

Influence de la concentration locale d'hydrogène sur les paramètres d'un modèle de zone cohésive adapté aux chargements cycliques

C. MORICONT^a, G. HENAFF^a, D. HALM^a

a. Institut P' (UPR 3346) – CNRS – ENSMA – Université de Poitiers, département Physique et Mécanique des Matériaux, ENSMA, 1 Avenue Clément Ader, BP40109, 86961 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL, FRANCE

Résumé :

Dans un environnement hydrogénant, on observe un abaissement de la résistance à la fissuration en fatigue des métaux par rapport à celle observée dans un environnement inerte. L'objectif de cette étude est de développer une modélisation de ces phénomènes complexes, que l'on confrontera ultérieurement aux résultats d'essais sous haute pression d'hydrogène menés au laboratoire. Pour ce faire, un modèle de fissuration utilisant une méthode à zone cohésive a été implanté dans le code de calcul ABAQUS.

Abstract :

Experimental studies indicate a deleterious influence of a hydrogenous environment on the fatigue crack propagation resistance of metallic materials. This study aims at creating a model of the complex interactions between hydrogen and deformation, which will be compared later on with the results of experimental fatigue crack propagation under high-pressure hydrogen. With this respect, a damage model using a cohesive zone model was implemented in ABAQUS.

Mots clefs : endommagement cyclique, hydrogène, simulation, modèle à zone cohésive

1 Introduction

Au moment où l'un des plus grands défis de l'humanité est de trouver de nouvelles sources d'énergie, les scientifiques envisagent d'utiliser l'hydrogène comme vecteur énergétique. Dans cette optique, il est crucial d'étudier les interactions entre l'hydrogène et la matière, afin de maîtriser les risques du stockage et du transport de l'hydrogène. En particulier, les essais expérimentaux mettent en évidence l'influence néfaste de l'hydrogène sur la résistance à la fissuration de fatigue des métaux. Cet article présente une étude en cours dont l'objectif est de développer un outil numérique capable de modéliser la propagation de fissure dans les structures métalliques soumises à un chargement cyclique en atmosphère hydrogénée.

Dans la littérature, il existe de multiples possibilités pour modéliser l'endommagement en pointe de fissure. On peut citer les approches globales, dont les méthodes de l'intégrale J et la méthode CTOD, les modèles micromécaniques comme le modèle de Gurson [1], les modèles macroscopiques de la Mécanique de l'Endommagement (Lemaitre [2], Bonora [3], Hamon et al [4]) et les approches numériques plus récentes, telles que la Méthode des Eléments Finis Etendus (X-FEM) développée par Belytschko et al [5], et les modèles de zone cohésive (MZC) proposés à l'origine par Dugdale [6] et Barenblatt [7]. Les MZC décrivent la zone de fond de fissure par une relation entre le vecteur des contraintes cohésives et le saut de déplacement entre les lèvres de la fissure, appelée loi de traction-séparation. Les MZC offrent l'avantage d'être souples, dans la mesure où ils ont la faculté de pouvoir s'adapter au type de problème que l'on souhaite modéliser. En revanche, l'utilisation d'un modèle de zone cohésive suppose en général de connaître le trajet de fissure. La littérature montre que les lois de traction-séparation les plus utilisées sont les lois linéaire [8], multi-linéaire [9], polynomiale [10] et exponentielle [11]. En général, ces lois de traction-séparation ne sont pas adaptées aux chargements cycliques.

Dans l'étude présentée ici, une loi de traction-séparation spécifique a été développée afin de modéliser la

baisse progressive de rigidité lors d'un chargement cyclique. Cet article détaille les principes de la construction du modèle. Une attention particulière a été portée au développement de la loi de traction-séparation dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles. Par ailleurs, l'influence néfaste de l'hydrogène sur la propagation de fissure de fatigue [12] est prise en compte par la dépendance des paramètres de la loi de traction-séparation du taux de couverture d'hydrogène [13]. Cet aspect sera détaillé dans le Paragraphe 2. Le modèle de zone cohésive est implémenté dans le logiciel d'éléments finis ABAQUS via une subroutine UEL en profitant de l'analogie entre les structures des équations de la chaleur et de diffusion massique : le couplage entre le comportement mécanique du matériau et la diffusion de l'hydrogène est implémenté par la procédure couplée mécanique-thermique disponible dans ABAQUS. Plus de détails seront donnés dans le Paragraphe 3.

2 Loi de traction-séparation 2D adaptée aux chargements de fatigue et influence de l'hydrogène

Les versions récentes d'ABAQUS proposent une vaste bibliothèque d'éléments, parmi lesquels on trouve des éléments cohésifs. Toutefois ces éléments ne permettent qu'une évolution de l'endommagement linéaire ou exponentielle, et ne supportent pas de chargement cyclique. En conséquence, une loi de traction-séparation spécifique permettant de modéliser l'endommagement sous chargement cyclique a été développée et implémentée dans ABAQUS par une subroutine UEL.

Les modèles à zone cohésive décrivent la zone de fond de fissure – appelée « process zone » – par une relation locale entre le vecteur des contraintes cohésives et le saut de déplacement entre les lèvres de la fissure, c'est-à-dire la différence entre les déplacements des lèvres supérieure et inférieure de la fissure. Dans un contexte bidimensionnel, le saut de déplacement est défini par ses composantes normale (δ_n) et tangentielle (δ_t).

La construction de la loi de traction-séparation s'appuie sur les principes de la Thermodynamique des Processus Irréversibles. On introduit tout d'abord un potentiel thermodynamique φ :

$$\varphi = \frac{1}{2}k(1-D)\langle\delta_n\rangle^2 + \frac{1}{2}k_{comp}\langle-\delta_n\rangle^2 + \frac{1}{2}k_t\delta_t^2 \quad (1)$$

où $\langle\dots\rangle$ représente la partie positive. Le scalaire D est la variable interne d'endommagement, comprise entre 0 et 1. Les constantes k , k_{comp} et k_t représentent respectivement la rigidité initiale en traction, la rigidité en compression (de valeur élevée pour éviter l'interpénétration de la matière) et la rigidité tangentielle. Nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas d'endommagement en cisaillement, car nous nous intéressons aux chargements de mode I. Le vecteur des contraintes cohésives $\vec{T}(T_n, T_t)$ dérive du potentiel φ :

$$T_n = \frac{\partial\varphi}{\partial\delta_n} = k(1-D)\langle\delta_n\rangle + k_{comp}\langle-\delta_n\rangle \quad (2)$$

$$T_t = \frac{\partial\varphi}{\partial\delta_t} = k_t\delta_t \quad (3)$$

Le seuil d'endommagement $f=0$ tient compte de l'histoire du chargement. Il est choisi de la manière suivante :

$$f = \int_0^t \langle\dot{Y}\rangle(1-D)d\tau - (c + mD) \quad (4)$$

où c et m sont des constantes, respectivement liées à la limite initiale d'endommagement et à l'évolution de la variable d'endommagement D . La force thermodynamique associée à D , notée Y , est définie de la manière suivante :

$$Y = -\frac{\partial\varphi}{\partial D} = \frac{1}{2}k\langle\delta_n\rangle^2 \quad (5)$$

L'expression de l'évolution de D est obtenue à partir de l'équation de cohérence $\dot{f}=0$, qui signifie qu'en chargement endommageant, l'état mécanique est astreint à vérifier $f=0$ à chaque instant :

$$\dot{D} = \frac{k}{m} (1-D) \langle \delta_n \rangle \langle \dot{\delta}_n \rangle \quad (6)$$

L'équation 6 montre que la variable d'endommagement augmente uniquement lorsque la composante normale du saut de déplacement δ_n et sa dérivée par rapport au temps sont strictement positives. La non négativité de \dot{D} , assurée par (6) impose une évolution de l'endommagement lors des phases de chargement, (à condition que le seuil soit atteint), alors que lors des décharges, la variable D n'évolue pas. La figure 1 représente l'évolution de la composante normale du vecteur des contraintes cohésives T_n en fonction de la composante normale du saut de déplacement δ_n sous chargements monotone et cyclique à amplitude de saut de déplacement constante $\Delta\delta_{imp}$. Sur cette même figure, on observe que la composante normale du vecteur des contraintes diminue au cours du chargement cyclique. Les valeurs des paramètres utilisés pour tracer les courbes de la figure 1 sont une première approximation ; ultérieurement, une méthode d'identification permettra de déterminer des valeurs plus précises.

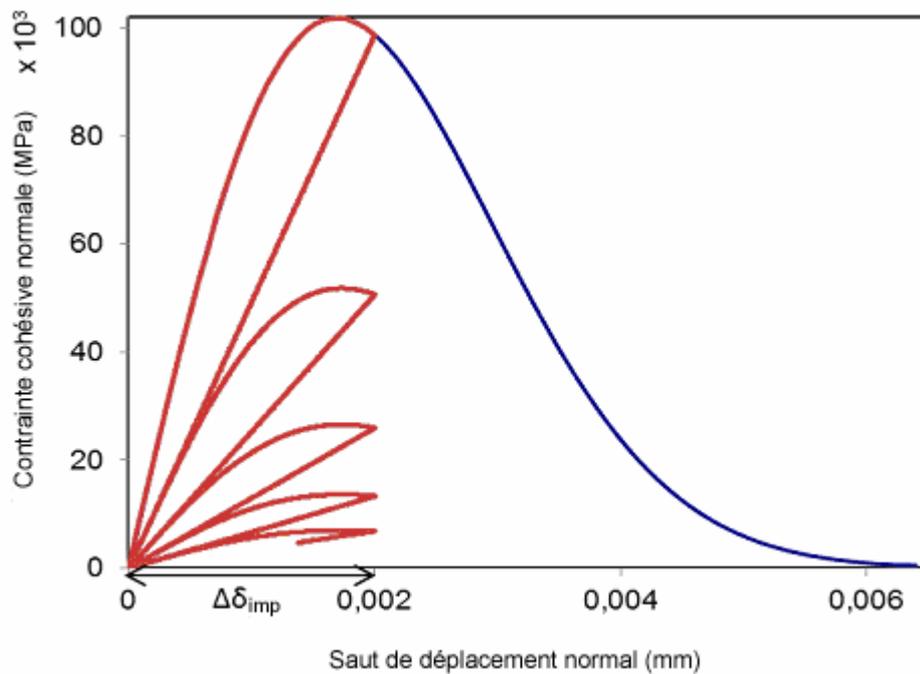


FIG. 1 – Loi de traction-séparation normale sous chargement monotone (en bleu) et chargement cyclique (en rouge), avec $k = 10^8$ MPa/mm, $m = 300$ N et $c = 5$ N.

Pour prendre en compte l'influence de l'hydrogène sur la propagation de fissure en fatigue, les paramètres k et m de la loi de traction-séparation sont supposés dépendre du taux de couverture θ [13], compris en 0 et 1, et fonction de la concentration locale en hydrogène dans le matériau C_H et de la différence d'énergie libre de Gibbs entre l'interface et le matériau Δg_b^0 :

$$\theta = \frac{C_H}{C_H + \exp\left(\frac{-\Delta g_b^0}{RT}\right)} \quad (7)$$

Les expériences de propagation de fissures de fatigue sous hydrogène indiquent une accélération de la vitesse de fissuration par rapport à un essai sous vide. Partant de ce constat, on suppose que l'augmentation du taux de couverture entraîne un abaissement de la rigidité dans la « process zone ». Par conséquent, nous faisons l'hypothèse que l'augmentation du taux de couverture entraîne une diminution des paramètres k et m de la loi de traction-séparation. En première approche, on suppose que le taux de couverture influence différemment les paramètres k et m . Les relations suivantes sont choisies :

$$k(\theta) = (1 - \theta)k(0) \quad (8)$$

$$m(\theta) = (1 - \theta)^2 m(0) \quad (9)$$

où $k(0)$ et $m(0)$ représentent les valeurs de k et m en l'absence d'hydrogène. La figure 2 illustre l'influence du taux de couverture sur la loi de traction-séparation normale en chargement monotone. On remarque que lorsque le taux de couverture augmente, l'adoucissement commence pour un saut de déplacement normal plus faible. De plus, la valeur maximale de la composante normale du vecteur des contraintes diminue, et on observe que la rupture a lieu pour une valeur plus faible du saut de déplacement normal.

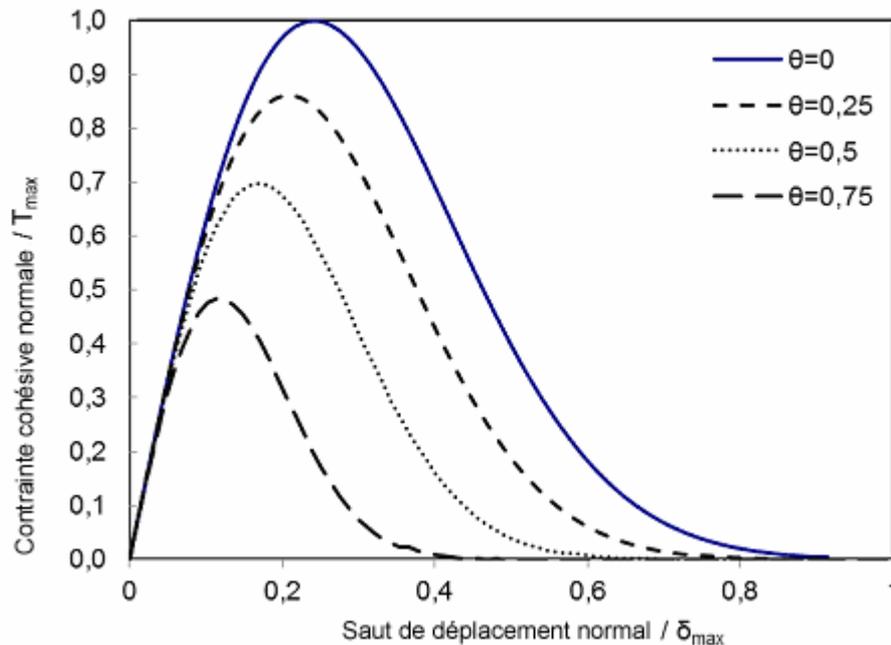


FIG. 2 – Loi de traction-séparation normale sous chargement monotone pour différentes valeurs du taux de couverture, normalisée par rapport au maximum de la contrainte cohésive normale T_{\max} et au maximum du saut de déplacement δ_{\max} .

3 Implémentation de l'équation de diffusion de l'hydrogène

Le logiciel d'éléments finis ABAQUS ne dispose pas de procédure de calcul couplé mécanique – diffusion. Toutefois, l'équation de diffusion massique est analogue à l'équation de la chaleur. Le Tableau 1 dresse le parallèle entre la température et la concentration d'hydrogène, ainsi qu'entre le flux de chaleur et le flux de masse.

	Equation de la chaleur	Equation de diffusion de la masse
	$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_q + r_q = 0$	$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_m + r_m = 0$
Degré de liberté (unité)	Température T (K)	Concentration d'hydrogène C (g/mol)
Flux de chaleur/masse (unité)	\vec{J}_q (W/m ²)	\vec{J}_m (g.m/mol/s)
Terme source (unité)	r_q (W/m ³)	r_m (g/mol/s)

Tableau 1 – Parallèle entre l'équation de la chaleur et l'équation de diffusion de la masse

Le couplage entre comportement mécanique et diffusion de l'hydrogène peut être modélisé à l'aide d'un calcul « coupled temperature-displacement », disponible dans ABAQUS. La subroutine UMATHT, qui permet à l'utilisateur de définir le comportement thermique de son matériau, peut donc être utilisée pour implémenter l'équation de diffusion de l'hydrogène. Dans cette étude, la diffusion de l'hydrogène dans le matériau est supposée suivre l'équation proposée par Liang et Sofronis [14], détaillée ci-dessous (équations 10 et 11). Soit C_L la concentration d'hydrogène dans les sites interstitiels et C_T la concentration

d'hydrogène dans les sites de piégeage de l'hydrogène. La concentration d'hydrogène totale C est définie par $C = C_L + C_T$. L'équation de conservation de l'hydrogène s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \{C_L + C_T\} dV + \int_S \bar{J}_m \cdot \bar{n} dS = 0. \quad (10)$$

\bar{J}_m est le flux d'hydrogène, défini par une loi de Fick avec influence de la contrainte hydrostatique σ_h :

$$\bar{J}_m = -D_L \bar{\nabla} C_L + \frac{D_L C_L V_H}{RT} \bar{\nabla} \sigma_h \quad (11)$$

Dans l'équation 11, D_L est le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans les sites interstitiels, V_H est le volume molaire partiel de l'hydrogène, σ_h est la contrainte hydrostatique, R est la constante des gaz parfaits et T est la température.

Comme le montre l'équation 11, la diffusion de l'hydrogène est pilotée par le gradient de concentration d'hydrogène et le gradient de contrainte hydrostatique. Le gradient de concentration est disponible dans la subroutine UMATHT, tandis que le gradient de contrainte hydrostatique est calculé dans une subroutine USDFLD, en interpolant la contrainte hydrostatique entre les points d'intégration de chaque élément.

Enfin, pour que l'hydrogène puisse diffuser dans les éléments cohésifs, l'équation de diffusion de l'hydrogène est implémentée dans la subroutine UEL avec une loi de Fick.

4 Conclusion

Un modèle de la propagation de fissures de fatigue assistée par l'hydrogène dans les métaux a été réalisé à l'aide du logiciel d'éléments finis ABAQUS. Un élément cohésif avec une loi de traction-séparation spécifique aux chargements cycliques a été développé, et a été implémenté dans une subroutine UEL. Les paramètres de la loi de traction-séparation dépendent de la concentration locale d'hydrogène. Dans le matériau, un step « coupled temperature-displacement » a permis de modéliser le couplage entre le comportement mécanique et la diffusion de l'hydrogène.

Les premiers résultats de la simulation de la propagation par la modélisation présentée ici seront confrontés aux résultats de vitesse de fissuration en fatigue observée expérimentalement [15].

References

- [1] Gurson A., Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: part I. Yield criteria and flow rules for porous ductile media, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 99, 2-15, 1977.
- [2] Lemaitre J., A continuous damage mechanics models for ductile fracture, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 107, 83-89, 1985.
- [3] Bonora N., A non-linear CDM model for ductile failure, *Engineering Fracture Mechanics*, 58, 11-28, 1997.
- [4] Hamon F., Henaff G., Halm D., Gueguen M., Billaudeau T., A damage model for fatigue crack propagation from moderate to high ΔK levels, à paraître.
- [5] Belytschko T., Dolbow J., Moes N., A finite element method for crack growth without remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46, 131-150, 1999.
- [6] Dugdale D., Yielding of steel sheets containing slits, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8, 100-104, 1960.
- [7] Barenblatt G., The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture, *Advances in Applied Mechanics*, 20, 1962.
- [8] Camacho G.T., Ortiz M., Computational modelling of impact damage in brittle materials, *International Journal of Solids and Structures*, 33, 2899-2938, 1996.
- [9] Tvergaard V., Hutchinson J., The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids, *J Mech Phys Solids*, 40, 1377-1397, 1992.
- [10] Tvergaard V., Effect of fiber debonding in a whisker-reinforced metal, *Advances Engineering Materials*, 125, 203-213, 1990.
- [11] Xu X., Needleman A., Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1, 111-132, 1993.

- [12] Cialone H.J., Holbrook J.H., Effects of gaseous hydrogen on fatigue crack growth in pipeline steel, Metallurgical Transactions A, 16A, 115-122, 1985.
- [13] Olden V., Thaulow C., Johnsen R., Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels, Materials and Design, 29, 1934-1948, 2008.
- [14] Liang Y., Sofronis P., Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces, J Mech Phys Solids, 51, 1509-31, 2003.
- [15] Sun Z., Moriconi C., Hamon F., Benoit G., Hénaff G., Fatigue crack propagation under gaseous hydrogen in a precipitation-hardened martensitic stainless steel, à paraître.