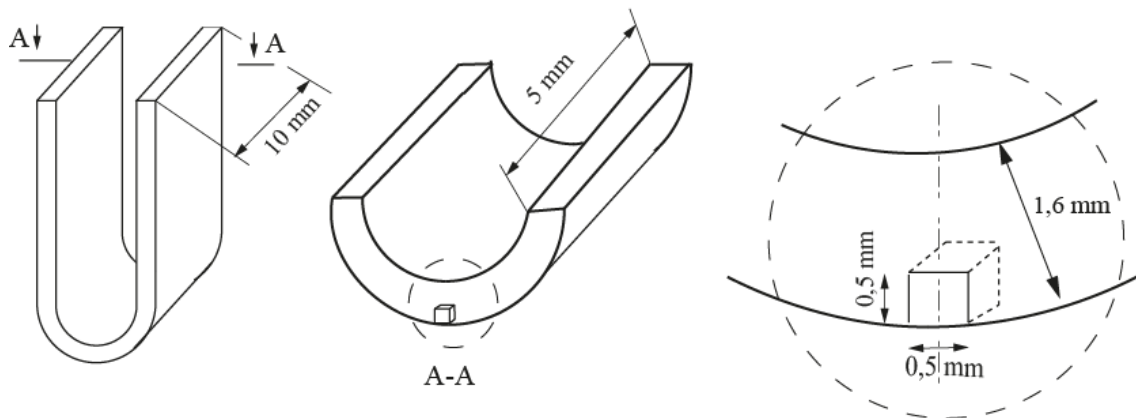
La contrainte équivalente est maximale sur les bords de l'échantillon et minimale au cœur de la plaque. Par rapport au calcul 2D effectué au chapitre 4, section IV.3, le calcul 3D permet de mettre en évidence les effets de bords, avec des maxima au centre de la largeur de l'éprouvette, et les limites de validité de l'hypothèse de déformation plane.

Dans la figure V.4.3, on a tracé le champ de pression hydrostatique, qui présente comme attendu un minimum sur la face extérieure du U et un maximum sur sa face intérieure.



**Figure V.4.3.** La pression hydrostatique à la fin du chargement dans la simulation globale.

*V. 4. c. Mise en place de la simulation de l'essai du pliage en U à l'échelle du polycristal*



**Figure V.4.4.** Emplacement de l'agrégat polycristallin dans l'éprouvette pliée en U.

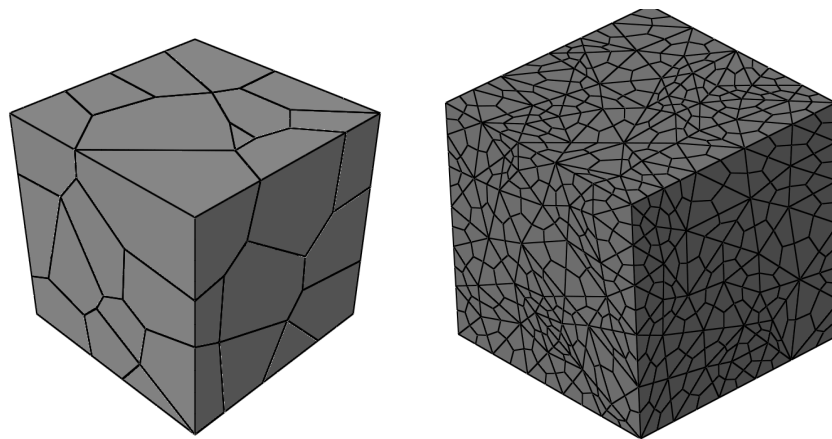


L'agrégat est défini comme un cube de 0,5 mm d'arrête. Son emplacement dans l'échantillon est présenté dans la figure V.4.4 : la position de l'agrégat est choisie au contact avec la surface externe, puisque c'est la zone d'intérêt expérimentale pour les risques de fragilisation par l'hydrogène.

i. Maillage

Dans la section V.2.b, on a déduit qu'un agrégat composé de 50 grains est suffisant pour obtenir un comportement macroscopique représentatif. Afin d'étudier l'influence de la taille des grains du matériau sur la diffusion de l'hydrogène dans l'essai en U, des simulations pour des agrégats à texture aléatoire composés de 50, 100 et 150 grains (soit des tailles moyennes de grains de 85, 66 et 58 microns, correspondant au rayon équivalent qu'auraient des grains sphériques de même volume) ont été effectuées. Ces simulations sont notées C-50, C-100 et C-150 respectivement.

Le maillage tétraédrique généré par Neper [14] est transformé en maillage hexaédrique bilinéaire à 8 nœuds C3D8 pour être compatible avec les outils numérique développés (UMAT, UMATHT dans chapitre 2). Le maillage retenu pour la simulation comporte de 145 éléments hexaédriques, ce qui équivaut 1160 points d'intégrations par grains. La microstructure et le maillage pour l'agrégat composé de 50 grains sont présentés dans la figure V.4.5.



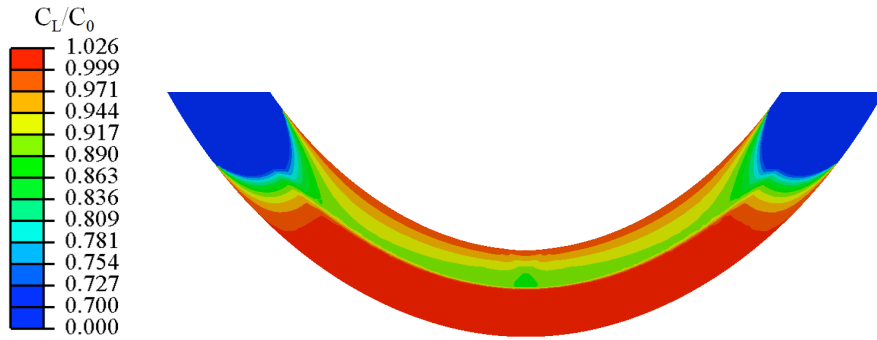
**Figure V.4.5.** La microstructure et le maillage d'un agrégat de 50 grains.

ii. Conditions aux limites

Les conditions en déplacement sont imposées par la procédure 'submodeling' d'Abaqus, qui interpole les déplacements sur les frontières du VER à partir des résultats du calcul homogène 3D. Sur les faces externes du VER sont donc imposés, en chaque nœud du maillage, des déplacements  $U_x(t)$ ,  $U_y(t)$  et  $U_z(t)$ , qui sont des fonctions issues du calcul homogène 3D.

Pour les conditions aux limites de la concentration d'hydrogène, comme le comportement élastoplastique isotrope n'est pas implémenté en 3D pour la procédure UMAT, une simulation couplée mécanique-diffusion de l'hydrogène de l'essai de pliage en 2D, avec le comportement mécanique identifié dans le paragraphe V.2.b a été effectuée, afin obtenir la variation temporelle en concentration d'hydrogène.

Dans cette simulation 2D, les conditions aux limites sont identiques à celles dans la simulation de l'essai de pliage en 2D dans la section IV.3, avec une concentration  $C_0$  imposée sur la surface interne et externe. Le comportement mécanique utilisé est le même que celui du paragraphe IV.3.d. La répartition de cette concentration est illustrée dans la figure V.4.6.

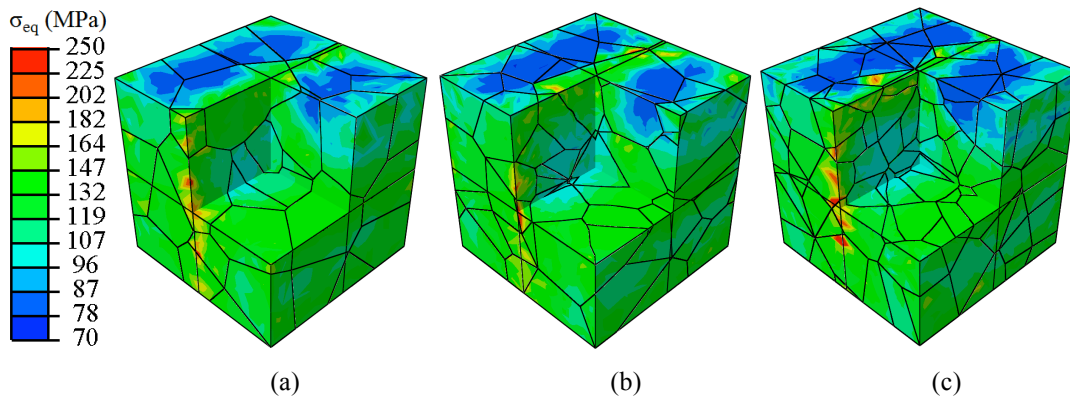


**Figure V.4.6.** Répartition de l'hydrogène diffusif normalisé dans le U à la fin du calcul 2D.

En chaque nœud des faces externes du VER, on impose donc une concentration  $C_L(t)/C_0$ , issue du calcul 2D transitoire couplé (avec un temps total de diffusion  $t=90000$  s) par extrusion selon la largeur. On néglige ici les différences de concentration sur les faces latérales du VER.

#### V. 4. a. Résultats

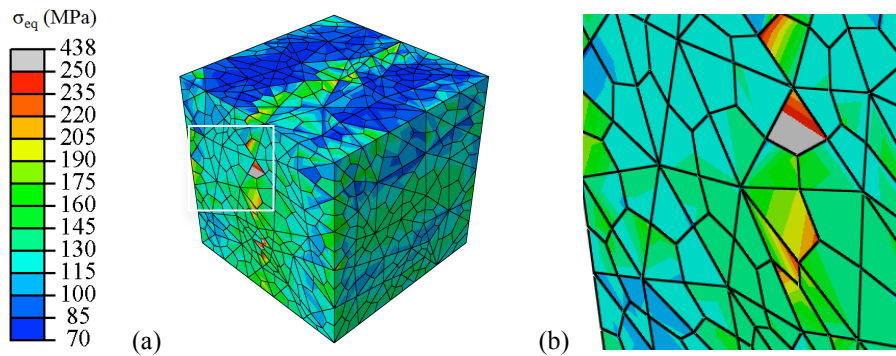
Les résultats des simulations sont présentés sur les figures V.4.7 à V.3.22. Les calculs sur polycristaux sont fait en régime transitoire, et les résultats sont donnés à la fin du calcul, quand le régime permanent est atteint ( $t=90000$  s).



**Figure V.4.7.** Contrainte équivalente de von Mises à la fin du chargement mécanique pour les simulations (a) C-50, (b) C-100 et (c) C-150.

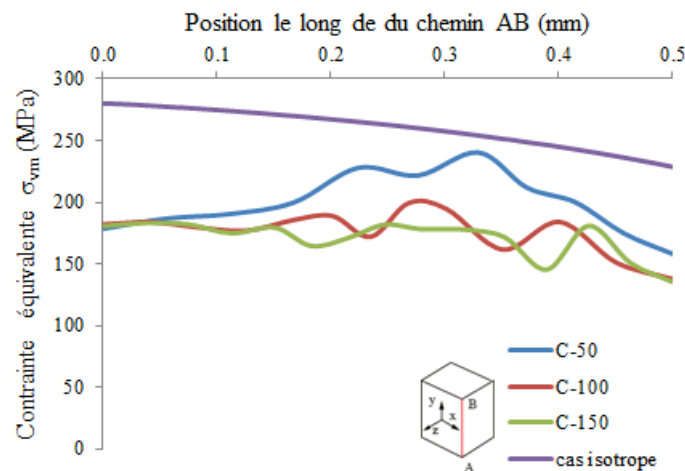
La figure V.4.7 représente la contrainte équivalente de von Mises pour les trois simulations. Les champs de contraintes sont assez proches ; les contraintes équivalentes les plus faibles se situent plutôt vers la face supérieure du polycristal, ce qui est a priori cohérent avec le chargement global. La contrainte équivalente est légèrement plus élevée dans le calcul C-150 que dans les deux autres calculs. Ceci peut être lié à la précision du maillage : pour le polycristal C-150, le nombre d'éléments dans l'ensemble du polycristal est plus important que celui dans C-100 et C-50 (à même nombre d'éléments par grain). On note enfin des concentrations de contrainte sur l'axe de symétrie du VER (qui est également l'axe de symétrie de l'essai). Ceci est certainement lié à la forme écrasée de certains éléments finis hexaédriques, qui engendrent des artéfacts de visualisation dans le CAE (figure V.4.8) : les résultats aux points de Gauss sont extrapolés puis moyennés aux nœuds.





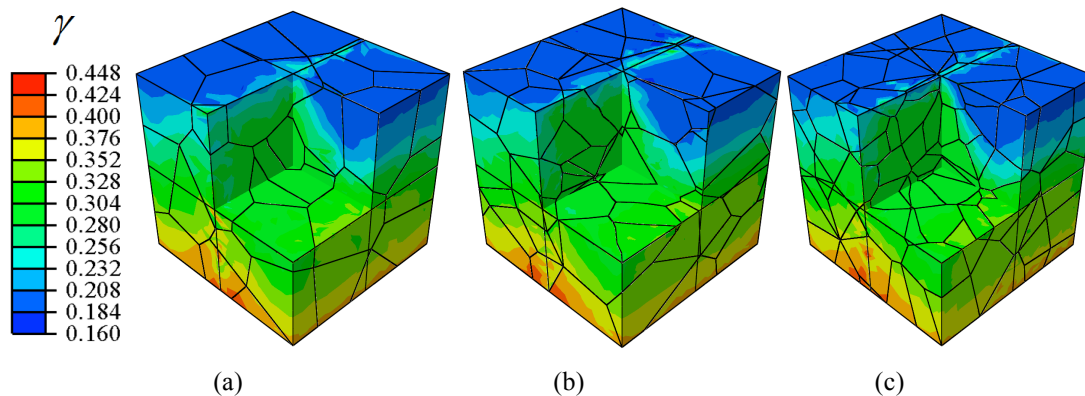
**Figure V.4.8.** (a) Contrainte équivalente de von Mises sans moyenner aux nœuds pour la simulation C-50, et (b) zoom sur les zones fortement contraintes pour illustrer la forte variation du champ mécanique dans l'élément fini.

Sur la figure V.4.9 est tracée la variation de la contrainte équivalente le long du côté AB pour trois calculs d'agrégat cristallin C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope. Une variation similaire et hétérogène est constatée pour les 3 calculs C-50, C-100, C-150 alors qu'une variation plus régulière est constatée dans le cas isotrope. On remarque que les valeurs issues des calculs polycristallins restent inférieures au cas isotrope, ce qui peut être lié d'une part à l'hétérogénéité du polycristal et d'autre part à la sensibilité des calculs cristallins à la vitesse locale de déformation à cause du caractère visqueux de la loi de comportement utilisée.



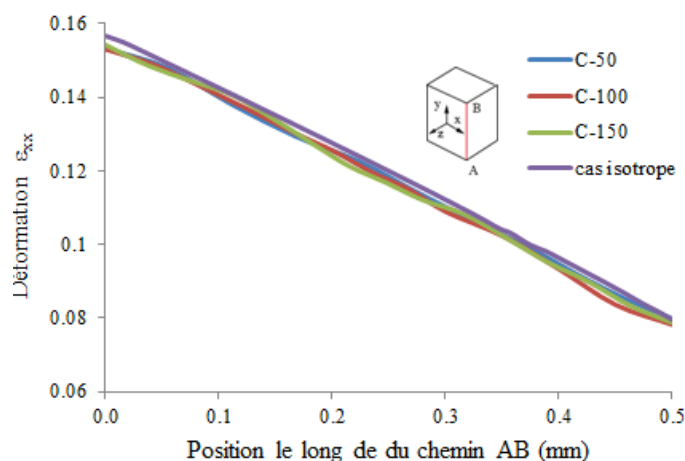
**Figure V.4.9.** Contrainte équivalente le long du chemin AB à la fin du calcul pour les calculs C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope.

Dans la figure V.4.10, on trace le glissement cumulé  $\gamma$  pour les trois calculs. On observe que dans tous les cas, le glissement cumulé est plus élevé dans la partie inférieure du polycristal. On note que le glissement cumulé est proche dans les trois calculs avec une valeur minimale et maximale de 0,16 et 0,448. Pour les calculs C-100 et C-150, la zone où le glissement cumulé est maximal est plus étendue que celui dans le calcul C-50.

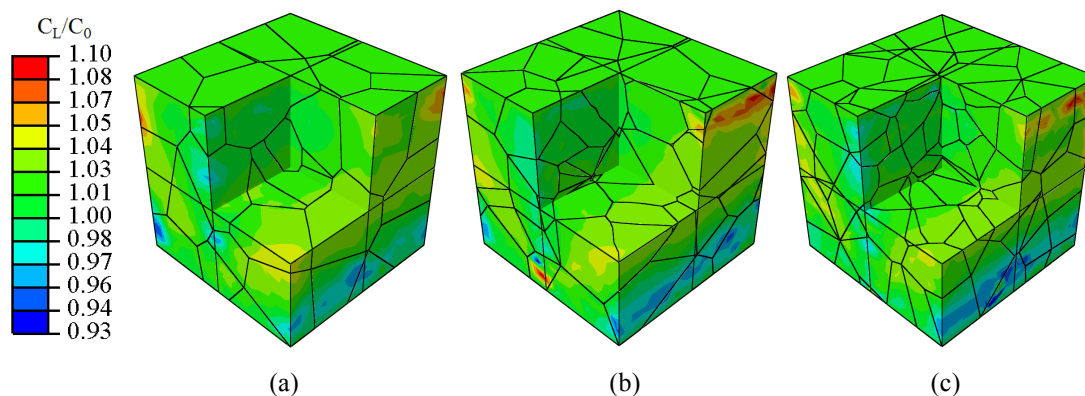


**Figure V.4.10.** Glissement cumulé à la fin du chargement mécanique pour les simulations C-50, C-100 et C-150.

Sur la figure V.4.11 est tracé la variation de la déformation  $\epsilon_{xx}$  au long du côté AB pour trois calculs d'agrégat cristallin C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope. Une variation presque identique est constatée dans tous les cas, ce qui est rassurant par rapport à la procédure de transfert de conditions limites. La variation dans le cas isotrope est plus linéaire.



**Figure V.4.11.** Déformation  $\epsilon_{xx}$  au long du chemin AB à la fin du calcul pour les calculs C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope.

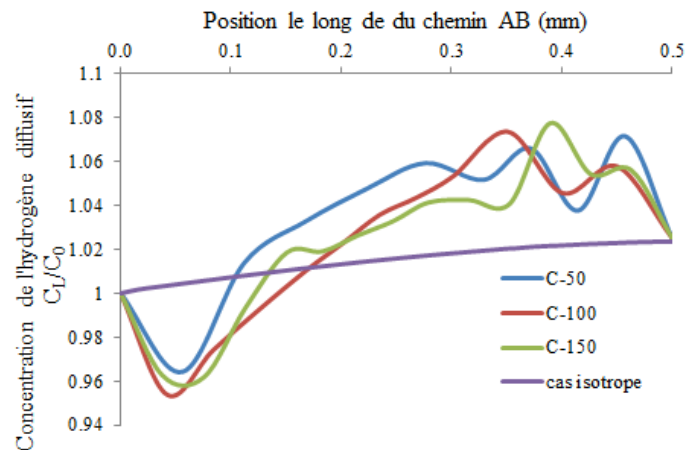


**Figure V.4.12.** Concentrations en hydrogène diffusif normalisées  $C_L/C_0$  pour les simulations C-50, C-100 et C-150 à la fin du calcul.

Sur figure V.4.12 on trace la concentration normalisée en l'hydrogène diffusif. Cette concentration est assez uniforme dans les 3 calculs : la grande partie de volume polycristal est couverte par une concentration de l'hydrogène diffusif normalisé voisine de 1. Dans le calcul C-100 et C-150, on observe que les zones où la concentration de l'hydrogène est maximale (la

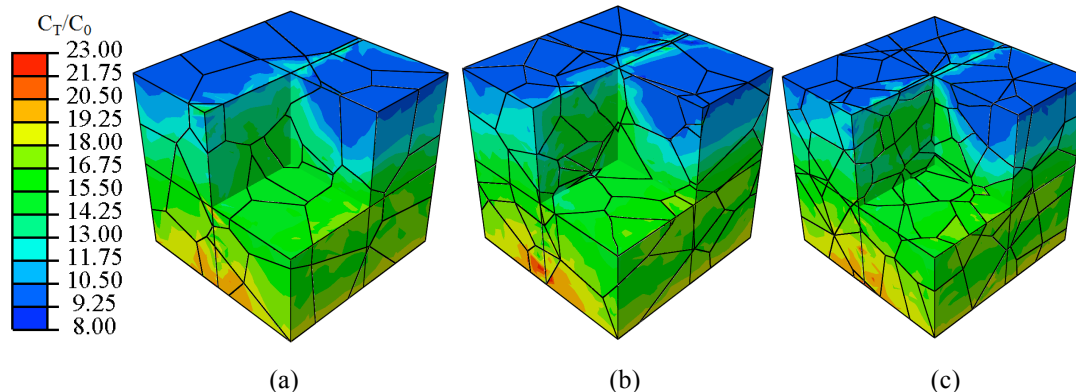
concentration  $C_L/C_0$  de l'ordre 1.1) sont plus étendues que pour le calcul C-50. Dans ce dernier cas, les valeurs de  $C_L$  sont plus faibles.

Sur la figure V.4.13 est tracée la variation de la concentration de l'hydrogène diffusif le long du côté AB pour trois calculs d'agrégat cristallin C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope. Une variation similaire est constatée pour les 3 calculs C-50, C-100, C-150. Dans ces trois cas, les variations de  $C_L$  fluctuent fortement d'un grain à l'autre, alors qu'elles sont très faibles dans le cas isotrope.



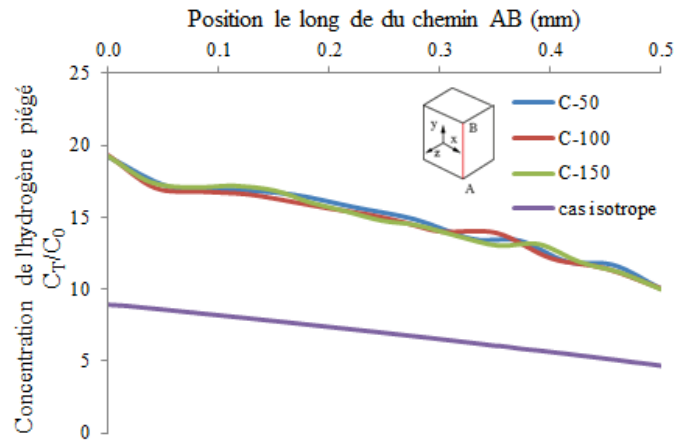
**Figure V.4.13.** Concentration normalisée de l'hydrogène diffusif  $C_L/C_0$  au long du chemin AB à la fin du calcul pour les calculs C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope.

Sur la figure V.4.14, on donne la concentration normalisée de l'hydrogène piégé, qui est également plus importante dans le calcul C-50 et C-100. L'hydrogène piégé est davantage localisé dans la partie inférieure du polycristal, ce qui est en accord avec les champs de glissement cumulé et la relation  $C_L-C_T$  retenue.



**Figure V.4.14.** Concentration normalisée d'hydrogène piégé normalisée  $C_T/C_0$  pour les simulations C-50, C-100 et C-150, à la fin du calcul.

La figure V.4.15 représente la variation de la concentration de l'hydrogène piégé au long du côté AB pour trois calculs d'agrégat cristallin C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope. La variation de la concentration de l'hydrogène piégé dans 3 calculs C-50, C-100, C-150. Des fluctuations de  $C_T$  avec la position sont observées dans ces trois cas, avec des valeurs moyennes environ 2 fois plus grande que dans celle dans le cas isotrope, ce qui dû au fait que la déformation plastique n'est pas prise en compte exactement de la même manière (déformation plastique équivalente ou glissement plastique cumulé, cf. comparaison des figures V.4.2b et V.4.10)



**Figure V.4.15.** Concentration normalisée de l'hydrogène piégé  $C_T/C_0$  au long du chemin AB à la fin du calcul pour les calculs C-50, C-100, C-150 et le cas isotrope.

Si l'on calcule la quantité totale d'hydrogène absorbée dans le VER à la fin des trois calculs C-50, C-100 et C-150, on obtient respectivement 1,98 ; 1,981 et 1,976 $C_0$ . Ces valeurs sont très proches, ce qui peut être lié au fait que les conditions limites imposées sur le VER sont très contraignantes et ne créent pas énormément de différence en terme de champs de contrainte, et de déformation. Les différences proviennent principalement des différences (faibles) de glissement cumulé entre les trois VER. Comme la concentration d'hydrogène piégé est dominante par rapport à celle de la concentration de l'hydrogène diffusif, à cause de la relation choisie entre  $C_T$  et  $C_L$ , la concentration totale de l'hydrogène est régie par le glissement cumulé.

Les résultats obtenus dans le polycristal sont globalement cohérents avec ce qui est attendu dans cette zone de pliage (valeurs maximales de glissement cumulé et la concentration de l'hydrogène dans la zone inférieure du VER). Contrairement au calcul isotrope macroscopique (section IV.4), la prise en compte de l'anisotropie cristalline (section V.1.a) a permis d'obtenir les hétérogénéités dans les champs mécaniques et la concentration de l'hydrogène, en particulier l'hydrogène piégé. Il devient donc possible d'envisager localement des critères de rupture basés sur une représentation plus réaliste des champs mécaniques et diffusifs, à condition de disposer des mesures expérimentales correspondantes.

## V. 5. Conclusion

Les outils numériques pour permettre la diffusion transitoire d'hydrogène assistée par les champs mécanique ont été appliqués avec succès sur des calculs polycristallins. Ces calculs se sont basés sur des lois de comportement cristallines, la génération d'orientations cristallines aléatoires, et un couplage entre piégeage et déformation plastique via le glissement plastique cumulé.

Afin de permettre un calcul avec des conditions limites variables dans le temps, et réalistes, une procédure 'submodelling' d'Abaqus a été utilisée.

Ces calculs montrent la flexibilité de la démarche et la robustesse des algorithmes développés : quelle que soit la configuration étudiée, des résultats ont été obtenus jusqu'à des déformations plastiques cumulées importantes (de l'ordre de 45%), et des calculs de diffusion en régime transitoire ou permanent. De plus, la procédure à deux échelles (3D homogène puis 3D polycristallin) permet d'étudier a priori n'importe quel chargement macroscopique, du plus simple au plus complexe. Pour le moment, la procédure de calcul des champs  $C_L$  sur un

calcul 3D homogène est à améliorer, car elle n'est développée pour l'instant qu'en 2D ou 2D axisymétrique.

## ***Bibliographie***

- [1] D. Hull et D.J. Bacon, *Introduction to Dislocations*. 2001: Butterworth-Heinemann, p. 59.
- [2] *Crystal basics*. disponible sur: <http://www.cmse.ed.ac.uk/AdvMat45/>.
- [3] R.J. Asaro, *Crystal Plasticity*. Journal of Applied Mechanics, 1983. **50**(4b): p. 921-934.
- [4] R.J. Asaro, *Micromechanics of Crystals and Polycrystals*, in *Advances in Applied Mechanics*, W.H. John and Y.W. Theodore, Editors. 1983, Elsevier. p. 1-115.
- [5] D. Peirce, R.J. Asaro, et A. Needleman, *An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals*. Acta Metallurgica, 1982. **30**(6): p. 1087-1119.
- [6] Y.D. Wang, et al., *Grain-orientation-dependent residual stress and the effect of annealing in cold-rolled stainless steel*. Acta Materialia, 2002. **50**(7): p. 1717-1734.
- [7] A. Barnoush, M. Asgari, et R. Johnsen, *Resolving the hydrogen effect on dislocation nucleation and mobility by electrochemical nanoindentation*. Scripta Materialia, 2012. **66**(6): p. 414-417.
- [8] L.T. Le, *Etude par essais in situ MEB et AFM sur monocristaux des mécanismes de glissement à température ambiante de la ferrite de pureté commerciale*. Thèse de doctorat. Université Paris 13, 2013.
- [9] Y. Huang, *A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the abaqus finite element program*. 1991.
- [10] *ABAQUS User subroutines references manual 2011*.
- [11] A. Taha, Sofronis, P., *A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement*. Engineering Fracture Mechanics, 2001. **68**(6): p. 803-837.
- [12] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.
- [13] F. Barbe, et al., *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model*. International Journal of Plasticity, 2001. **17**(4): p. 513-536.
- [14] R. Quey, P.R. Dawson, et F. Barbe, *Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2011. **200**: p. 1729-1745.
- [15] V. Olden, et al., *Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25%Cr duplex stainless steel – Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements*. Engineering Fracture Mechanics, 2009. **76**(7): p. 827-844.

- [16] *diffusion equation*. disponible sur: <http://www.life.illinois.edu/crofts/bioph354/diffusion1.html>.
- [17] *Abaqus Analysis Users's Manual 2011*.
- [18] R. Hill, *Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1963. **11**(5): p. 357-372.
- [19] W.J. Drugan et J.R. Willis, *A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1996. **44**(4): p. 497-524.
- [20] Z. Hashin, *Analysis of Composite Materials—A Survey*. Journal of Applied Mechanics, 1983. **50**(3): p. 481-505.
- [21] R. Hill, *On macroscopic measures of plastic work and deformation in micro-heterogeneous media: PMM vol. 35, n<sup>o</sup>1, 1971, pp. 31–39*. Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 1971. **35**(1): p. 11-17.
- [22] P. Suquet, *Averages, boundary conditions*, in *Homogenization Techniques for Composite Media*, E. Sanchez-Palencia and A. Zaoui, Editors. 1987, Springer Berlin Heidelberg. p. 199-208.
- [23] O. Diard, et al., *Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity: Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries*. International Journal of Plasticity, 2005. **21**(4): p. 691-722.
- [24] A. Salahouelhadj et H. Haddadi, *Estimation of the size of the RVE for isotropic copper polycrystals by using elastic–plastic finite element homogenisation*. Computational Materials Science, 2010. **48**(3): p. 447-455.
- [25] Z.Y. Ren et Q.S. Zheng, *A Quantitative study of minimum sizes of representative volume elements of cubic polycrystals—numerical experiments*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2002. **50**(4): p. 881-893.
- [26] M. Nygård et P. Gudmundson, *Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel*. Computational Materials Science, 2002. **24**(4): p. 513-519.
- [27] M. Berveiller et A. Zaoui, *An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1978. **26**(5–6): p. 325-344.
- [28] G. Cailletaud, *Une approche micromécanique du comportement des polycristaux*. Rev. Phys. Appl. (Paris), 1988. **23**(4): p. 353-365.
- [29] S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst, et L. Anand, *Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1992. **40**(3): p. 537-569.

- [30] A. Musienko, et al., *Three-dimensional finite element simulation of a polycrystalline copper specimen*. Acta Materialia, 2007. **55**(12): p. 4121-4136.
- [31] *Abaqus V6-11, CAE user manual, paragraphe 15.15.9*. 2011, Simulia.
- [32] F. Barbe, S. Forest, et G. Cailletaud, *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results*. International Journal of Plasticity, 2001. **17**(4): p. 537-563.
- [33] C. Zhang, et al. *Simulation numérique par éléments finis d'agrégats polycristallins soumis à des chargements thermomécaniques issus du soudage*. à 21ème Congrès Français de Mécanique, 26 au 30 août 2013. Bordeaux, France



## Conclusion et perspectives

Dans ce travail de thèse, l'objectif était de développer des procédures numériques fiables permettant de simuler le couplage de champs mécanique-diffusion de l'hydrogène, avec prise en compte phénoménologique des interactions hydrogène-plasticité, en vue de la simulation de structures complexes dans le domaine de la mise en forme des matériaux métalliques à l'aide du code d'éléments finis Abaqus®. La diffusion de l'hydrogène est pilotée par le gradient de la concentration d'hydrogène, et celui de la pression hydrostatique ( $P_H$ ). Le phénomène de piégeage de l'hydrogène par les dislocations est introduit dans l'équation de diffusion de l'hydrogène par l'intermédiaire de la déformation plastique équivalente.

La présence du terme de la pression hydrostatique dans l'équation de diffusion couplée a conduit au développement d'une procédure UMAT (qui permet de définir des comportements mécaniques), et l'équation de diffusion au développement d'une procédure UMATHHT.

Différents comportements mécaniques ont dû être implémentés dans des procédures UMAT. A l'échelle macroscopique, il s'agit du modèle de plasticité isotrope de type von Mises et du modèle d'endommagement ductile de Gurson. Ces implémentations par procédures utilisateurs ont été validées par comparaison avec celles disponibles dans Abaqus standard. Une procédure UMAT de plasticité cristalline a également été utilisée et modifiée dans le cadre de ce travail.

Le gradient de la pression hydrostatique est déterminé à l'incrément actuel du calcul. Il nécessite l'accès aux valeurs de la pression hydrostatique aux nœuds. Ces valeurs n'étant pas accessibles dans Abaqus, elles ont été calculées par l'extrapolation à partir de valeurs de  $P_H$  aux points d'intégration, en prenant en compte la contribution de tous les éléments qui contiennent un nœud commun. Cette façon de calcul a l'avantage de réduire la discontinuité du champ de gradient de la pression hydrostatique entre les éléments voisins.

La validation de ces procédures numériques ont été effectuées par comparaison avec des travaux de la littérature [1,2], en considérant que le faible écart constaté (moins de 3%) permettait de confirmer la fiabilité ainsi que la flexibilité de ces procédures.

La stratégie de couplage fort a permis la résolution du problème mécanique et problème de diffusion simultanément : les degrés de liberté mécanique et de diffusion sont cherchés dans le même incrément actuel de calcul.

Les procédures développées ont ensuite été utilisées pour simuler l'essai de pliage en U en 2D (cf. chapitre 4). Une étude paramétrique a été faite pour déterminer l'influence de différentes configurations sur le champ mécanique et les champs de concentration d'hydrogène, ainsi que l'effet de la loi d'écrouissage du matériau, des conditions limites en concentration de l'hydrogène et de la relation entre la population de l'hydrogène piégé  $C_T$  et celle de l'hydrogène diffusif  $C_L$ . Les résultats obtenus ont montré le rôle important de tous ces facteurs sur la diffusion de l'hydrogène, surtout la relation entre  $C_L$  et  $C_T$  ainsi que les conditions aux limites en concentration de l'hydrogène. Ces études de sensibilité numérique ont permis également de tester la flexibilité et la modularité des procédures numériques développées.

Enfin, l'interaction champ mécanique-diffusion de l'hydrogène a été étudiée à l'échelle de l'agrégat polycristallin. Des polycristaux 3D virtuels avec des grains d'orientation cristallographique aléatoire ont été générés à l'aide de partition de Voronoi et de scripts Python. Une attention particulière a été portée à la définition d'un VER polycristallin dans le



cadre des simulations par éléments finis. Le comportement élastoviscoplastique anisotrope du monocristal a été décrit à l'aide d'une procédure UMAT de la littérature, dont la performance a été améliorée. Le piégeage de l'hydrogène par la déformation plastique est représenté par le glissement cumulé à la place de la déformation plastique équivalente utilisée pour le cas isotrope. Pour prendre en compte le caractère polycristallin du matériau dans le cas de l'essai en U, simulé en 3D, un « submodeling » a été effectué dans la zone d'intérêt de l'échantillon vis-à-vis des risques de FPH. Les champs de déplacement et de concentration d'hydrogène diffusif dans le calcul mécanique de la configuration macroscopique ont alors été transférés comme conditions aux limites pour l'agrégat polycristallin. Les résultats montrent la capacité de ces outils numériques à simuler des distributions hétérogènes de concentration d'hydrogène induites par l'anisotropie de comportement cristallin, et ouvrent la voie aux confrontations expérimentales sur matériaux réels.

L'une des perspectives de ce travail de thèse réside dans l'application des développements numériques aux travaux expérimentaux en cours de développement au laboratoire, et qui portent sur des polycristaux de fer et/ou différents aciers. Les procédures numériques devraient pouvoir fournir dans un premier temps, des champs cinématiques et des caractérisations d'anisotropie, et éventuellement des caractérisations globales de concentrations d'hydrogène à l'aide de mesures comparatives de désorption. L'accès aux champs de concentration d'hydrogène nécessiterait par contre des collaborations extérieures.

Concernant les procédures numériques pour simuler le couplage plasticité-diffusion, il existe des points à améliorer :

- par rapport à l'implémentation numérique de modèle adopté pour modéliser le couplage mécanique- diffusion, on n'a considéré que des éléments quadrilatères linéaires avec 4 points d'intégration en 2D ou des éléments hexaédriques linéaires en 3D (8 points d'intégration). Ce fait limite le choix de type d'éléments dans le calcul numérique (on est obligé de passer par la procédure de Python pour diviser les éléments tétraédrique en hexaédriques -voir chapitre V-, ce qui génère des éléments hexaédriques dégénérés). On pourrait étendre cette implémentation pour d'autres types d'éléments. Pour cela, les fonctions d'interpolations d'un élément doivent être adaptées en fonction du nombre de points d'intégration.
- la précision du calcul de gradient de la pression hydrostatique nécessite des améliorations pour les éléments frontières : l'utilisation d'éléments finis quadratiques pourrait améliorer ce point.

Du point de vue de la modélisation, les limitations du modèle utilisé et des simulations numériques réalisées dans le présent travail peuvent suggérer de nouvelles perspectives :

- le modèle adopté pour la modélisation dans ce travail et dans les études bibliographiques (chapitre I) ne contient pas l'effet du transport de l'hydrogène par les dislocations, un phénomène qui a été mis en évidence dans des études expérimentales.
- une réflexion sur le rôle du glissement cumulé dans l'équation de couplage I.3.19 est indispensable pour améliorer les résultats obtenus à l'échelle polycristalline.

- de manière plus générale, l'anisotropie de la diffusion de l'hydrogène dans les polycristaux devrait être étudiée, tant sur le plan expérimental que sur le plan de la modélisation.
- la simulation numérique des interactions hydrogène-plasticité à l'échelle du polycristal doit s'accompagner également de la définition et de l'application-validation de critères de fragilisation par l'hydrogène à l'échelle microstructurale, ce qui laisse un grand champ de recherches à développer, tant sur le plan expérimental que numérique.

- [1] Y. Liang, et al., *Effect of hydrogen trapping on void growth and coalescence in metals and alloys*. Mechanics of Materials, 2008. **40**: p. 115-132.
- [2] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, et A. Bakker, *Hydrogen transport near a blunting crack tip*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999. **47**(4): p. 971-992.



## ANNEXE A : Algorithme de Newton-Raphson

L'algorithme de Newton-Raphson permet de résoudre un problème de recherche du 0 d'une fonction, en se basant sur une approche par itérative.

Soit une fonction  $f$ , dérivable, donc on recherche le 0. Le principe de l'algorithme de Newton-Raphson est de construire une suite  $x_n$  telle que  $\lim_{n \rightarrow +\infty} f(x_n) = 0$ . Cette suite se construit comme suit :

### 1. Initialisation :

Définition de  $x_0$  (point arbitraire en théorie, en pratique proche de la solution recherchée).

### 2. Itérative :

On suppose que la valeur de  $x_n$  est connue. On cherche donc la valeur de  $x_{n+1}$ .

On recherche  $x_{n+1}$  de telle manière à ce que  $f(x_{n+1})=0$ . En posant  $x_{n+1}=x_n + \Delta x$ , alors on peut effectuer un développement limité à l'ordre 1 et on obtient

$$f(x_n) + \Delta x f'(x_n) = 0, \quad (\text{A.9})$$

ou encore

$$\Delta x = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (\text{A.10})$$

On en déduit  $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$  (voir figure A.1).

### 3. Convergence

Si  $\Delta x_n \rightarrow 0$ , alors  $x_n \rightarrow x_l$  avec  $f(x_l)=0$ . En pratique, on définit une tolérance  $\varepsilon$ , et on définit alors la valeur de  $x_l$  par la valeur de l'indice  $n$  tel que  $|\Delta x_n| \leq \varepsilon$ .

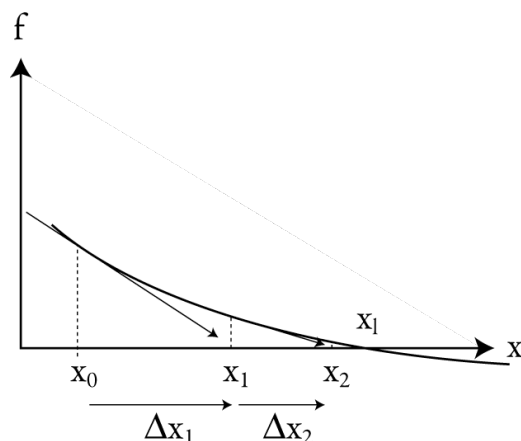


Figure A.1. Principe de l'algorithme de Newton-Raphson.

Pour les fonctions vectorielles, le principe est le même, mais l'incrément du vecteur  $\{x_n\}$  s'écrit

$$\{\Delta x_n\} = - \left[ \frac{\partial \{f\}}{\partial \{x\}} \right]^{-1} (\{x_{n-1}\}) \{f(\{x_{n-1}\})\}.$$

Il faut noter quelques limitations à ce schéma de résolution : si la fonction n'est pas monotone, le choix de  $x_0$  peut s'avérer primordial, surtout pour éviter que la solution converge dans des minimums locaux. De fait, il est préférable que  $x_0$  soit proche de  $x_1$ .

## ***ANNEXE B : Intégration explicite et implicite du comportement non linéaire.***

### *Schéma explicite*

On suppose que le système d'équation d'un modèle élastoplastique général à l'incrément n° i (ce qui correspond à l'instant t+Δt) est exprimé sous la forme :

$$\frac{dY}{dt} = F(Y, [\Delta\varepsilon], [\sigma]), \quad (\text{B.1})$$

où Y représente l'ensemble des variables internes du modèle, y compris la variation de la déformation plastique. Pour le schéma d'intégration explicite, la dérivée de Y à t+Δt ne dépend que des variables internes et des contraintes à l'incrément n° i-1 (ce qui correspond à l'instant t), et l'accroissement de la déformation plastique totale  $\Delta\varepsilon_i^n$ .

Si on intègre selon le schéma explicite d'Euler à l'ordre 1, on obtient :

$$Y_{t+\Delta t} = Y_t + F\left(Y_t, [\Delta\varepsilon]_i^n, [\sigma]_{i-1}\right) \Delta t \quad (\text{B.2})$$

Dans cette équation  $Y_{t+\Delta t}$  est bien défini car les fonctions sont toutes connues et calculées à l'instant t. Cette intégration explicite a l'avantage d'être simple, mais elle est conditionnellement stable car la précision de la solution dépend de la taille de l'incrément de temps Δt.

### *Schéma implicite*

Dans le schéma d'intégration implicite, la variation de Y à t+Δt dépend des variables internes et des contraintes à t+Δt, et l'accroissement de la déformation plastique totale  $\Delta\varepsilon_i^n$

On obtient de l'équation :

$$Y_{t+\Delta t} = Y_t + F\left(Y_{t+\Delta t}, [\Delta\varepsilon]_i^n, [\sigma]_i\right) \Delta t. \quad (\text{B.3})$$

L'équation B.3 équivaut à

$$f(\Delta Y_{t+\Delta t}) = 0, \quad (\text{B.4})$$

On est alors ramené à trouver le zéro de l'équation B.4. Pour ce faire, on a utilisé la méthode Newton-Raphson :

On initialise  $\Delta Y_{t+\Delta t}^0$ , puis on itère jusqu'à convergence

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \Delta Y_{t+\Delta t}^k} d(\Delta Y_{t+\Delta t}^k) = -f(\Delta Y_{t+\Delta t}^k) \\ \Delta Y_{t+\Delta t}^{k+1} = \Delta Y_{t+\Delta t}^k + d(\Delta Y_{t+\Delta t}^k) \end{cases}. \quad (\text{B.5})$$



## Résumé

Dans le cadre de l'étude du couplage entre la plasticité et les interactions de l'hydrogène avec les matériaux métalliques, l'objectif de ce travail de thèse est l'implémentation dans le code de calcul par éléments finis Abaqus© de la loi de diffusion de l'hydrogène couplée aux champs mécaniques, tenant compte notamment du piégeage dû à la déformation plastique. La stratégie d'implémentation retenue permet de résoudre simultanément les problèmes de diffusion et de mécanique ; elle s'est appuyée sur les travaux de la littérature, et a nécessité le développement de procédures en fortran 77, et en particulier, de procédures utilisateur UMAT et UMATHT permettant de définir respectivement le comportement mécanique, et un flux de matière. Ces procédures ont été confrontées avec succès à plusieurs cas de la littérature.

Les outils développés ont été appliqués à l'étude numérique d'un essai de pliage en U, utilisé pour la caractérisation de la rupture différée par fragilisation par l'hydrogène de tôles minces prédéformées plastiquement. Une étude paramétrique portant sur les conditions de l'essai, les conditions limites en hydrogène et la relation entre plasticité, hydrogène piégé et hydrogène diffusif a été menée.

Enfin, une transposition à l'échelle du polycristal 3D a été effectuée, en utilisant une procédure UMAT de comportement polycristallin modifiée. Une étude sur les paramètres constitutifs d'un Volume Élémentaire Représentatif a été réalisée, puis, une étude de l'essai en U à l'échelle du polycristal effectuée grâce à un transfert de conditions limites entre un calcul global et le VER, afin de simuler l'effet de l'anisotropie cristalline sur les champs de concentration d'hydrogène.

**Mots clés** : éléments finis, diffusion, hydrogène, plasticité, essai de pliage en U

---

## Abstract

In the framework of the coupling between plasticity and hydrogen interactions with the metallic material, the aim of this thesis is to implement in the finite element code Abaqus © the hydrogen diffusion law coupled with the mechanical fields, accounting particularly for the trapping caused by the plastic strain. The chosen implementation strategy allows to simultaneously solve the diffusion and mechanical problems. It is based on works from the literature and needs the development of procedures in fortran 77, in particular the user procedures UMAT and UMATHT allowing the definition of the mechanical behavior and the material flux respectively. These procedures were confronted with several cases in literature.

The developed procedures were applied to the numerical study of the U-bend test, used for characterizing the delayed cracking caused by hydrogen embrittlement. A parametric study on test conditions, boundary conditions on hydrogen and relationship between plasticity, trapped hydrogen, diffusive hydrogen was carried out.

Finally, a transposition to the scale of a 3D polycrystal was performed using a modified UMAT procedure with crystalline elastoviscoplasticity. A numerical study on the relevant parameters for defining a Representative Volume Element was carried out. Then, the simulation of a virtual u-bend test at the polycrystal scale was performed thanks to a boundary condition transfer between global calculation and the RVE, in order to simulate the effect of crystal anisotropy on hydrogen concentration field.

**Keywords**: finite element, diffusion, hydrogen, plasticity, U-bend test.