

Modélisation et simulation numérique de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux à haute pression

G. BILOTTA ^a, C. MORICONI ^a, G. HENAFF ^a, D. HALM ^a, M. ARZAGHI ^a

*a. Institut P' (UPR 3346) – ISAE – ENSMA – Département Physique et Mécanique des Matériaux,
1 Avenue Clément Ader, BP40109, 86961 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL, FRANCE*

Résumé:

Dans cette étude on s'intéresse à l'effet de l'hydrogène gazeux sur la résistance à la fissuration d'une classe d'aciers inoxydables. L'objectif principal est la modélisation de la propagation des fissures de fatigue assistée par l'hydrogène.

Pour ce faire, un modèle de zone cohésive dédiée à la fissuration sous chargement cyclique a été implanté dans le code de calcul ABAQUS. On formule une loi de traction-séparation spécifique, apte à décrire la dégradation progressive des contraintes cohésives sous chargement cyclique, et sensible à la présence d'hydrogène. Le couplage entre comportement mécanique et diffusion de l'hydrogène peut être modélisé à l'aide d'un calcul couplé température - déplacement, disponible dans ABAQUS.

Les simulations sont comparées à des essais de propagation de fissure en fatigue réalisés sur un acier inoxydable martensitique 15-5PH. Elles montrent qu'on est capable de prévoir une forte diminution de la résistance à la fissuration en présence d'hydrogène.

Abstract:

In this study we have focused on the hydrogen embrittlement of a precipitation-hardened martensitic stainless steel. Based on the experimental results, a model was developed to predict the fatigue crack propagation assisted by hydrogen.

For this purpose, a cohesive zone model dedicated to cracking under cyclic loading was implemented in the finite element software ABAQUS. A specific traction-separation law sensitive to the presence of hydrogen was formulated in order to describe the gradual degradation of cohesive stresses under cyclic loading. The coupling between mechanical behavior and hydrogen diffusion was modeled using a coupled temperature - displacement calculation available in ABAQUS software.

Comparison of simulation results with crack propagation curves showed that the cohesive zone model with the developed TSL was able to predict qualitatively the detrimental influence of hydrogen on the propagation rate of fatigue cracks.

Mots clefs : hydrogène, fatigue, simulation numérique, modèle à zone cohésive, loi de traction-séparation

1 Introduction

Les perspectives de pénurie d'énergie fossile comme les considérations environnementales amènent à envisager l'hydrogène comme un possible vecteur énergétique. Or il est bien établi que l'hydrogène est susceptible d'accélérer les cinétiques de propagation de défauts de type fissure. Cette problématique rejoint par ailleurs des enjeux scientifiques fondamentaux liés plus globalement à la dégradation de la résistance à la fissuration des métaux en milieu hydrogénéant.

Dans la littérature [1], il existe de multiples possibilités pour modéliser l'endommagement en pointe de fissure. Entre autres, les modèles à zone cohésive (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 [2], multi-linéaire [3], polynomiale [4] et exponentielle [5]. A de rares exceptions [6], 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 et dans le cas de la présence d'hydrogène. L'influence néfaste de l'hydrogène sur la propagation de fissure de fatigue [7] est prise en compte par la dépendance des paramètres de la loi de traction-séparation au taux de couverture d'hydrogène [8].

Le modèle de zone cohésive est implémenté dans le logiciel d'éléments finis ABAQUS via une sous-routine UEL. En profitant de l'analogie entre les structures des équations de la chaleur et de diffusion massique, on peut utiliser une procédure couplée mécanique-diffusion disponible dans ABAQUS, qui permet d'implémenter le couplage entre le comportement mécanique du matériau et la diffusion de l'hydrogène.

2 Modèle à zone cohésive avec loi de traction-séparation influencée par l'hydrogène

L'objectif premier de notre étude est de développer un outil robuste, simple et prédictif de la tenue en fatigue des matériaux métalliques en présence de fissures et sous atmosphère d'hydrogène gazeux.

Par sa simplicité et sa cohérence avec les mécanismes d'endommagement, une approche par zone cohésive a été choisie. Certains auteurs [9, 10] ont montré que l'énergie de séparation (représentée par l'aire sous la courbe de traction-séparation) évolue en fonction du taux de recouvrement en hydrogène, et que l'implémentation de cette dépendance dans un MZC permet de modéliser qualitativement l'influence néfaste de l'hydrogène sur la tenue mécanique des matériaux métalliques. Plusieurs travaux utilisent ce type de modèle pour simuler avec succès la propagation de fissures de fatigue dans différents types de matériaux [6, 11].

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 (\vec{T}) et le saut de déplacement entre les lèvres de la fissure ($\vec{\delta}$), c'est-à-dire la différence entre les déplacements des lèvres supérieure et inférieure de la fissure. Par la suite, les vecteurs \vec{T} et $\vec{\delta}$ seront exprimés dans la base locale (\vec{n}, \vec{t}) associé à l'élément cohésif.

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 :

$$\phi = \frac{1}{2}k_n(1-D)\frac{\langle\delta_n\rangle^2}{\delta_0} + \frac{1}{2}k_{comp}\frac{\langle-\delta_n\rangle^2}{\delta_0} + \frac{1}{2}k_t\frac{\delta_t^2}{\delta_0} \quad (1)$$

où $\langle \dots \rangle$ représente la partie positive. 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.

L'expression du vecteur des contraintes cohésives est obtenue par dérivation de ϕ par rapport à $\vec{\delta}$.

Le scalaire D est la variable interne d'endommagement, comprise entre 0 (état initial) et 1 (état complètement dégradé). L'endommagement global est l'assemblage des contributions monotone et cyclique, qui ont chacune une cinétique propre. Nous allons nous inspirer de l'approche de Roe et Siegmund [11], qui ont utilisé une variable d'endommagement définie comme la plus élevée des deux contributions, monotone et cyclique.

$$D(t) = \max(D_m(t), D_C(t)) \quad (2)$$

Les endommagements D_m et D_C évoluent indépendamment l'un de l'autre; leurs évolutions sont déterminées par deux seuils distincts.

L'évolution de l'endommagement cyclique D_C est déterminée par le seuil $f_C=0$ exprimé par la relation suivante:

$$f_C = \int_0^t \langle \dot{Y} \rangle (1 - D_C)^{n_C} d\tau - (C_C + m_C D_C) = 0 \quad (3)$$

où Y est la force thermodynamique associée à l'endommagement définie par $Y = -\frac{\partial \phi}{\partial D}$. L'objectif

fixé est de formuler dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles un seuil d'endommagement qui permette une évolution sous chargement cyclique, tout en conservant un nombre restreint de paramètres. Selon la relation précédente, il ne peut y avoir évolution de la variable cyclique que si la dérivée \dot{Y} est strictement positive; cela équivaut à $\delta_n > 0$ (l'élément est sollicité en traction) et $\dot{\delta}_n > 0$ (montée en charge). L'utilisation d'une intégrale sur le temps permet de prendre en compte l'histoire du chargement. L'équation précédente fait intervenir trois paramètres, C_C , m_C et n_C , qui, respectivement, représente la limite d'élasticité initiale, contrôle l'énergie de séparation, et permet de modifier l'énergie de séparation sans modifier de façon significative la valeur maximale de la contrainte cohésive T_{max} .

Tant que le seuil n'est pas atteint ($f_C < 0$), la contribution D_C n'évolue pas. Lorsque que le seuil est atteint ($f_C = 0$), l'évolution de l'endommagement cyclique peut être déterminée à partir de la relation de cohérence $\dot{f}_C = 0$:

$$\dot{D}_C = \frac{k_n}{m_C} (1 - D_C)^{n_C} \langle \dot{\delta}_n \rangle \frac{\delta_n}{\delta_0} \quad (4)$$

où δ_0 est un paramètre permettant d'adimensionner l'expression de \dot{D}_C . L'évolution de la variable monotone D_m est déterminée par la fonction seuil f_m .

$$f_m = \int_0^t \dot{Y}_{max} (1 - D_m)^{n_m} d\tau - (C_m + m_m D_m) = 0 \quad (5)$$

Dans le cas monotone, on suppose que c'est la valeur maximale Y_{max} de Y qui pilote l'évolution de l'endommagement. Tant que le seuil n'est pas atteint ($f_m < 0$), la contribution D_m n'évolue pas. Lorsque que le seuil est atteint ($f_m = 0$), l'évolution de l'endommagement monotone est déterminée à partir de la relation de cohérence $\dot{f}_m = 0$:

$$\dot{D}_m = \frac{k_n}{m_m} (1 - D_m)^{n_m} \delta_{n,max} \frac{\delta_{n,max}}{\delta_0} \quad (6)$$

L'expression choisie pour f_m permet de relier l'évolution de l'endommagement monotone au déplacement normal maximal subi au cours du chargement, ainsi qu'à sa vitesse. Pour récapituler, l'évolution de la variable d'endommagement est donnée par:

$$\begin{aligned} \dot{D} &= \dot{D}_m & \text{si } D_m \geq D_C \\ \dot{D} &= \dot{D}_C & \text{si } D_C \geq D_m \end{aligned} \quad (7)$$

La loi de traction-séparation développée permet de représenter la dégradation progressive du matériau sous chargement cyclique. Afin de représenter l'influence néfaste de l'hydrogène sur la tenue en fatigue de l'acier étudié, il est nécessaire d'ajouter une dépendance des paramètres de la TSL vis-à-vis de la concentration locale en hydrogène. La corrélation de Serebrinsky et al. [9] exprime la diminution de l'énergie de séparation $E_{rupt,m}$ sous chargement monotone en présence d'hydrogène en fonction du taux de recouvrement :

$$\frac{E_{rupt,m}(\theta)}{E_{rupt,m}(0)} = 1 - 1,0467\theta + 0,1687\theta^2 = f(\theta) \quad (8)$$

où (θ) et (0) signifient que la quantité est respectivement calculée en présence d'hydrogène et sans hydrogène. Pour que l'ouverture critique soit indépendante de la valeur de θ , l'évolution de D en fonction de l'ouverture normale δ_n (contributions monotone et cyclique) doit être indépendante de θ . Cette condition permet d'écrire les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} n_m(\theta) &= n_m(0) \\ n_c(\theta) &= n_c(0) \end{aligned} \quad (9)$$

La corrélation de Serebrinsky et al. [17] et l'hypothèse de l'insensibilité de l'ouverture critique à la présence d'hydrogène ont permis d'exprimer les paramètres du modèle en fonction de θ :

$$\frac{k_n(\theta)}{k_n(0)} = \frac{m_m(\theta)}{m_m(0)} = \frac{m_c(\theta)}{m_c(0)} = \frac{C_m(\theta)}{C_m(0)} = \frac{C_c(\theta)}{C_c(0)} = f(\theta) \quad (10)$$

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 couplage entre comportement mécanique et diffusion de l'hydrogène peut être modélisé à l'aide d'un calcul "coupled temperature-displacement", disponible dans ABAQUS. Dans cette étude, la diffusion de l'hydrogène dans le matériau est supposée suivre l'équation proposée par Liang et Sofronis [12], faisant intervenir, en plus de la diffusion de Fick, un terme piloté par le gradient de la contrainte hydrostatique.

3 Résultats

Cette partie présente les simulations de la propagation des fissures de fatigue dans l'acier inoxydable martensitique 15-5PH en atmosphère d'hydrogène gazeux [13]. Les simulations éléments finis visent à reproduire le comportement d'une demi-éprouvette CT 40 pré-fissurée sur laquelle on applique un chargement tel que $\Delta K=10, 15$ ou $20 \text{ MPa}\sqrt{m}$, sous différentes pressions d'hydrogène. Une couche d'éléments cohésifs est placée le long du trajet de fissure, sur toute la largeur de l'éprouvette. La propagation de la fissure se produit par rupture de l'élément cohésif en fond de fissure lorsque l'endommagement atteint une valeur critique. Les paramètres de la loi de traction-séparation utilisés pour ces simulations ont été identifiés à partir de la courbe de propagation dans l'acier 15-5PH sous air.

Pour chaque valeur de ΔK (à rapport de charge $R=0,7$ fixé), une simulation de propagation de fissure sous chargement cyclique est réalisée, et la vitesse de propagation de fissure da/dN est déterminée à partir de l'évolution de la longueur de la fissure en fonction du nombre de cycles. Le comportement plastique cyclique du matériau est modélisé par une loi élastoplastique à écrouissage cinématique non-linéaire, supposée insensible à la présence d'hydrogène.

La figure 1 présente les courbes donnant l'évolution de la longueur de fissure a en fonction du nombre de cycles N , pour les simulations aux pressions de 0.09 MPa et 9 MPa d'hydrogène gazeux et à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz, pour différents niveaux de ΔK initiaux (10, 15 et 20 $MPa\sqrt{m}$) [13].

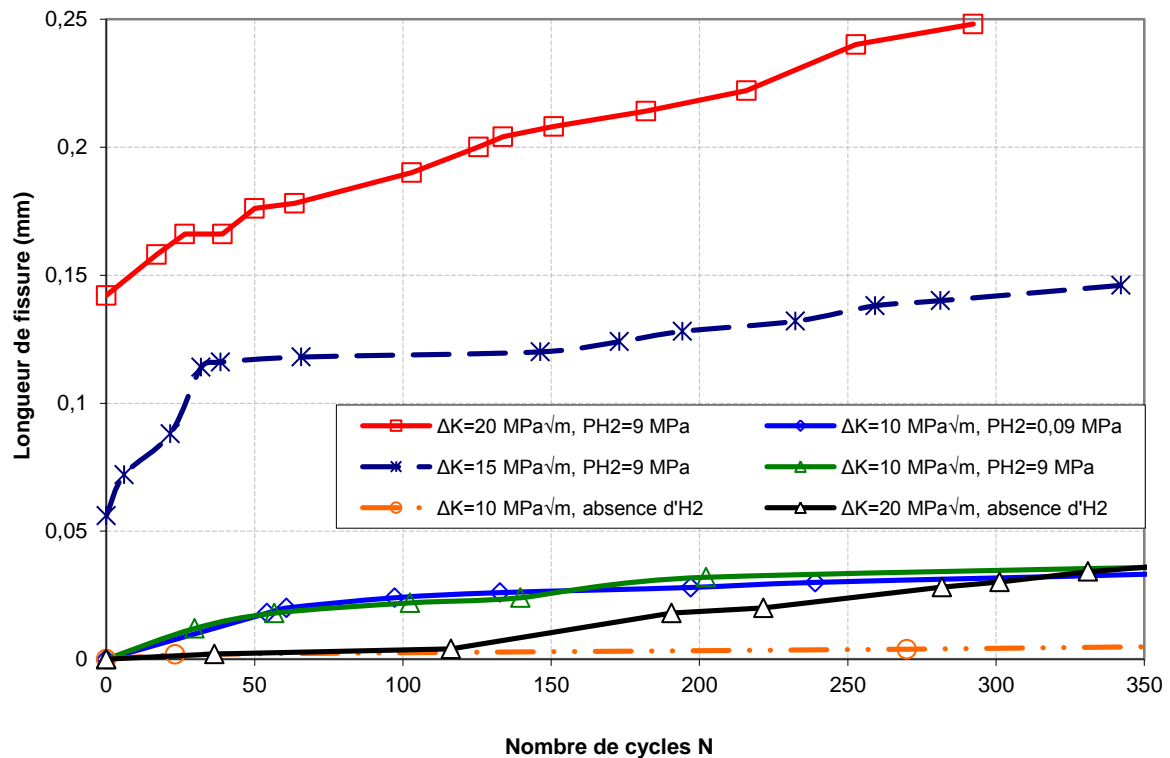


FIG. 1 - Simulations de propagation de fissure de fatigue pour différentes pression d'hydrogène et en l'absence d'hydrogène à un rapport de charge $R=0.7$, à la fréquence cyclique de 20 Hz et pour différents niveaux de ΔK (10, 15 et 20 $MPa\sqrt{m}$)

La comparaison des courbes simulées en présence et en l'absence d'hydrogène pour les niveaux de ΔK de 10 et 20 $MPa\sqrt{m}$ indique que la présence d'hydrogène entraîne un abaissement de la résistance à la fissuration du modèle. Par ailleurs, on remarque que plus le niveau de ΔK est élevé, plus la propagation de la fissure sous chargement cyclique est rapide.

Une augmentation des vitesses de propagation, d'un rapport 2,5 par rapport à l'absence d'H₂ et indépendante de la pression d'H₂ entre 0,09 et 9 MPa, a été observée pour des niveaux de ΔK de 10 à 20 $MPa\sqrt{m}$.

La figure 1 révèle que la vitesse de propagation de fissure à haute fréquence (20 Hz) semble indépendante de la valeur de la pression dans l'intervalle étudié (0,09 et 9 MPa d'H₂) pour un ΔK de 10 $MPa\sqrt{m}$.

L'effet de l'hydrogène dans les simulations de propagation de fissure de fatigue est cohérent avec les observations expérimentales de l'influence de l'hydrogène à faible pression (0,09 MPa) sur les vitesses de propagation. En revanche, le modèle sous-estime la perte drastique de résistance à la fissuration observée à haute pression (9 MPa).

Dans le futur, il pourrait être intéressant d'étoffer le modèle en tenant compte d'autres mécanismes. Par exemple, concernant le transport de l'hydrogène, il serait intéressant d'ajouter la possibilité du transport de l'hydrogène par les dislocations mobiles, et de distinguer éventuellement différents types de piégeage. Par ailleurs, pour modéliser les mécanismes AIDE et/ou HELP, l'effet adoucissant (ou durcissant, suivant le matériau) de l'hydrogène sur le comportement mécanique du matériau pourrait être ajouté.

References

- [1] Lynch S.P., Mechanisms of hydrogen assisted cracking - A review. In: Moody NR, Thompson AW, Ricker RE, Was GW, Jones RH, Hydrogen effects on material behaviour and corrosion deformation interactions, TMS, 2003, p. 449-466.
- [2] Camacho G.T., Ortiz M., Computational modelling of impact damage in brittle materials, *International Journal of Solids and Structures*, 33, 2899-2938, 1996.
- [3] Tvergaard V., Hutchinson J., The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40, 1377-1397, 1992.
- [4] Tvergaard V., Effect of fiber debonding in a whisker-reinforced metal, *Advances Engineering Materials*, 125, 203-213, 1990.
- [5] 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.
- [6] Bouvard J., Chaboche J., Feyelet F., Gallerneau F., A cohesive zone model for fatigue and creep-fatigue crack growth in single crystal superalloys, *International Journal of Fatigue*, vol. 31, no. 5, p. 868-879, 2009.
- [7] Cialone H.J., Holbrook J.H., Effects of gaseous hydrogen on fatigue crack growth in pipeline steel, *Metallurgical Transactions A*, 16A, 115-122, 1985.
- [8] 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.
- [9] S. Serebrinsky, E. Carteret M. Ortiz, A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 52, no. 10, p. 2403-2430, 2004.
- [10] V. Olden, C. Thaulowet, R. Johnsen, Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels, *Materials & Design*, vol. 29, no. 10, p. 1934-1948, 2008.
- [11] K. Roe et T. Siegmund, An irreversible cohesive zone model for interface fatigue crack growth simulation, *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 70, no. 2, p. 209-232, 2003.
- [12] Liang Y., Sofronis P., Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51, 1509-31, 2003.
- [13] Moriconi C., "Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques". Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2012.