



Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques

Clara Moriconi

► To cite this version:

Clara Moriconi. Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques. Matériaux. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2012. Français. NNT : 2012ESMA0023 . tel-00784983

HAL Id: tel-00784983

<https://theses.hal.science/tel-00784983>

Submitted on 5 Feb 2013

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

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

THESE

Pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole doctorale :

Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de recherche: Mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces

Présentée par:

Clara MORICONI

Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée *par l'hydrogène gazeux* dans les matériaux métalliques

Directeurs de thèse : Gilbert HENAFF & Damien HALM

Soutenue le 12 décembre 2012

Jury

Mme Sylvie Pommier	Professeure à l'ENS Cachan	Rapporteur
M. Nicolas Saintier	Maître de Conférences HDR à Arts & Métiers ParisTech, Bordeaux	Rapporteur
M. Philippe Bompard	Professeur à l'Ecole Centrale, Paris	Examineur
M. Jacques Chêne	Directeur de Recherche CNRS, CEA Saclay	Examineur
Mme Vigdis Olden	Research Scientist, PhD, SINTEF Materials & Chemistry, Trondheim, Norvège	Examineur
M. Damien Halm	Professeur à l'ISAE-ENSMA, Poitiers	Examineur
M. Gilbert Hénaff	Professeur à l'ISAE-ENSMA, Poitiers	Examineur

Merci ?

À mes directeurs de thèse, Gilbert et Damien, pour m'avoir guidée durant ces trois années de thèse, avoir planché avec moi sur les problèmes que je soulevais aux réunions, avoir relu sérieusement les pavés que je leur ai donnés en fin de thèse... Bon courage à Battista le « successeur » !
😊

À Mikaël Gueguen, pour m'avoir aidée dans mon code et dans la construction de mon modèle. Ses remarques judicieuses m'ont toujours permis d'avancer dans mon travail !

À ma famille, pour avoir retenu que j'ai travaillé sur les métaux avec de l'hydrogène (pas facile !), et extrapolé un peu en disant que j'ai fabriqué un moteur à hydrogène...

Aux anciens de l'ENSMA, qui aimaient tellement Chasseneuil-du-Poitou qu'ils ont décidé d'y poser leurs valises pour trois années supplémentaires... ♡

À tous les nouveaux/actuels/anciens thésards du LMPM/Institut P'/PPRIME/Branche 3 Axe 19 Département « Matériaux de tous types » et à tous les collègues du labo pour la bonne ambiance de travail, la coinche le midi, les sorties ATEM...

Aux stagiaires qui se sont succédés au labo, avec qui on a passé des moments super sympas ! Et qui ont permis de garder contact avec les étudiants de l'ENSMA.

Aux volleyeurs et volleyeuses, de l'ENSMA, du Stade Poitevin, du CEP St Benoît et de Buxerolles, pour les bons moments passés ensemble. Merci aux trois personnes du volley qui sont venues assister à ma soutenance, et dont la concentration a failli dès la deuxième diapo !

À Frédéric Pons et Alain Cimetière, pour m'avoir permis d'enseigner les maths, ma bête noire, que j'ai ressortie des abîmes de mes archives...

Merci au Comité RDD 2011, pour les bons moments en montant le spectacle. Au comité 2012 : il va falloir faire mieux (essayer, du moins) ! On sera là pour vérifier !



A Florian

Table des matières

Table des figures	ix
Liste des tableaux	xiii
Introduction	1
I Etat de l'art	7
1 Fragilisation par l'hydrogène : phénoménologie et modélisation	11
1.1 Généralités sur l'hydrogène	11
1.2 Mise en évidence expérimentale de la FPH	12
1.3 Absorption de l'hydrogène en environnement gazeux	13
1.3.1 Dissociation et adsorption	13
1.3.2 Phase d'absorption	16
1.4 Comportement de l'hydrogène au sein du métal	19
1.4.1 L'hydrogène diffusible	19
1.4.2 L'hydrogène piégé	21
1.4.3 Equilibre local	23
1.5 Mécanismes de FPH	24
1.5.1 Hydrogen-Enhanced DEcohesion (HEDE)	25
1.5.2 Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity (HELP)	25
1.5.3 Adsorption-Induced Dislocation Emission (AIDE)	26
1.5.4 Discussion	27

2	Choix du modèle d'endommagement	29
2.1	Modèles de zone cohésive	30
2.1.1	Un peu d'histoire	30
2.1.2	Principes des modèles de zone cohésive	30
2.1.3	Les modèles de zone cohésive en fatigue	34
2.1.4	Cadre thermodynamique	35
2.1.5	Modèle de zone cohésive influencé par l'hydrogène	37
2.2	Bilan critique	40
II	Construction du modèle	43
3	Formulation du modèle	49
3.1	Développement d'une loi de traction-séparation spécifique	49
3.1.1	Développement dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles	50
3.1.2	Influence de l'hydrogène sur les paramètres de la TSL	55
3.1.3	Bilan	58
3.2	Diffusion couplée de l'hydrogène	60
4	Mise en place d'une stratégie de simulation	63
4.1	Implémentation de la loi de traction-séparation spécifique dans Abaqus . . .	63
4.1.1	Possibilités offertes par Abaqus	64
4.1.2	Description de la subroutine UEL	67
4.2	Implémentation de la diffusion couplée de l'hydrogène dans Abaqus	73
4.2.1	Analogie entre diffusion de la masse et de la chaleur	73
4.2.2	Calcul du gradient de contrainte hydrostatique	75
4.2.3	Ecrouissage cinématique non-linéaire	77
4.3	Modélisation Abaqus de l'éprouvette CT	82
4.3.1	Géométrie	82
4.3.2	Maillage de l'éprouvette	83
4.3.3	Conditions aux limites	86

III	Validation du modèle et confrontation avec l'expérience	89
5	Essais de propagation de fissures de fatigue dans l'acier 15-5PH sous hydrogène gazeux	95
5.1	Présentation du matériau	95
5.2	Essais de propagation de fissure de fatigue sous haute pression d' H_2	98
5.2.1	Présentation du dispositif Hycomat	98
5.2.2	Principe des essais de propagation de fatigue sous H_2	99
5.2.3	Mesures et observations expérimentales	100
5.2.4	Discussion	107
5.3	Bilan	113
6	Etude de la diffusion couplée de l'hydrogène	115
6.1	Mise en données	115
6.2	Etude des profils de concentration d'hydrogène	117
6.3	Etude de la contribution des différents termes de l'équation de diffusion . . .	120
7	Propagation de fissure assistée par l'hydrogène sous chargement monotone	123
7.1	Mise en données	123
7.2	Simulation des courbes R-CTOD avec et sans H_2	126
7.3	Evolution des profils du taux de recouvrement en hydrogène	128
7.4	Influence de l'hydrogène sur la plasticité	132
7.5	Bilan	133
8	Simulations de la propagation des fissures sous chargement cyclique	135
8.1	Mise en données	135
8.2	Principe des simulations	136
8.3	Simulation des courbes de propagation sous chargement cyclique	138
8.3.1	Influence et identification des paramètres de la loi de traction-séparation	139
8.3.2	Evolution de la longueur de fissure au cours du chargement	141
8.3.3	Simulation des courbes de propagation de fatigue	144
8.4	Bilan sous chargement cyclique	145

9 Simulations de la propagation des fissures de fatigue sous H_2	147
9.1 Principe des simulations	147
9.2 Vitesses de propagation de fissure de fatigue sous H_2	148
9.3 Discussion	151
9.3.1 Influence de la pression d' H_2	151
9.3.2 Influence du niveau de ΔK	153
9.3.3 Influence de la fréquence du chargement cyclique	154
9.4 Bilan : capacités et limitations du modèle	156
 Conclusion et perspectives	 159
 Annexes	 165
A Détermination de l'intervalle de définition de l'exposant n_c	167
B Calcul de l'énergie de séparation	169
C Calcul de l'épaisseur des éléments cohésifs en contraintes planes	171
D Résolution numérique du modèle d'écrouissage cinématique linéaire dans la subroutine UMAT	173
 Bibliographie	 179

Table des figures

1	Les origines du phénomène de fragilisation par l'hydrogène	4
1.1	Schéma de l'adsorption et de la désorption de l'hydrogène en surface d'un métal .	14
1.2	Isothermes de Langmuir pour plusieurs valeurs du coefficient d'adsorption $b(T)$.	16
1.3	Evolution du flux d'hydrogène en fonction de la température et de la pression d' H_2 dans un acier ferritique	18
1.4	Allure schématique du potentiel de réseau vu par l'hydrogène	21
1.5	Schématisation des sites de piégeage de l'hydrogène	22
1.6	Principe du mécanisme HEDE	25
1.7	Principe du mécanisme HELP	26
1.8	Principe du mécanisme AIDE	27
2.1	Modélisation de la propagation d'une fissure à l'aide d'éléments cohésifs	31
2.2	Loi de traction-séparation et schéma de la « process zone »	32
2.3	Illustration schématique du placement des éléments cohésifs sur le trajet de fissure connu d'une éprouvette CT	33
2.4	Illustration de la dépendance au maillage des modèles cohésifs	33
2.5	Exemples de lois de traction-séparation irréversibles	35
2.6	Cycle thermodynamique de Born-Haber	38
2.7	Evolution de l'énergie de surface normalisée pour le fer (1 1 0) et l'aluminium (1 1 1) en fonction du taux de recouvrement en hydrogène	39
2.8	Influence du taux de recouvrement en hydrogène sur la TSL bilinéaire	39
3.1	Schéma d'un élément cohésif 2D linéaire à quatre nœuds	49
3.2	Evolution de δ_n correspondant à la TSL représentée sur la figure 3.3	54
3.3	Loi de traction-séparation normale normalisée sous chargement cyclique d'ampli- tude variable	55
3.4	Loi de traction-séparation tangentielle normalisée sous chargement cyclique . . .	56

3.5	Allure de la loi de traction-séparation normale normalisée sous chargement monotone sans hydrogène et en présence d'hydrogène	58
4.1	Allure de la loi de traction-séparation avec évolution linéaire de D dans Abaqus .	65
4.2	Allure de la loi de traction-séparation avec évolution exponentielle de D dans Abaqus	66
4.3	Schéma de l'élément cohésif 2D à 4 nœuds	67
4.4	Schéma des étapes de calcul de la subroutine UEL	68
4.5	Schéma de la transformation d'un quadrilatère réel construit à partir des 4 points d'intégration des éléments 2D linéaires du bulk au quadrilatère de référence 2D .	76
4.6	Schéma de l'éprouvette Compact Tension 40 utilisée pour la campagne d'essais .	82
4.7	Géométrie de la modélisation Abaqus d'une demi-éprouvette CT 40	84
5.1	Micrographie de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH (H1025)	96
5.2	Cycles stabilisés pour différentes valeurs de déformation totale imposée	97
5.3	Photographies du dispositif Hycomat	98
5.4	Schéma du fonctionnement du dispositif Hycomat	99
5.5	Courbes de propagation pour l'acier 15-5PH dans l'hydrogène à 0,09 et 9 MPa, et dans l'air	101
5.6	Surfaces de rupture représentatives de la propagation de fissures de fatigue dans l'air et dans l'hydrogène à faible pression	102
5.7	Surfaces de rupture représentatives de la propagation des fissures de fatigue dans l'hydrogène gazeux à 9 MPa pour différentes valeurs de ΔK	103
5.8	Influence de la fréquence sur les courbes de propagation dans l'hydrogène	104
5.9	Profil de concentration d'hydrogène en fonction de la durée de l'essai	105
5.10	Influence de la fréquence sur les surfaces de rupture	106
5.11	Evolution du facteur d'accélération à 20 Hz en fonction de la pression d'hydrogène	109
5.12	Exemples de déformation plastique importante localisée le long du trajet de fissure	112
6.1	Profils de concentration d'hydrogène réticulaire C_L et de contrainte hydrostatique σ_h	117
6.2	Profils de concentration d'hydrogène piégé C_T et de déformation plastique équivalente ϵ_p	119
6.3	Evolution des deux termes régissant le flux d'hydrogène le long de la ligne de symétrie du modèle (sur quelques millimètres)	120
6.4	Evolution des deux termes régissant le flux d'hydrogène le long de la ligne de symétrie du modèle (sur quelques micromètres)	121

7.1	Comportement en traction de l'acier FeE 690T	124
7.2	Schéma de la configuration expérimentale pour la mesure du $\delta 5$ sur une éprouvette Compact Tension	124
7.3	Courbes R-CTOD simulées en l'absence d'hydrogène et sous H_2 gazeux à 100 bars pour différentes vitesses de déplacement de la traverse	127
7.4	Profils de θ simulés pour les deux types de loi de diffusion à l'instant de la rupture du premier élément cohésif, pour deux vitesses de chargement	129
7.5	Profils du taux de recouvrement θ (calculé à partir de la concentration totale en hydrogène C et à partir de la concentration en hydrogène diffusible C_L) à deux instants pour la vitesse de 100 $\mu m/h$	130
7.6	Profils du taux de recouvrement θ (calculé à partir de la concentration totale en hydrogène C et à partir de la concentration en hydrogène diffusible C_L) à deux instants pour la vitesse de 10 $\mu m/h$	131
7.7	Cartographies simulées de déformation plastique équivalente ϵ_p à l'instant de la rupture de l'élément cohésif situé en fond de fissure initial, en l'absence d'hydrogène et dans l'hydrogène gazeux à 100 bars pour une vitesse de chargement de 0,1 $\mu m/h$ avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène	132
8.1	Illustration de l'amplitude cyclique imposée	137
8.2	Evolution de la longueur de fissure simulée en fonction du nombre de cycles . . .	142
8.3	Profils de l'endommagement monotone D_m et de l'endommagement cyclique D_c en fonction de la distance le long du trajet de fissure à partir de la pointe de fissure initiale, pour $\Delta K=20$ MPa $\sqrt{m}$ à $R = 0,1$	143
8.4	Courbes simulées de l'évolution de la vitesse de propagation de fissure da/dN (en m/cycle) en fonction de l'amplitude du facteur d'intensité de contraintes ΔK (en MPa $\sqrt{m}$), pour deux rapports de charge ($R = 0,1$ et $0,7$), comparées aux courbes de propagation obtenues sous air pour un acier inoxydable martensitique 15-5PH	145
9.1	Evolution de la longueur de fissure en fonction du nombre de cycles pour des simulations de propagation de fissure de fatigue en présence d'hydrogène, à la fréquence cyclique de 20 Hz et pour différentes pressions d'hydrogène (0,09 MPa et 9 MPa) et différents niveaux de ΔK (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$)	149
9.2	Courbe de propagation de fissure de fatigue en présence d'hydrogène, simulée pour un rapport de charge $R = 0,7$ à la fréquence de 20 Hz pour une pression d' H_2 de 9 MPa, comparée aux courbes de propagation obtenues sous air et sous H_2 à 0,09 et 9 MPa pour un acier inoxydable martensitique 15-5PH, et simulée en l'absence d'hydrogène	150

9.3	Evolution du taux de recouvrement en hydrogène θ , calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz et pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$, pour deux pressions d' H_2 (0,09 MPa et 9 MPa), en fonction de la distance à partir du fond de fissure, après 250 cycles de chargement	151
9.4	Evolution du taux de recouvrement en hydrogène, calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , pour deux niveaux de ΔK (10 et $20 \text{ MPa}\sqrt{m}$), à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz et pour une pression d' H_2 de 9 MPa, en fonction de la distance à partir du fond de fissure	153
9.5	Evolution du taux de recouvrement en hydrogène θ , calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , pour deux fréquences de chargement cyclique (0,2 et 20 Hz) pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ et une pression d' H_2 de 0,09 MPa, en fonction de la distance à partir du fond de fissure	155

Liste des tableaux

1.1	Quelques données caractéristiques relatives à l'hydrogène	12
1.2	Energies de piégeage de l'hydrogène pour différents défauts microstructuraux dans les alliages base Fe ou Ni	23
4.1	Parallèle entre l'équation de la chaleur et l'équation de diffusion de la masse . . .	73
5.1	Composition chimique de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH	96
5.2	Paramètres du comportement cyclique de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH	97

Introduction

L'HISTOIRE DE L'HYDROGÈNE remonte au début du XVIème siècle quand, l'alchimiste et apothicaire suisse Paracelse analysa la réaction de l'acide sulfurique sur du fer. Il se demanda alors si le gaz qui se dégageait était de même nature que l'air qu'il respirait, puisqu'il était inodore et ne semblait pas toxique. En 1703, Théodore Turquet de Mayerne en découvre l'inflammabilité, et en 1766, le britannique Cavendish parvient à recueillir le gaz dont parlait Paracelse et montre que sa densité est plus faible que celle de l'air et que sa combustion produit de l'eau. En 1783, les français Lavoisier, Laplace et Berthollet soumettent à l'Académie des Sciences un rapport sur la synthèse de l'eau, « composée, poids pour poids, d'air inflammable et d'air vital ». Cet air inflammable est alors nommé « hydrogène », c'est-à-dire « qui produit de l'eau ». Si l'hydrogène fait partie de l'arsenal des énergies dites nouvelles, son histoire ne date pas d'hier ! Alors pourquoi s'intéresse-t-on tant à l'hydrogène aujourd'hui ? Pour deux raisons : l'épuisement des ressources d'énergies fossiles, et le phénomène du réchauffement climatique.

Les perspectives d'une pénurie des sources d'énergie fossiles et du réchauffement climatique se faisant de plus en plus menaçantes, on étudie de nouvelles voies de production d'énergie. Parmi ces dernières, l'utilisation de l'hydrogène comme vecteur énergétique fait partie des solutions envisagées. L'hydrogène est compatible avec les trois sources primaires d'énergie connues : le nucléaire, les énergies fossiles et les énergies renouvelables. En revanche, de sa production à ses utilisations en passant par son transport et son stockage, l'utilisation à grande échelle du « vecteur hydrogène » suppose la levée préalable d'un certain nombre de verrous scientifiques et technologiques.

Par exemple, pour ne citer que les applications mobiles et transportables terrestres de l'hydrogène, il existe un large panel de solutions de stockage : dans des hydrures métalliques, dans un borohydrure de sodium, en liquide cryogénique, et gazeux sous pression. La faisabilité de chacune de ces solutions a été étudiée, notamment lors du projet européen StorHy, en fonction de l'application envisagée, de l'évaluation des risques en cas d'accident, de l'énergie nécessaire au stockage, de l'avancée de la technologie de stockage (pour les réservoirs), etc. En ce qui concerne le transport de l'hydrogène, quelques dizaines de milliers de km de pipelines en acier sont en fonctionnement en Europe et aux Etats-Unis depuis des décennies, qu'ils soient enterrés ou laissés à l'air libre. Cela prouve la faisabilité de ce type de transport.



Que ce soit pour le transport (pipelines), le stockage (réservoirs) ou la distribution de l'hydrogène, on retrouve des pièces métalliques directement exposées à de l'hydrogène gazeux à haute pression. Du point de vue de l'étude des matériaux, il est donc nécessaire de bien comprendre

l'influence de l'hydrogène gazeux sur le comportement mécanique des métaux. Le rôle néfaste de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des métaux est bien connu ; ce phénomène est appelé fragilisation par l'hydrogène, souvent abrégé FPH. La FPH est une cause importante de ruptures souvent impressionnantes de pièces métalliques dans l'industrie, avec des conséquences humaines et matérielles. Le besoin d'étudier ce phénomène a donné naissance à de nombreux travaux et publications depuis sa première mise en évidence il y a plus d'un siècle. Dans cette étude, on se limitera à l'étude de la FPH des aciers.

La présence d'hydrogène dans les aciers peut résulter de [1] :

- la pénétration d'hydrogène lors de l'élaboration ou de la transformation des aciers ;
- la production d'hydrogène par des réactions électrolytiques lors des traitements de surface, de la protection cathodique, etc. ;
- l'hydrogène produit par des réactions de corrosion en environnement aqueux ;
- l'utilisation d'aciers en atmosphère hydrogénée, comme c'est le cas pour les pipelines utilisés pour le transport d'hydrogène gazeux à haute pression.

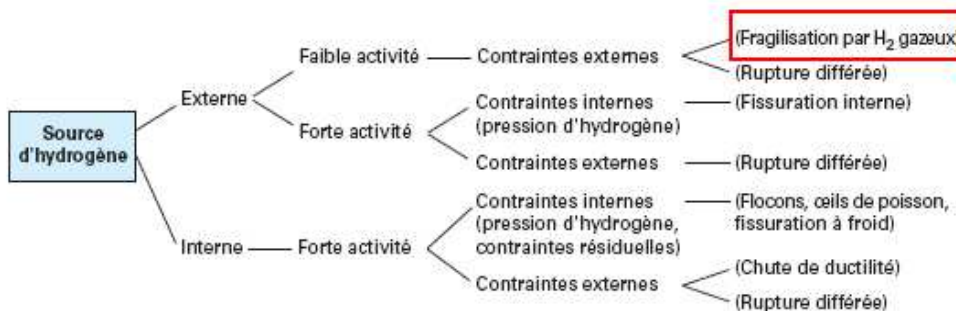


FIGURE 1 – Schématisation des différentes origines du phénomène de FPH [1]

La figure 1 résume les différentes formes de la FPH. Selon l'origine de l'hydrogène (source interne ou externe) et la présence de contraintes internes ou externes, la FPH entraîne la dégradation des aciers par divers phénomènes. Dans cette étude, nous nous intéresserons plus particulièrement à la fragilisation par l'hydrogène gazeux.

Une fois dissout dans les aciers, l'hydrogène entraîne généralement une dégradation (plus ou moins marquée selon le type d'acier) de leurs propriétés mécaniques, comme l'allongement à la rupture, la limite d'élasticité, la résistance à la fissuration, etc. Entre autres, on observe que la ductilité des aciers soumis à de l'hydrogène gazeux diminue sous chargement monotone [2].

Par ailleurs, des études expérimentales [3–5] ont mis en évidence l'influence néfaste de l'hydrogène en pointe de fissure sur la résistance à la fissuration en fatigue des métaux. Cependant,

la plupart de ces études ont porté sur des matériaux chargés cathodiquement, en faisant l'hypothèse que le type de source d'hydrogène n'a pas d'influence sur la dégradation des propriétés mécaniques [6–8]. Les mécanismes à l'origine de la fragilisation par l'hydrogène des métaux n'ont pas encore été clairement identifiés. C'est entre autres dans le but d'aider à la compréhension de ces mécanismes qu'une étude expérimentale originale de propagation de fissures de fatigue sous haute pression d'hydrogène a été menée au laboratoire sur un acier inoxydable martensitique.

Des essais de propagation de fissure en fatigue ont été réalisés sur éprouvette Compact Tension à température ambiante sous différentes pressions d'hydrogène sur le banc d'essais Hycomat à l'Institut PPRIME à Poitiers, sur un acier inoxydable martensitique 15-5PH durci par précipitation, qui a été largement étudié au laboratoire [9]. La haute résistance de l'acier due à sa structure martensitique et aux précipités laissait supposer une bonne sensibilité aux effets de l'hydrogène [10, 11]. En effet, il est généralement accepté que plus la résistance mécanique des aciers est élevée, plus ils sont sensibles à la FPH [12].

L'objectif du travail présenté ici est de développer dans le cadre de la mécanique de l'endommagement une modélisation fiable et robuste de propagation des fissures de fatigue assistée par l'hydrogène, et de la confronter aux résultats des expérimentations sous haute pression d'hydrogène, en comparant les vitesses de propagation de fissure données par le modèle avec celles mesurées expérimentalement. Les mesures expérimentales fournissant des informations 2D (longueur de fissure en fonction du nombre de cycles), le modèle sera développé en deux dimensions. On cherche ainsi à fournir un outil de simulation des phénomènes entrant en jeu, apte à estimer la durabilité des structures en conditions de fonctionnement. D'un point de vue plus fondamental, le modèle numérique a pour but d'aider à la compréhension du rôle de l'hydrogène dans la modification des mécanismes d'endommagement en pointe de fissure de fatigue, et donc de permettre de comprendre les effets observés expérimentalement (effets de la fréquence du chargement cyclique et de la pression d'hydrogène gazeux).

Ce manuscrit s'articule en trois parties. La première partie comprend une étude bibliographique de la FPH des aciers ; on s'attardera en particulier à présenter les étapes de la pénétration de l'hydrogène gazeux dans les aciers ainsi que les différents mécanismes de fragilisation par l'hydrogène. L'accent sera mis sur la modélisation de la FPH. Toujours dans cette même partie, on présentera les raisons du choix d'un modèle de zone cohésive, ainsi que l'utilisation de ce type de modèle sous chargement cyclique et en présence d'hydrogène.

La seconde partie présentera la construction du modèle, du développement d'un modèle de zone cohésive avec une loi de comportement spécifique adaptée à notre cahier des charges, au modèle de diffusion couplée de l'hydrogène. On s'attardera ensuite sur l'implémentation de ces éléments dans le code de calcul Abaqus, à l'aide de sous-routines Fortran dédiées.

Enfin, la dernière partie présentera la confrontation des résultats de différentes simulations avec la littérature et les données et observations expérimentales sur l'acier inoxydable 15-5PH. Dans un premier temps, on présentera la campagne expérimentale de fissuration en fatigue sous hydrogène gazeux réalisée sur le dispositif Hycomat à l'Institut PPRIME sur l'acier inoxydable martensitique 15-5PH. Ensuite, on étudiera la diffusion couplée de l'hydrogène par une simulation de diffusion sous chargement statique, dont les résultats (évolution des populations d'hydrogène diffusible et piégé, influence de la contrainte hydrostatique et du niveau de déformation plastique) seront confrontés à la littérature. Cette étude permettra une validation de l'implémentation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène. Plus loin, on présentera les résultats de simulations de propagation de fissures sur éprouvette Compact Tension en chargement monotone pour différentes vitesses de chargement. Les courbes R-CTOD obtenues seront comparées à la littérature. On étudiera ensuite les possibilités du modèle à prédire la propagation des fissures de fatigue en l'absence d'hydrogène dans l'acier inoxydable 15-5PH. Les courbes de propagation simulées seront confrontées aux courbes expérimentales sous air pour l'acier 15-5PH. Enfin, on confrontera les résultats de simulations de propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène aux vitesses de propagation et aux observations expérimentales. L'effet de la pression d' H_2 et de la fréquence de chargement seront étudiés et les vitesses d'avancée de fissure simulées seront comparées aux vitesses expérimentales. La confrontation du modèle avec les résultats des essais de fissuration de fatigue sous H_2 va nous permettre de tirer des conclusions sur les capacités prédictives du modèle et ses limitations, et ainsi de mieux comprendre les mécanismes et les cinétiques de diffusion de l'hydrogène, ainsi que les mécanismes de FPH à l'œuvre. Par la suite, le modèle pourra être enrichi pour tenir compte d'autres phénomènes et mécanismes.

Première partie

Etat de l'art

Abstract

THE FIRST PART OF THIS WORK is divided into two chapters. The first chapter deals with hydrogen embrittlement of steels, and starts with a general introduction of the properties of hydrogen (small atomic radius, large partial molar volume). Then, section 1.2 presents the experimental procedures used to study the effect of hydrogen. The relevance of each of these techniques for the study of hydrogen embrittlement in different types of steel is discussed, depending on the diffusivity of hydrogen. Later on, section 1.3 addresses the steps leading to the absorption of gaseous hydrogen into steels. Foremost, H_2 molecules dissociate, then are adsorbed on the surface of the material (see equation 1.1). After that, the Langmuir isotherm and the hydrogen coverage θ are introduced (equations 1.2 to 1.4). The value of the Gibbs free energy difference between the bulk material and the surface of the material Δg_b^0 is discussed, in relation to the levels of hydrogen concentration in the 15-5PH martensitic stainless steel. In a second step, hydrogen is absorbed into the material (equation 1.7). Sieverts' law (see section 1.3.2) reflects the dependence of the solubility of hydrogen on the square root of H_2 pressure. There is no available data regarding hydrogen solubility in martensitic stainless steels; however, it is usually assumed that it is close to that of ferrite.

Section 1.4 addresses the behavior of dissolved hydrogen. The distinction is made between hydrogen in lattice sites - its concentration is denoted by C_L - and hydrogen that is trapped in material defects (C_T). Firstly, hydrogen can diffuse within the steel from one lattice site to another. A model of interstitial hydrogen diffusion, first proposed by Sofronis and McMeeking [13] and later developed by Krom et al [14], takes into account the influence of hydrostatic stress on the diffusion of dissolved hydrogen. Furthermore, a local equilibrium is assumed between interstitial hydrogen and trapped hydrogen, according to Oriani's theory [15]. Hydrogen can also be transported within the material by other mechanisms - for instance, through the movement of mobile dislocations.

Finally, section 1.5 introduces the mechanisms of HE that are likely to operate in the experimental conditions of the fatigue crack propagation tests on the Hycomat test bench. One of them is the Hydrogen-Enhanced DEcohesion (HEDE) mechanism, which assumes that dissolved hydrogen lowers the cohesive strength of the atomic lattice, leading to a decrease of fracture energy. Another popular mechanism is the Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity (HELP) theory, which is based on the hypothesis that interstitial hydrogen enhances the mobility of dislocations in preferred crystallographic planes at the crack tip. Finally, the Adsorption-Induced Dislocation Emission (AIDE) mechanism assumes that hydrogen adsorbed on the surface and subsurface of the material leads to a local decrease of the cohesive energy of the atomic lattice, thus enhancing the emission of dislocations from the surface. Nowadays, several authors [14,16-18] have reached

an agreement, which is that hydrogen embrittlement is probably caused by several mechanisms, and that the dominant mechanism depends on multiple parameters (material microstructure, experimental conditions).

Chapter 2 addresses the issue of the damage model. First of all, the choice of the cohesive zone approach is justified, in relation to recent developments, which show that cohesive zone models can be used to predict fatigue crack growth [19–23] and hydrogen embrittlement under monotonic loadings [24,25]. Section 2.1 presents the cohesive zone approach, from its historical development to its principles, and introduces the traction-separation law (TSL). Then, section 2.1.3 gives an overview of the use of cohesive zone models to predict fatigue crack growth in various materials. After that, section 2.1.4 presents the development of the cohesive zone model in the framework of the Thermodynamics of Irreversible Processes. Finally, section 2.1.5 presents the influence of hydrogen on the parameters of the traction-separation law – via the hydrogen coverage θ , as first suggested by Serebrinsky et al [17].

Chapitre 1

Fragilisation par l'hydrogène : phénoménologie et modélisation

1.1 Généralités sur l'hydrogène

 L'HYDROGÈNE EST LE PLUS PETIT DES ATOMES et son faible rayon atomique ($r_H \simeq 0,53 \times 10^{-10}$ m) est du même ordre de grandeur que la taille des sites interstitiels dans un réseau métallique. Il peut donc se trouver facilement en solution dans les métaux usuels (dans les sites tétraédriques pour les structures CC et octaédriques dans les CFC). Le tableau 1.1 présente quelques données relatives à l'atome d'hydrogène. Sa petite taille lui permet également de diffuser relativement facilement dans les sites interstitiels des aciers, même pour des températures basses. Les calculs de diffusion des atomes d'hydrogène dans le fer basés sur les premiers principes, publiés par Jiang et Carter [27], valident l'hypothèse selon laquelle les atomes d'hydrogène se positionnent et diffusent dans les sites interstitiels des métaux. L'hydrogène peut ensuite interagir avec les défauts microstructuraux de l'acier et entraîner une perte de performance. Par sa faible solubilité et sa forte mobilité, l'hydrogène aura tendance à se ségréger. De plus, à cause de son grand volume partiel molaire, l'hydrogène est très sensible aux champs de contraintes. En effet, cette grandeur indique l'aptitude de l'hydrogène interstitiel à distordre le réseau métallique qu'il occupe. Sa valeur élevée se traduit par une forte aptitude de l'hydrogène à ségréger dans des champs de contrainte favorisant une dilatation des sites interstitiels, c'est-à-dire dans les zones où la contrainte hydrostatique est positive.

De plus, sa forte interaction électronique lui permet de modifier l'environnement électronique des atomes du métal.

Ces propriétés sont à l'origine des phénomènes de piégeage et constituent la base des proprié-

Données physiques
Trois isotopes : ^1_1H , ^2_1H , ^3_1H
Masse molaire H_2 : 2,016 g
$1 \text{ cm}^3 \text{ H}_2 = 5,38 \times 10^{19}$ atomes
$d_{\text{M-H}} \approx 1,5 \times 10^{-1} \text{ nm}$; $d_{\text{H-H}} \approx 0,74 \times 10^{-1} \text{ nm}$; $r_{\text{H}} \approx 0,53 \times 10^{-1} \text{ nm}$
Volume molaire partiel : $\bar{V}_{\text{H}} = 2 \text{ cm}^3/\text{mol}$
Mobilité : $D_{\text{HFe}\alpha} \approx 9 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ à 20 °C

Tableau 1.1 – Quelques données caractéristiques relatives à l'hydrogène [26]

tés fragilisantes de l'hydrogène présent à température modérée, typiquement dans les alliages base fer et nickel. La valeur de son coefficient de diffusion à 20°C dans le fer α correspond à un parcours quadratique moyen de l'ordre de 1 mm en une minute et explique sa très grande aptitude à pénétrer dans les aciers ferritiques. L'étude du transport et de la localisation de l'hydrogène dans les aciers constitue donc un point crucial pour la compréhension du phénomène de FPH. La section suivante présente les types d'essais expérimentaux permettant l'étude de la FPH des aciers.

1.2 Mise en évidence expérimentale de la FPH

D'une manière générale, la sensibilité à la FPH des alliages structuraux peut être évaluée à l'aide de deux grandes familles d'essais :

- les essais mécaniques sous pression d'hydrogène gazeux, consistant à appliquer simultanément une sollicitation mécanique et une exposition à de l'hydrogène gazeux ;
- les essais mécaniques à l'air sur des matériaux ayant subi un chargement préalable en hydrogène, par exemple en exposant le matériau à de l'hydrogène gazeux sous pression ou par chargement cathodique, qui consiste à faire l'électrolyse d'un mélange ou d'une solution aqueuse acide ou basique, l'hydrogène se dégageant sur l'éprouvette qui joue alors le rôle de cathode.

Pour le préchargement, différentes techniques peuvent être envisagées :

- Chargement électrolytique en milieu aqueux : À température ambiante et jusqu'à 80°C, l'hydrogène peut être introduit par électrolyse en solution aqueuse, avec ou sans désaération par bullage de gaz inerte (le plus souvent des solutions d'acide sulfurique ou de soude).
- Chargement électrolytique en bain de sels fondus : L'introduction d'hydrogène dans des matériaux dans lesquels la mobilité de l'hydrogène est faible à température ambiante (aciers austénitiques, par exemple) peut être réalisée jusqu'à 300°C environ, par électrolyse dans un mélange de sels fondus (solide à température ambiante). Les échantillons doivent ensuite

être trempés rapidement dans un milieu à basse température à la fin du chargement pour éviter une redésorption de l'hydrogène lors du refroidissement.

- Chargement gazeux : Le chargement en hydrogène peut être effectué sous pression d'hydrogène gazeux de la température ambiante à quelques centaines de degrés. Cette méthode onéreuse est délicate de mise en oeuvre, du fait des pressions élevées d'hydrogène nécessaires. Il convient également d'éviter la redésorption de l'hydrogène au cours du démontage de l'échantillon et, bien sûr, tout risque de fuite ou d'explosion.

La durée du préchargement est déterminée à partir de la valeur du coefficient de diffusion de l'hydrogène à la température de travail, afin d'obtenir la profondeur souhaitée de zone hydrogénée. Des précautions sont à prendre pour éviter la redésorption des échantillons avant essai et, dans le cas d'éprouvettes destinées à des études de cinétique de désorption, pour éliminer toute couche de surface susceptible de contrôler la désorption de l'hydrogène.

Le choix de l'une ou l'autre de ces techniques est guidé par des considérations métallurgiques. Les laboratoires SANDIA [28] préconisent de ne pas utiliser les essais sur matériaux préchargés, dès lors que la diffusivité de l'hydrogène est supérieure à $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, c'est-à-dire dans le cas des aciers au carbone et des aciers faiblement alliés, car la diffusivité de l'hydrogène est telle qu'une part importante de l'hydrogène désorbera durant l'essai. A l'inverse, les essais sous hydrogène gazeux ne sont pas préconisés lorsque la diffusivité est inférieure à $10^{-15} \text{ m}^2/\text{s}$, ce qui est le cas des aciers austénitiques ; on privilégiera dans ce cas des essais à faible vitesse de déformation sur échantillons préchargés. Dans la suite, nous ne détaillerons que le cas des essais en environnement gazeux.

Pour prédire le rôle néfaste de l'hydrogène, il est crucial de contrôler les étapes amenant l'hydrogène à pénétrer dans le matériau, ainsi que les modes d'endommagement induit par l'hydrogène absorbé. Le paragraphe suivant présente les étapes d'absorption de l'hydrogène en atmosphère d'hydrogène gazeux.

1.3 Absorption de l'hydrogène en environnement gazeux

L'absorption d'hydrogène gazeux dans un métal fait intervenir la dissociation des molécules de H_2 , puis une étape d'adsorption des molécules sur la surface, suivie de la diffusion en volume.

1.3.1 Dissociation et adsorption

Dans un premier temps, les molécules de dihydrogène s'adsorbent puis l'hydrogène gazeux est dissocié sur la surface du matériau métallique. Durant cette étape, les atomes d'hydrogène sont adsorbés en créant des liaisons physiques puis chimiques avec la surface du matériau. En effet, les atomes de surface sont soumis à des champs de forces qu'ils tentent de minimiser en

créant des liaisons de type Van Der Waals avec les atomes de l'environnement. Leur réactivité est donc importante et explique l'adsorption des molécules H_2 . Notons M un atome de surface de l'acier. L'équation d'équilibre suivante (1.1) résume les étapes de dissociation et d'adsorption.



Elle est réversible, c'est-à-dire qu'une partie des atomes d'hydrogène adsorbés se recombine chimiquement afin de reformer H_2 . La cinétique d'adsorption dépend fortement de l'état de surface du matériau. En effet, la dissociation de la molécule d' H_2 en présence d'un film d'oxyde nécessite une forte énergie d'activation et est donc contrôlée par une cinétique très lente [29].

Le rapport entre la surface du métal recouverte d'atomes adsorbés et la surface totale disponible est représenté par le taux de recouvrement θ , compris entre 0 et 1. Un taux de recouvrement égal à 1 signifie que tous les sites d'adsorption disponibles sont occupés par un atome d'hydrogène adsorbé. La valeur de θ dépend de plusieurs facteurs ; expérimentalement, on observe en effet que la quantité de gaz adsorbée à la surface du matériau dépend de la température et de la pression d'hydrogène gazeux.

Les courbes montrant l'évolution de θ en fonction de la pression du gaz à température constante sont appelées isothermes du gaz. On observe également que le taux de recouvrement atteint un plateau de saturation à partir d'une pression seuil, déterminée à partir des cinétiques d'adsorption et de désorption. La figure 1.1 schématise l'adsorption et la désorption de l'hydrogène en surface. v_{ads} et v_{des} représentent respectivement les vitesses d'adsorption et de désorption de l'hydrogène.

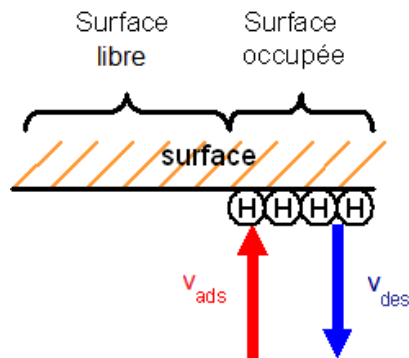


FIGURE 1.1 – Schéma de l'adsorption et de la désorption de l'hydrogène en surface d'un métal. Le taux de recouvrement en hydrogène θ représente le rapport entre la surface occupée par les atomes d'hydrogène et la surface totale disponible

L'équilibre entre les vitesses d'hydrogène adsorbé et désorbé donne l'expression 1.2, appelée isotherme de Langmuir, qui permet de décrire la dépendance du taux de recouvrement vis-à-vis de la concentration d'hydrogène en solution C , en décrivant la phase de saturation :

$$\theta = \frac{b(T)C}{1 + b(T)C}. \quad (1.2)$$

Dans l'équation précédente, le coefficient d'adsorption $b(T)$ est défini comme :

$$b(T) = \frac{k_{ads}}{k_{des}}, \quad (1.3)$$

où k_{ads} et k_{des} sont les constantes cinétiques des réactions d'adsorption et de désorption. Le coefficient $b(T)$ peut également s'exprimer comme :

$$b(T) = \exp\left(\frac{\Delta g_b^0}{RT}\right), \quad (1.4)$$

où Δg_b^0 représente la différence d'énergie libre entre la surface et le cœur du matériau, R est la constante des gaz parfaits et T est la température. De nombreuses valeurs ont été proposées pour la valeur de Δg_b^0 [30–32]. Serebrinsky et al [17] ont choisi la valeur de 30 kJ/mol. Cette valeur est adaptée aux quantités d'hydrogène de leur étude (de l'ordre de 1 ppm massique) ; en revanche, le choix de cette valeur pour notre étude, où l'on a des quantités d'hydrogène bien plus faibles (de l'ordre de 4×10^{-4} à 4×10^{-3} ppm massiques pour des pressions de 1 à 90 bar d' H_2 d'après la loi de Sieverts (cf. équation 1.12)), ne permettrait pas d'atteindre une valeur de θ supérieure à 0,05 pour les pressions d' H_2 qui nous intéressent. Ainsi, pour observer l'influence de l'hydrogène dans notre étude, le choix a été fait d'utiliser en première approximation la valeur de 36 kJ/mol.

L'isotherme de Langmuir repose sur les hypothèses suivantes :

- La surface sur laquelle il y a adsorption est uniforme ;
- L'énergie d'adsorption est indépendante du taux de recouvrement ;
- L'adsorption se fait en monocouche ;
- Il s'établit un équilibre local entre les molécules de gaz adsorbées et les sites d'adsorption.

Dans ces conditions, la vitesse d'adsorption v_{ads} est proportionnelle à la concentration d'hydrogène en solution C et à la fraction de sites d'adsorption non occupés et la vitesse de désorption v_{des} est proportionnelle à la fraction de sites occupés. On a alors les relations suivantes :

$$v_{ads} = k_{ads}(1 - \theta)C \quad (1.5)$$

$$v_{des} = k_{des}\theta. \quad (1.6)$$

La figure 1.2 représente schématiquement les isothermes de Langmuir pour différentes valeurs du coefficient d'adsorption $b(T)$. La concentration est représentée en unités arbitraires. Comme

le montre la figure 1.2, plus la valeur de $b(T)$ est élevée, plus le plateau de saturation est atteint pour une concentration faible.

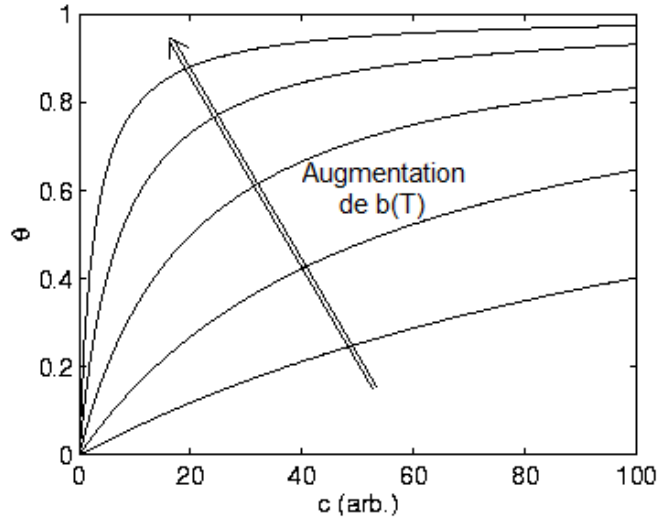


FIGURE 1.2 – Isothermes de Langmuir pour plusieurs valeurs du coefficient d'adsorption $b(T)$ [33]

Pour conclure, l'isotherme de Langmuir donne une idée de l'évolution du taux de recouvrement avec la concentration à une température donnée, mais elle ne permet évidemment pas de connaître avec précision l'évolution de l'adsorption en fonction de paramètres plus complexes, comme la microstructure de l'acier.

1.3.2 Phase d'absorption

Les atomes d'hydrogène adsorbés sur la surface se déplacent ensuite vers les sites interstitiels des premières couches d'atomes du métal, selon la réaction réversible (1.7).



Dans le cas de la fragilisation par l'hydrogène gazeux, l'absorption de l'hydrogène dans le métal est précédée d'une dissociation des molécules de H_2 ; la concentration d'hydrogène réticulaire dans le matériau peut alors être évaluée par la loi de Sieverts.

Loi de Sieverts

Dans l'hypothèse de faibles teneurs en hydrogène (de l'ordre de 10^{-6}) [34] et d'un taux de recouvrement faible, l'activité de l'hydrogène dissous s'exprime dans un domaine donné de

température et de pression d'hydrogène par la loi de Sieverts [35] (cf. 1.8). La loi de Sieverts est une relation expérimentale qui indique que la pénétration de l'hydrogène dans un métal en atmosphère d' H_2 est précédée d'une étape de dissociation de la molécule de H_2 , et traduit le fait que la concentration d'hydrogène dissous dans le réseau métallique, en équilibre avec l'hydrogène gazeux, est proportionnelle à la racine carrée de la pression d'hydrogène et à la solubilité de l'hydrogène dans le métal.

$$a = k \sqrt{f} \quad (1.8)$$

où a est l'activité de l'hydrogène, f est la fugacité des molécules de H_2 , et k est la solubilité de l'hydrogène, qui dépend des constantes de vitesse des réactions de dissociation et de transfert à l'interface gaz/métal, et qui suit une loi d'Arrhenius de la forme suivante :

$$k = k_0 e^{-\Delta H_s / RT} \quad (1.9)$$

où k_0 est un facteur pré-exponentiel, ΔH_s est l'enthalpie de dissociation (en J/mol), R est la constante des gaz parfaits ($= 8,314$ J/mol/K) et T la température (en K). Dans un cadre général, la fugacité f est proportionnelle à la pression d'hydrogène [36] : on peut donc écrire $f = \gamma p$, où le coefficient γ est défini par la relation (1.10).

$$\ln \gamma = \int_0^P \frac{Z - 1}{p} dp \quad (1.10)$$

où Z est la compressibilité du gaz. Tant que la pression de H_2 reste limitée à quelques dizaines voire centaines de bars, l'approximation consistant à remplacer la fugacité f par la pression d'hydrogène gazeux dans la chambre, qui est directement mesurable, est excellente [37]. Pour une solution diluée, l'activité peut être assimilée au rapport entre la concentration en hydrogène et la concentration de référence :

$$a \simeq \frac{C}{C_0} \quad (1.11)$$

où C est la concentration d'hydrogène dissous et C_0 la concentration de référence. La loi de Sieverts s'écrit alors sous la forme :

$$C = S_0 P^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-\Delta H_s}{RT}\right) \quad (1.12)$$

où S_0 un facteur pré-exponentiel, P la pression d'hydrogène gazeux (en atm), ΔH_s l'enthalpie de dissociation (en J/mol), R la constante des gaz parfaits (en J/K/mol), et T la température (en K).

Les travaux de Georgiev et Anestiev [38], portant sur un acier ferritique, illustrent ces dépendances (cf. figure 1.3). En effet, les auteurs ont montré expérimentalement que, lors d'un essai de perméation, le flux stationnaire d'hydrogène est proportionnel à la solubilité et augmente linéairement avec la racine carrée de la pression. Le flux, et par conséquent la solubilité, sont également dépendants de la température.

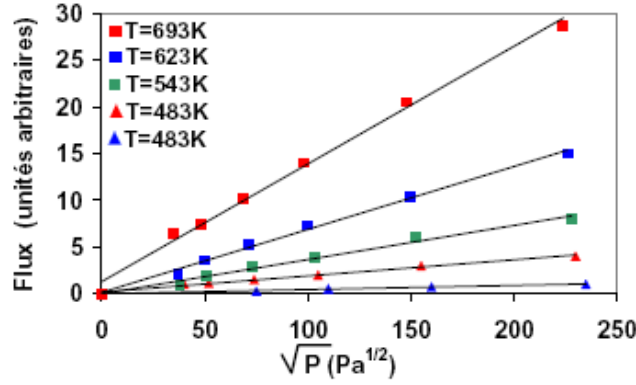


FIGURE 1.3 – Evolution du flux d'hydrogène en fonction de la température et de la pression d'hydrogène dans un acier ferritique [38]

La solubilité de l'hydrogène varie considérablement en fonction du type de métal considéré. Par exemple, dans le cas du fer α [30], Hirth a identifié la loi de Sieverts suivante :

$$C = 33 P^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-28600}{RT}\right) \quad (1.13)$$

Sous une pression d'1 atm d'hydrogène à une température de 20°C, la concentration d'hydrogène dissous dans le fer α sera donc $2,6 \times 10^{-4}$ ppm masse.

Dans le cas des aciers inoxydables austénitiques stables [39], la loi de Sieverts s'écrit :

$$C = 33.1 P^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-11080}{RT}\right) \quad (1.14)$$

Sous une pression d'1 atm d'hydrogène à une température de 20°C, la concentration d'hydrogène pouvant être dissous dans ce type d'acier sera de 0,35 ppm masse. D'après la loi de Sieverts, à température et pression ambiante, la concentration d'hydrogène interstitiel est donc environ mille fois plus faible dans le fer α que dans les aciers inoxydables austénitiques stables. La littérature ne fait état d'aucune identification des paramètres de la loi de Sieverts dans les aciers martensitiques, mais on s'accorde à dire qu'ils ne doivent pas trop différer de ceux de la ferrite.

Pour conclure, les cinétiques de pénétration de l'hydrogène gazeux dans les métaux ont une influence sur la quantité et la répartition d'hydrogène dissous au sein du matériau. La cinétique d'adsorption est contrôlée par le taux de recouvrement en hydrogène θ (cf. équation 1.2), tandis que la concentration en hydrogène dissous, calculée par la loi de Sieverts (cf. équation 1.12).

1.4 Comportement de l'hydrogène au sein du métal

Une fois absorbé dans le matériau, l'atome d'hydrogène peut se loger dans les sites interstitiels du métal, ou bien se retrouver piégé réversiblement ou irréversiblement, au niveau des types de pièges à hydrogène présents selon le type d'acier (dislocations, précipités, etc.). Dans la suite, nous noterons C_L la concentration d'hydrogène en position réticulaire, et C_T la concentration d'hydrogène piégé. La concentration totale en hydrogène vaut $C = C_L + C_T$. Dans un premier temps, un paragraphe présentera les mécanismes de diffusion de l'hydrogène, puis nous présenterons le piégeage de l'hydrogène, pour finir par présenter l'équilibre entre ces deux populations d'hydrogène.

1.4.1 L'hydrogène diffusible

Diffusion réticulaire de l'hydrogène

L'origine de la diffusion réticulaire de l'hydrogène dans un métal est le gradient de concentration en hydrogène entre la surface et le coeur du métal, créé par l'absorption de l'hydrogène. La diffusion réticulaire de l'atome d'hydrogène consiste en une série de « sauts » d'un site interstitiel au suivant, sauts qui nécessitent une énergie d'activation permettant de passer la barrière énergétique entre deux sites. La première et la seconde lois de Fick décrivent classiquement la diffusion réticulaire de l'hydrogène en l'absence de toute autre force motrice. Gradients de contrainte, de température ou existence d'un champ électrique peuvent également être à l'origine de la diffusion de l'hydrogène. En effet, en raison de son grand volume molaire partiel, l'hydrogène est sensible aux champs de contrainte [40]. Dans le cas isotherme et en l'absence de champ électrique, le flux d'hydrogène $\vec{J}_m$, exprimé en atomes/ m^2 /s, s'exprime par la relation suivante [13] :

$$\vec{J}_m = -D_L \vec{\nabla} C_L + \frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \vec{\nabla} \sigma_h \quad (1.1)$$

où D_L est le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans les sites interstitiels, $\bar{V}_H$ est le volume molaire partiel de l'hydrogène (cf. tableau 1.1), σ_h est la contrainte hydrostatique, R est la constante des gaz parfaits et T est la température. D'après l'équation 1.1, la diffusion réticulaire de l'hydrogène est pilotée par le gradient de concentration d'hydrogène et le gradient de contrainte hydrostatique. Cette relation indique que l'hydrogène diffuse vers les zones de

l'acier où la concentration d'hydrogène réticulaire est la plus faible, et vers les zones où la pression hydrostatique est la plus forte.

Soit un système de volume V et de surface S . L'équation de conservation de l'hydrogène dans ce système s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \{C_L + C_T\} dV + \int_S \vec{J}_m \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (1.2)$$

où $\vec{n}$ est la normale unitaire à la surface. Rappelons que $C = C_L + C_T$ est la concentration totale en hydrogène. L'équilibre entre les populations d'hydrogène réticulaire et piégé est géré par la théorie d'Oriani, présentée plus loin (cf. section 1.4.3).

A température ambiante (25°C), les valeurs du coefficient de diffusion D_L de l'hydrogène sont très différentes selon la structure de l'acier. Pour les structures ferritiques α , on trouve des valeurs autour de $D_L = 9,5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, tandis que pour les structures austénitiques γ , les valeurs du coefficient de diffusion sont autour de $D_L = 2,1 \times 10^{-16} \text{ m}^2/\text{s}$ [1]. Pour les aciers martensitiques, la littérature donne une valeur d'environ $D_L = 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ [25, 28].

Autres mécanismes de diffusion

D'autres mécanismes de diffusion dans l'acier sont également possibles. Le premier est la diffusion par les courts-circuits de diffusion, en présence de défauts linéaires (dislocations) ou planaires (joints de grain). Ces défauts constituent des lieux du réseau atomique où la diffusion se fait en général plus rapidement. Ce mécanisme n'est pas observé dans les structures ferritiques présentant des coefficients de diffusion réticulaire élevés mais intervient dans les structures à coefficient de diffusion d'hydrogène faible telles que les structures austénitiques stables (nickel ou acier inoxydable).

Le second mécanisme, proposé en premier par Bastien et Azou [41] et mis en évidence par Blavette et al [42] par une technique d'analyse 3D par sonde atomique, est le transport de l'hydrogène par les dislocations. Ce processus suppose le drainage par les dislocations de l'hydrogène sous forme d'atmosphère de Cottrell.

Cas particulier de la propagation des fissures de fatigue

Selon ce mécanisme, le transport des atomes d'hydrogène se fait selon les étapes suivantes :

- Au cours de l'essai de fatigue, les molécules d'hydrogène se dissocient et sont adsorbées au niveau des marches de glissement fraîchement apparues au cours du cycle précédent.
- Au cours du cycle suivant, l'hydrogène adsorbé est transporté au sein de la zone plastifiée par la mise en mouvement des dislocations mobiles [43].

Ainsi, le transport de l'hydrogène de la surface jusqu'au cœur du matériau (appelé souvent « bulk ») peut être accéléré par le mouvement de va-et-vient des dislocations sur les plans de glissement [44] au cours du chargement cyclique. Cette question a été étudiée en profondeur par Hirth [30].

Sous chargement cyclique, l'hypothèse du transport par les dislocations mobiles semble confortée par les résultats d'une étude récente par Saintier et al [45]. A l'aide d'une analyse SIMS, les auteurs ont montré que la distance à partir de la pointe de fissure où la concentration d'hydrogène est nettement plus élevée que la concentration initiale est environ 180 fois plus élevée que la distance calculée par diffusion interstitielle. Il faut préciser qu'on estime généralement que les coefficients de diffusion du bulk et des joints de grains sont du même ordre de grandeur [43]. Ces observations montrent que l'hydrogène est transporté sur une grande distance par un mécanisme autre que la diffusion interstitielle. Par ailleurs, Tien et al [43, 46] ont utilisé un modèle de cinétique des dislocations mobiles qui suggère que l'hydrogène peut pénétrer beaucoup plus loin dans le matériau par les dislocations que par diffusion interstitielle, aux fréquences des essais cycliques conventionnels.

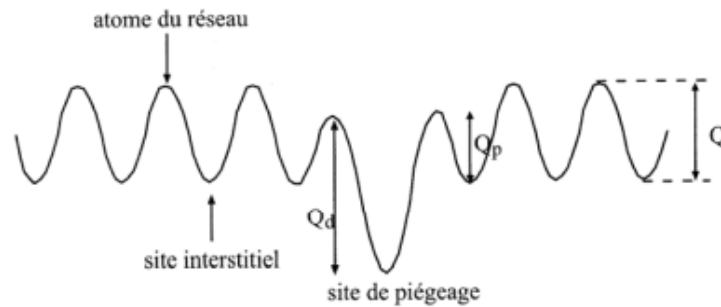


FIGURE 1.4 – Allure schématique du potentiel de réseau vu par l'hydrogène [47]. Q : énergie d'activation de la diffusion. Q_p et Q_d : énergies de piégeage et de dépiégeage

1.4.2 L'hydrogène piégé

La présence de pièges à hydrogène dans un acier influence grandement son comportement en présence d'hydrogène. Le phénomène de piégeage a pour effet d'augmenter la solubilité apparente de l'hydrogène, de diminuer sa diffusivité apparente et de favoriser des phénomènes de surconcentration locale en hydrogène, accentuant l'effet fragilisant de l'hydrogène [48]. Le piégeage a pour origine l'existence d'une force d'attraction qui modifie la probabilité de saut dans une direction donnée ou d'une perturbation locale du réseau cristallin qui modifie la fréquence de saut. Ainsi, un site de piégeage est un site microstructural préférentiel [49] pour l'hydrogène

où le potentiel est moins élevé que dans un site interstitiel. La figure 1.4 illustre la différence de profondeur des puits de potentiel correspondant aux pièges et aux sites interstitiels, ainsi que les barrières énergétiques que doit franchir un atome d'hydrogène pour être piégé, dépiégé, et pour pouvoir « sauter » d'un site interstitiel à un autre.

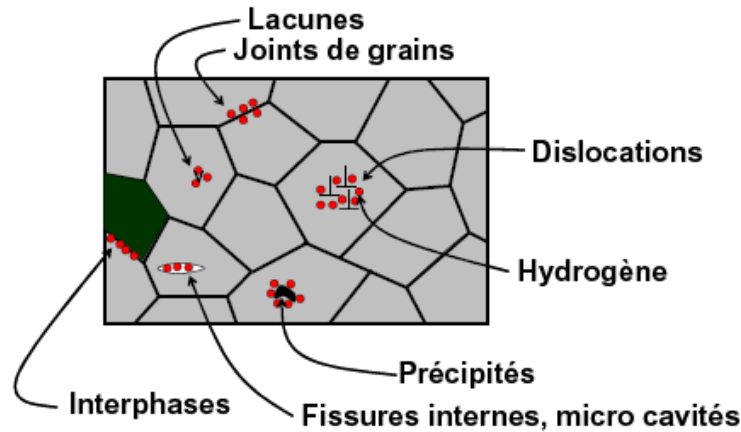


FIGURE 1.5 – Schématisation des sites de piégeage de l'hydrogène [50]

Les différents types de piégeages possibles de l'hydrogène dans un métal peuvent être classés selon les catégories suivantes :

- interne ou superficielle pour la localisation du piégeage ;
- interaction électronique (champ électrique), chimique (gradient de potentiel chimique) ou interaction élastique (champ de contraintes) selon son origine physique ;
- ponctuel (atome interstitiel, substitutionnel, lacune, etc.), linéaire (dislocation), plan (interface entre phases ou joint de grains) ou volumique (microporosité, fissure) pour qualifier le piège en fonction de sa taille et de sa géométrie. La figure 1.5 schématise ces différents types de pièges ;
- piège « réversible » ou « irréversible » selon la valeur de l'énergie d'interaction hydrogène-piège.

Les notions de pièges réversibles et irréversibles permettent d'évaluer la capacité de dépiégeage à une température donnée. L'hydrogène possède une probabilité de dépiégeage plus ou moins grande, selon la profondeur du puits de potentiel (cf. figure 1.4). Un piège est considéré comme irréversible à température donnée s'il présente une probabilité quasi nulle de dépiégeage. Le tableau 1.2 présente quelques valeurs d'énergie de piégeage pour différents types de piège [1]. La classification entre pièges réversibles et irréversibles dépend fortement de la température, ainsi que du temps dont les atomes d'hydrogène disposent pour désorber. Plus la température

est élevée, plus les pièges sont réversibles. De même, pour un temps suffisamment long, la probabilité de dépiégeage devient proche de 1, et tous les types de pièges peuvent être considérés comme réversibles.

Tableau 1.2 – Energies de piégeage de l'hydrogène pour différents défauts microstructuraux dans les alliages base Fe ou Ni [1]

Nature du site	Energie de piégeage ΔW_B (kJ/mol)	
	<i>Fer/aciers ferritiques</i>	<i>Aciers austénitiques/Ni</i>
Dislocation	20 à 58	10 à 20
Joints de grain	10 à 58	10 à 20
Précipités & inclusions	MnS : 29 à 57	–
	AlN : 48 à 58	–
	Fe_3C : 57 à 84	–
	TiC : 95	–
Lacune	46 à 54	20 à 42
Surface interne, cavité	28 à 96	41 à 53

Sofronis et McMeeking [13] ont proposé une relation permettant de lier la densité de pièges à hydrogène N_T par unité de volume et la déformation plastique équivalente ϵ_p , à partir de données expérimentales pour le fer α de Kumnick et Johnson [51], qui ont associé le piégeage de l'hydrogène dans le fer à l'apparition de dislocations au cours de la déformation plastique :

$$\log_{10} N_T = 23,26 - 2,33 \exp(-5,5\epsilon_p) \quad (1.3)$$

Selon cette relation, l'augmentation de la déformation plastique équivalente ϵ_p entraîne l'augmentation du nombre de pièges à hydrogène dus à la présence de dislocations. En première approximation, cette relation permet de calculer localement la densité de pièges N_T à la déformation plastique équivalente.

1.4.3 Equilibre local

L'équilibre local entre les populations d'hydrogène diffusible et d'hydrogène piégé réversiblement a été étudié par Oriani [52] en 1970. Selon ses travaux, cet équilibre est régi par une constante d'équilibre K_T , qui dépend des concentrations d'hydrogène diffusible C_L et d'hydrogène piégé réversiblement C_T et de l'énergie de piégeage ΔW_B :

$$K_T = \frac{a_T}{a_L} = \exp \left\{ \frac{-\Delta W_B}{RT} \right\} \quad (1.4)$$

où a_L est l'activité de l'hydrogène réticulaire et a_T l'activité de l'hydrogène piégé, R est la constante des gaz parfaits et T la température (en K). L'énergie de piégeage ΔW_B dépend du type de piège (cf. tableau 1.2). Cette relation permet d'exprimer la concentration d'hydrogène piégé C_T en fonction de C_L :

$$C_T = \frac{N_T}{1 + \frac{1}{K_T C_L}}. \quad (1.5)$$

Les équations 1.4 et 1.5 indiquent qu'une variation de la concentration d'hydrogène réticulaire modifie la concentration d'hydrogène piégé réversiblement. Réciproquement, la diffusion de l'hydrogène dans le réseau atomique du métal est directement affectée par la présence de pièges dans le matériau. Il est à noter que cette théorie considère que le piégeage de l'hydrogène est réversible. Le taux d'occupation d'un piège augmente avec l'énergie de piégeage et diminue lorsque la température augmente.

Le chapitre 6 présentera une étude numérique de la diffusion couplée de l'hydrogène sous chargement statique. L'évolution des populations d'hydrogène interstitiel et piégé sera étudié en détail au travers d'une simulation de diffusion de l'hydrogène sous chargement statique.

1.5 Mécanismes de FPH

Depuis la première mise en évidence du phénomène de FPH par Johnson [53] en 1874, de nombreux auteurs ont proposé des mécanismes permettant d'expliquer l'influence délétère de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des métaux. Bien que de nombreuses théories aient été proposées dans la littérature, on ne présentera ici que celles susceptibles d'opérer dans les conditions de l'étude expérimentale menée au laboratoire. En effet, le but de ce travail de thèse est d'appuyer la construction du modèle sur la campagne expérimentale sous hydrogène, afin de créer un dialogue entre les observations et les simulations.

Les trois principaux mécanismes susceptibles d'opérer dans les conditions expérimentales de notre étude sont fondés sur :

- Une diminution de l'énergie de cohésion du métal due à la présence d'hydrogène (modèle HEDE pour Hydrogen-Enhanced DEcohesion) ;
- Les interactions hydrogène/plasticité (modèle HELP pour Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity) ;
- Une nucléation et une émission de dislocations depuis la surface assistée par la présence d'hydrogène adsorbé (modèle AIDE pour Adsorption-Induced Dislocation Emission).

Les paragraphes suivants présentent ces mécanismes. S'en suivra une discussion sur la pertinence de chacune de ces théories, en particulier dans le cas de la FPH en fatigue.

1.5.1 Hydrogen-Enhanced DEcohesion (HEDE)

Le mécanisme HEDE a été proposé par Troiano [54] en 1960 et approfondi par Oriani [52]. Ce modèle suppose que la présence d'hydrogène interstitiel ou ségrégué aux joints de grain entraîne une dilatation du réseau atomique, réduisant ainsi l'énergie de cohésion du réseau, et donc l'énergie de création de surface. Ce mécanisme est très proche du concept de réduction d'énergie de surface [55,56], qui stipule que la présence d'impuretés (telles que l'hydrogène) abaisse l'énergie de surface, augmentant de ce fait la force motrice de création de surface, *i.e* de création de fissure. Les atomes d'hydrogène s'accumulent dans les sites de piégeage, tels que les interfaces ou les joints de grain, et y réduisent l'énergie de cohésion.

La diffusion de l'hydrogène n'est pas uniquement guidée par le gradient de concentration d'hydrogène, mais aussi par le gradient de pression hydrostatique. Par ailleurs, on associe généralement aux aciers à haute résistance une zone plastifiée restreinte en fond de fissure. Ainsi, on peut facilement atteindre la concentration critique en hydrogène dans la zone en fond de fissure, entraînant ainsi la propagation de la fissure. Ce modèle est cependant à confirmer expérimentalement.

La figure 1.6 illustre le principe du mécanisme HEDE. La présence d'hydrogène ségrégué diminue l'énergie de cohésion du réseau, favorisant la propagation des fissures.

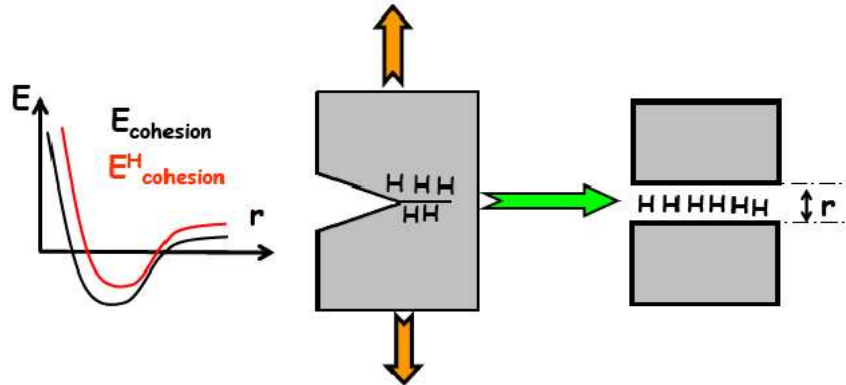


FIGURE 1.6 – Schéma illustrant le principe du mécanisme HEDE [50]

1.5.2 Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity (HELP)

Le mécanisme HELP [57–65] est basé sur l'hypothèse que l'hydrogène augmente la mobilité des dislocations dans les systèmes de glissement préférentiels en pointe de fissure par un effet de barrière élastique, ce qui entraîne localement un abaissement de la résistance au cisaillement du matériau. Ce mécanisme suppose donc que la présence d'hydrogène dans le matériau provoque

une forte localisation de la plasticité, qui induit une diminution de la ductilité macroscopique du matériau.

La théorie HELP est confortée par des tractions MET in situ réalisées en environnement hydrogène. Ainsi, Robertson [66] met en évidence au MET, sur des lames minces en traction sur un acier austénitique 310S, que la distance entre deux dislocations diminue avec la présence d'hydrogène, et que la mobilité des dislocations est accrue. Ferreira et al [67,68] ont montré que, dans un aluminium de haute pureté, le glissement dévié est inhibé par la présence d'hydrogène via la stabilisation des composantes coins des dislocations et la diminution de l'énergie de défaut d'empilement. On peut en conclure que l'hydrogène favorise le glissement planaire et favorise ainsi la création d'empilements de dislocations. La figure 1.7 illustre le principe du mécanisme HELP.

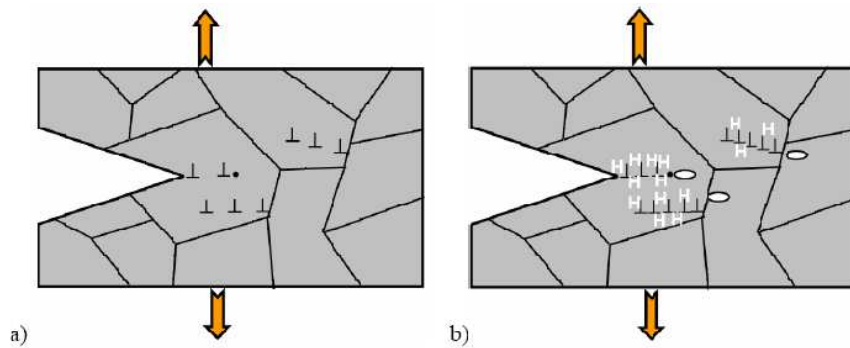


FIGURE 1.7 – Schéma illustrant le principe du mécanisme HELP [50]

1.5.3 Adsorption-Induced Dislocation Emission (AIDE)

Suite à l'observation de fortes similitudes entre les faciès de rupture des matériaux fragilisés par l'hydrogène et par les métaux liquides, Lynch a proposé le mécanisme AIDE [18,69]. Il suppose que les populations d'hydrogène adsorbé en surface et en subsurface du matériau diminuent localement l'énergie de cohésion du métal et facilitent la nucléation et l'émission de dislocations depuis la surface.

Lors de la rupture ductile classique des aciers, les dislocations sont essentiellement émises depuis le volume du matériau par des sources de Franck-Read. Seule une faible proportion d'entre elles interagit avec le front de fissure pour produire une avancée de celle-ci ou permettre la nucléation d'une cavité en amont du front. La propagation nécessite donc une forte déformation plastique. L'adsorption d'hydrogène en surface et en subsurface du matériau perturbe l'organisation des premières couches atomiques de la surface du matériau et diminue son énergie de

cohésion. L'hydrogène facilite alors l'émission des dislocations depuis la surface par un mécanisme qui n'est cependant pas détaillé dans le cadre de ce modèle. La nucléation de microcavités en amont de la fissure est facilitée et assiste sa propagation.

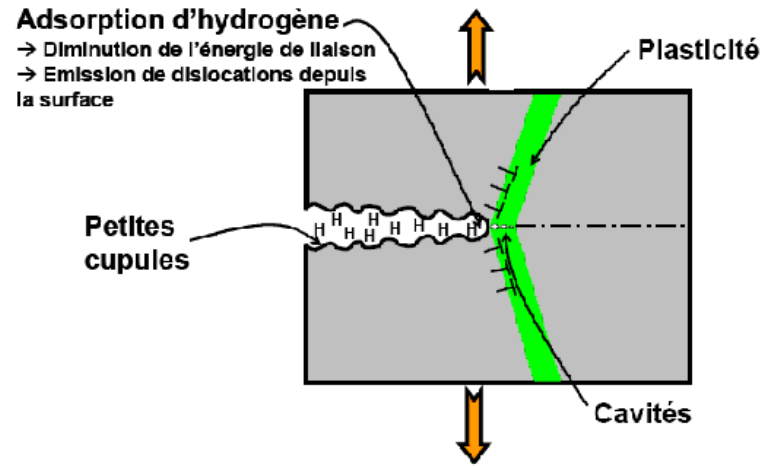


FIGURE 1.8 – Schéma illustrant le principe du mécanisme AIDE [50]

Le mécanisme AIDE reprend donc les principes fondamentaux des modèles HEDE et HELP, mais suppose de plus que les phénomènes de décohésion et de localisation de la plasticité interviennent près de la surface, plus exactement en fond de fissure, et non dans le volume du matériau. La figure 1.8 illustre le principe du mécanisme AIDE.

1.5.4 Discussion

Les mécanismes de FPH présentés ci-dessus reposent chacun sur une hypothèse différente :

- *Mécanisme HEDE* : diminution de l'énergie de cohésion. Bien qu'il ait été proposé en premier [54], ce modèle n'a reçu aucune preuve expérimentale.
- *Mécanisme HELP* : localisation de la plasticité due aux interactions hydrogène-dislocations.
- *Mécanisme AIDE* : perturbation par l'hydrogène adsorbé de l'organisation des atomes de la surface du métal qui facilite l'émission de dislocations depuis celle-ci. Ce mécanisme, essentiellement basé sur l'observation et l'interprétation de faciès de rupture, n'a fait l'objet que de peu d'études à cause de la difficulté de compréhension et d'observation des phénomènes de surface comme l'adsorption.

Plusieurs auteurs [14, 16–18] s'accordent désormais pour dire que la FPH est très probablement due à une combinaison de ces différents mécanismes et non à un seul d'entre eux. Le mécanisme dominant dépend alors de la microstructure, des modes de glissement, du facteur d'intensité des contraintes, et de la température. Tous ces paramètres ont une influence sur le

trajet de fissure et l'apparence de la surface de rupture [70]. Sous chargement monotone, Olden et al [71] observent que l'augmentation de la concentration d'hydrogène en pointe de fissure favorise la propagation des fissures, que ce soit par le mécanisme HEDE ou le mécanisme HELP. D'après les auteurs, il pourrait exister une compétition permanente entre le phénomène de décohésion (HEDE) et l'émission de dislocations depuis la pointe de fissure (HELP), entre la rupture fragile et la rupture ductile, et toujours à un niveau de contrainte plus faible qu'en environnement inerte. Il ne semble donc pas pertinent de comparer toutes les études tentant d'identifier le (ou les) mécanisme(s) à l'origine de la fragilisation par l'hydrogène entre elles ; il est plus correct d'identifier le mécanisme prépondérant dans des conditions expérimentales similaires.

Dans le but de mieux comprendre les contributions des différents mécanismes de ruine (HEDE, HELP, AIDE) et de disposer d'un outil prédictif, un modèle de propagation de fissures de fatigue assistée par l'hydrogène est développé dans le cadre de ce travail. Le chapitre suivant propose un état de l'art des modèles de « zone cohésive » et de leurs applications à la modélisation de la propagation des fissures de fatigue, et à la modélisation de la FPH.

Chapitre 2

Choix du modèle d'endommagement

 OBJECTIF PREMIER de notre étude est de disposer d'un outil robuste, simple et prédictif de la tenue en présence de fissure des matériaux métalliques en atmosphère d'hydrogène gazeux sous chargement cyclique. 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 [72], les modèles macroscopiques de la Mécanique de l'Endommagement (Lemaitre [73], Bonora [74], Hamon et al [75]) et les approches numériques plus récentes, telles que la Méthode des Éléments Finis Étendus (X-FEM) [76, 77], et les modèles de zone cohésive (MZC) proposés à l'origine par Dugdale [78] et Barenblatt [79]. Les modèles de zone cohésive, par les concepts simples qu'ils introduisent, comme l'énergie de séparation, peuvent permettre d'éclaircir les mécanismes à l'origine de l'apparition et de la propagation des fissures en chargement cyclique. Par ailleurs, plusieurs travaux utilisent ce type de modèle pour simuler avec succès la propagation de fissures assistée par l'hydrogène sous chargement monotone [24, 25] et la propagation des fissures de fatigue dans différents types de matériaux [19–23]. Ces éléments ont motivé notre choix d'utiliser un modèle de zone cohésive dans notre étude. À terme, une approche globale de couplage multiéchelle entre différentes approches pourra être envisagée. Par exemple, les approches aux échelles fines, comme les approches à partir des premiers principes (*ab initio*) [27], l'approche de la Dynamique des Dislocations Discrètes et les calculs de dynamique moléculaire [80] ou de plasticité cristalline [81], pourraient permettre de modéliser plus finement le comportement mécanique du matériau, et d'étudier entre autres les mécanismes de transport de l'hydrogène, de calculer des densités de pièges, etc.

2.1 Modèles de zone cohésive

Le concept de la zone cohésive a été introduit par Dugdale [78] et Barenblatt [79] dans les années 1960. Avec l'amélioration des outils de modélisation numérique, ce concept est devenu un modèle de propagation de fissure très utilisé dans les calculs éléments finis, par sa simplicité et ses possibilités d'utilisation variées.

2.1.1 Un peu d'histoire

Cette méthode fut appliquée pour la première fois par Needleman [82] à l'étude de la propagation de fissures dans les matériaux ductiles. Plus de dix ans plus tard, Hillerborg et al [83] utilisèrent pour la première fois un modèle de zone cohésive dans un modèle éléments finis pour étudier la propagation de fissures dans le béton, suivis entre autres dans les années 1980 de Petersson [84] et Carpinteri [85]. La méthode de la zone cohésive (souvent abrégée MZC) a ensuite été utilisée pour les matériaux fragiles (Camacho et Ortiz [86]) et quasi-fragiles (Yang et al [87]), et pour modéliser la séparation viscoélastique (Rahul-Kumar et al [88], Song et al [89]) et viscoplastique (Corigliano et al [90]). Les modèles de zone cohésive sont également de plus en plus utilisés pour modéliser la propagation des fissures de fatigue. Entre autres, Bouvard et al [23] ont développé un modèle de zone cohésive avec une loi de comportement spécifique adaptée aux chargements cycliques, dont ils ont étendu l'utilisation au cas de fatigue-fluage à haute température. La section 2.1.3 s'attardera sur l'utilisation du modèle de zone cohésive sous chargement de fatigue. Récemment, l'approche de la zone cohésive a été utilisée par Olden et al [25, 91, 92] pour modéliser la FPH des aciers sous chargement monotone, à l'aide d'une loi de traction-séparation influencée par l'hydrogène. La section 2.1.5 présentera plus en détail cette approche.

Avant toute chose, nous allons présenter les principes des modèles de zone cohésive.

2.1.2 Principes des modèles de zone cohésive

Les modèles de zone cohésive décrivent la zone en fond de fissure où le matériau est endommagé (appelée couramment « process zone ») par une relation entre le vecteur des contraintes cohésives $\vec{T}$ (forces cohésives par unité de surface) et le saut de déplacement entre les lèvres de la fissure (ou vecteur « ouverture de la fissure ») $\vec{\delta}$, appelée loi de traction-séparation (couramment abrégée TSL). La figure 2.1 illustre les diverses utilisations des MZC.

L'utilisation de ce type de modèle dans un code éléments finis comme Abaqus se fait en utilisant des éléments cohésifs, dont le comportement, régi par la TSL choisie, traduit la dégradation progressive du matériau au cours du chargement. Les éléments cohésifs ne représentent

pas le matériau « physique », mais permettent de représenter la diminution des contraintes cohésives lors de l'endommagement progressif du matériau. Lorsque ce dernier est localement trop dégradé, l'élément cohésif rompt et la fissure peut se propager.

Les MZC possèdent l'avantage d'être un outil flexible, dans le sens où l'on peut donner à la loi de traction-séparation la forme souhaitée en fonction du problème traité. La diversité des lois de traction-séparation que l'on trouve dans la littérature en témoigne : lois linéaire [95], multi-linéaire [93,96], polynomiale [97] et exponentielle [98] entre autres en chargement monotone, lois irréversibles pour la propagation de fissures de fatigue [19–23], etc. Certains auteurs ont étudié l'influence de la forme de TSL utilisée sur les courbes charge - déplacement obtenues pour des éprouvettes de rupture sous chargement monotone. Tandis que Tvergaard et Hutchinson [96] n'ont observé qu'une influence négligeable de la TSL sur les résultats des simulations, Scheider et Brocks [99] ont quant à eux relevé des différences notables.

La figure 2.2 (a) montre l'exemple de la TSL issue du modèle de zone cohésive proposé par Bouvard et al [23], tandis que la figure 2.2 (b) illustre les notions de « forward zone » et de « wake zone » [94]. La contrainte au point A n'est pas assez élevée pour que l'interface commence à se séparer. Au point C, la contrainte cohésive est maximale ($= T_{max}$). La contrainte diminue ensuite jusqu'à la rupture de l'élément cohésif au point E. La longueur de la « process zone »

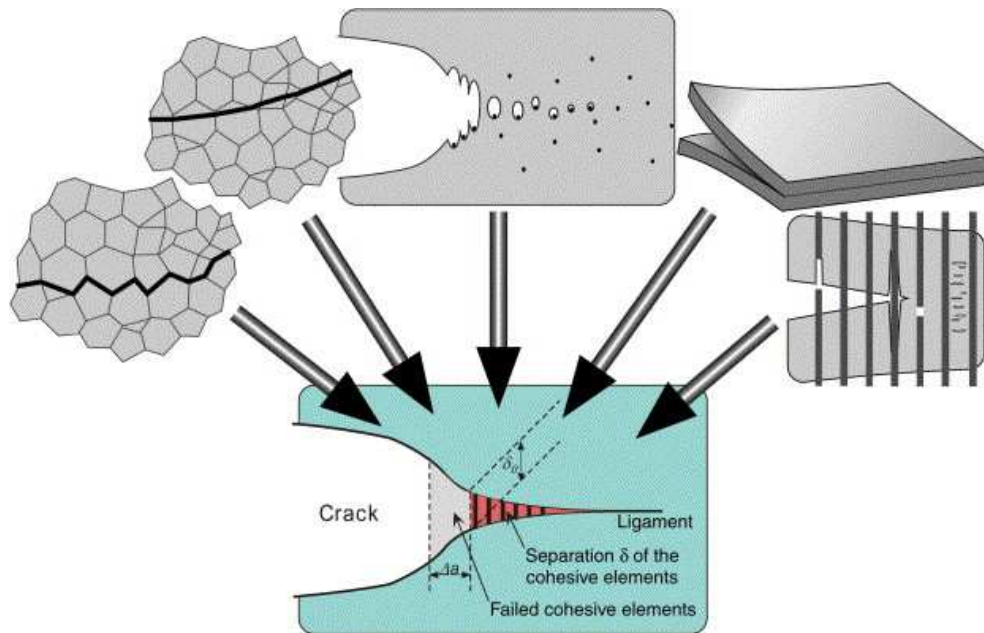


FIGURE 2.1 – Modélisation de la propagation d'une fissure à l'aide d'éléments cohésifs [93] : utilisation pour la rupture intergranulaire, intragranulaire, ductile, pour la séparation d'interfaces et la délamination des composites

représente la distance le long du trajet de fissure où l'état des éléments cohésifs est compris entre les points A et E (rupture). La notion de « forward zone » représente la zone située du point A au point C, tandis que la « wake zone » est la zone comprise entre les points C et E. La taille de la « process zone », constituée des zones « forward » et « wake », doit être prise en compte dans la construction d'un modèle, car elle limite la taille des éléments cohésifs, qui doivent être assez nombreux pour décrire correctement les forts gradients de contrainte en fond de fissure.

En général, l'utilisation d'un modèle de zone cohésive suppose de connaître le trajet de la fissure. Une rangée d'éléments cohésifs est alors placée le long du trajet de fissure supposé, et l'endommagement progressif du matériau est uniquement localisé dans ces éléments (cf. figure 2.3).

Néanmoins, des études récentes [100–102] utilisent des modèles de zone cohésive dans le but de prédire non seulement la vitesse de propagation des fissures, mais également le trajet de fissure. Dans cette approche, appelée cohésive-volumique, des éléments cohésifs sont positionnés entre toutes les mailles du maillage éléments finis. Les fissures peuvent alors s'amorcer et se propager au niveau de chaque élément cohésif du modèle. Ce type d'utilisation des MZC pose un certain nombre de problèmes numériques. En particulier, ce type de modèle souffre de problèmes de dépendance au maillage. Tijssens et al [103] ont été les premiers à illustrer l'influence de la taille de maille sur le trajet de fissure en utilisant une TSL intrinsèque, c'est-à-dire possédant

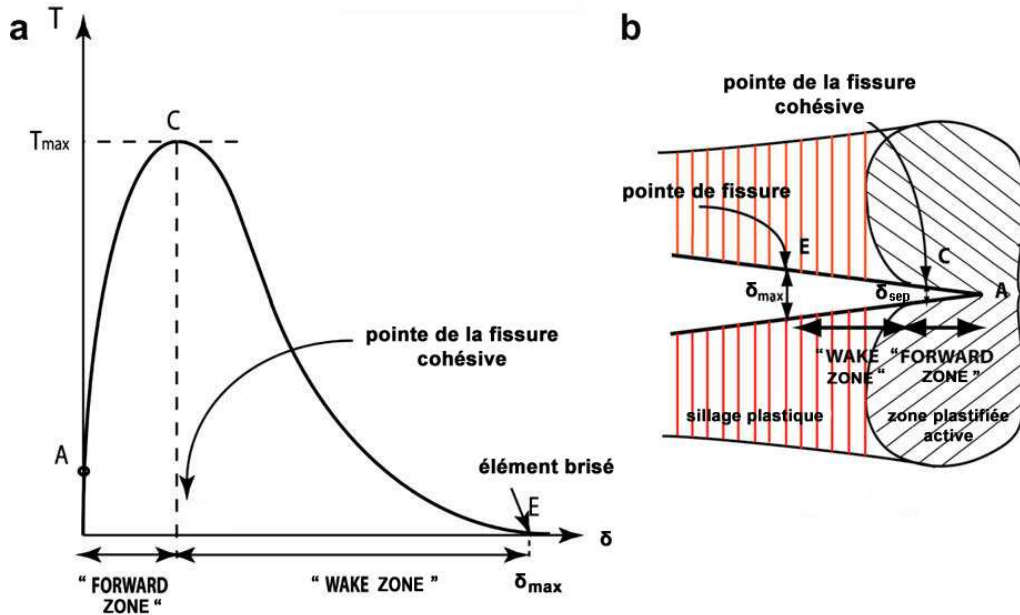


FIGURE 2.2 – (a) Loi de traction-séparation [23] et (b) schéma de la « process zone » [94]

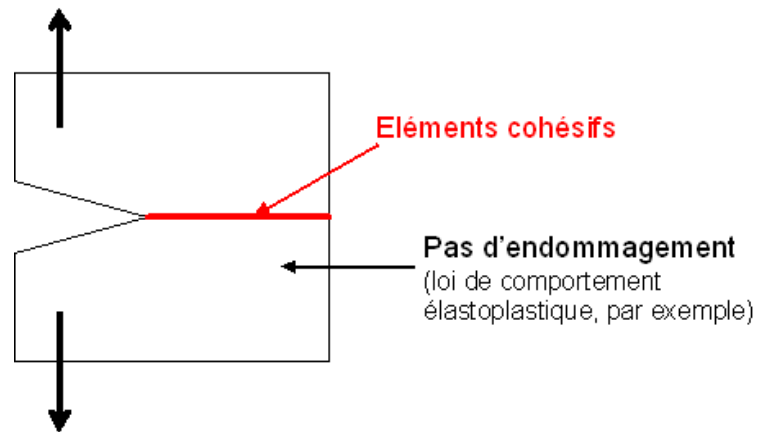


FIGURE 2.3 – Illustration schématique du placement des éléments cohésifs sur le trajet de fissure connu d’une éprouvette Compact Tension (CT). L’endommagement est localisé dans les éléments cohésifs, et le comportement du matériau est régi par une loi de comportement continue (élastique, élastoplastique, etc.)

une raideur initiale finie (cf. figure 2.4). L’implémentation d’éléments cohésifs dotés de ce type de loi dans un maillage éléments finis ajoute une souplesse artificielle au modèle, d’autant plus importante que le nombre de surfaces cohésives est grand, c’est-à-dire que la taille de maille est petite [104]. Pour limiter ce phénomène, un critère micromécanique permettant de quantifier et maîtriser cette souplesse additionnelle a été proposé par Monerie [105]. L’approche cohésive-volumique engendre également des instabilités numériques, pouvant être limitées par l’utilisation de méthodes de régularisation.

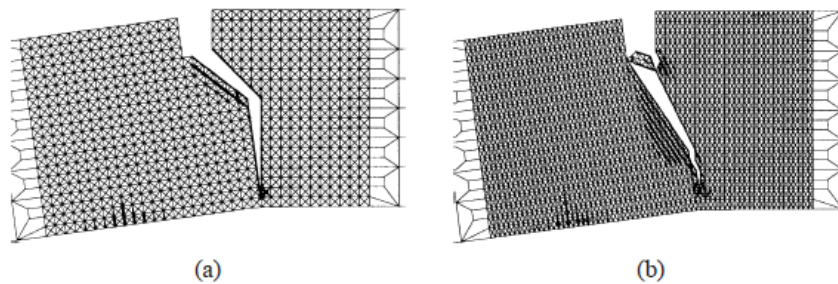


FIGURE 2.4 – Illustration de la dépendance au maillage des modèles cohésifs [103]. Zoom près de l’entaille sur un essai de flexion quatre points pour deux tailles de maille : (a) 5×5 mm et (b) $2,5 \times 5$ mm

La finalité du travail présenté ici étant de simuler la propagation des fissures de fatigue sur

une éprouvette CT, notre choix s'est naturellement porté sur la localisation de l'endommagement dans une unique couche d'éléments cohésifs le long du trajet de fissure connu. La section suivante présente plus en détail l'utilisation de l'approche de la zone cohésive avec des lois de traction-séparation adaptées aux chargements de fatigue.

2.1.3 Les modèles de zone cohésive en fatigue

Des études de plus en plus nombreuses portent sur la modélisation de la propagation par fatigue dans tous types de matériaux par des modèles de zone cohésive. Nguyen et al [21] ont montré que l'utilisation des lois de traction-séparation usuelles (linéaire [95], multi-linéaire [96], polynomiale [97] et exponentielle [98]) en chargement cyclique d'amplitude constante entraîne l'arrêt de la fissure à partir d'un certain nombre de cycles, à cause de la redistribution des contraintes en pointe de fissure.

Ainsi, des lois de traction-séparation « irréversibles », adaptées aux chargements cycliques, ont été développées pour modéliser spécifiquement la propagation des fissures de fatigue, dans les matériaux métalliques [20–22], dans les polymères [106] et dans les composites [107]. Récemment, Roe et Siegmund [19] et Siegmund [108] ont proposé, pour l'étude de la propagation des fissures de fatigue dans les interfaces entre matériaux, des lois de traction-séparation à l'allure exponentielle sous chargement monotone, dont l'endommagement sous chargement cyclique est décrit par une variable à l'évolution irréversible. La figure 2.5 présente certaines de ces lois. Par ailleurs, Laverne et al [109] ont construit un modèle de zone cohésive à partir d'ingrédients élémentaires (principe de minimisation d'énergie, énergie de surface de type Dugdale-Barenblatt, condition d'irréversibilité), qui a permis d'obtenir des lois d'évolution de type Paris. Pour modéliser la propagation des fissures sous chargement cyclique dans un superalliage monocristallin, Bouvard et al [23] ont utilisé l'approche de la zone cohésive avec une TSL adaptée ; ils ont ensuite étendu leur modèle à l'étude de la fatigue-fluage. Ural et al [110] se sont quant à eux intéressés aux effets de surcharge sur la propagation des fissures de fatigue à l'aide d'un modèle de zone cohésive irréversible, à l'instar de Yang et al [87] et Roe et al [19]. Plus récemment encore, Jha et Banerjee [111] et Banerjee et Manivasagam [112] ont utilisé une TSL avec une variable d'endommagement à l'évolution irréversible en vue de prédire la propagation des fissures en fatigue sous chargements triaxiaux.

Notre étude s'inspire des principes de construction de ces lois de traction-séparation spécifiques adaptées aux chargements de fatigue. La section 3.1 présentera le développement d'une nouvelle TSL dédiée à la propagation des fissures de fatigue assistée par l'hydrogène, construite dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles.

2.1.4 Cadre thermodynamique

Dans la littérature, une grande majorité des modèles de zone cohésive a été développée de manière phénoménologique, pour répondre à un besoin de modélisation précis, sans se soucier du cadre thermodynamique. Seuls certains auteurs, comme Jaubert et Marigo [113], Bouvard et al [23], et Turon et al [114] ont mis l'accent sur cet aspect, en construisant leurs modèles dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles. C'est également la contrainte que nous nous sommes fixée dans ce travail.

Potentiel thermodynamique

Suivant la formulation générale des modèles d'endommagement continu [115, 116], on se donne un potentiel thermodynamique $\phi(\vec{\delta}, D)$ (énergie libre par unité de surface de l'interface), fonction convexe de ses arguments, où le vecteur $\vec{\delta}$ est le vecteur « ouverture de la fissure », et D est la variable d'endommagement du modèle. La loi de traction-séparation, c'est-à-dire la

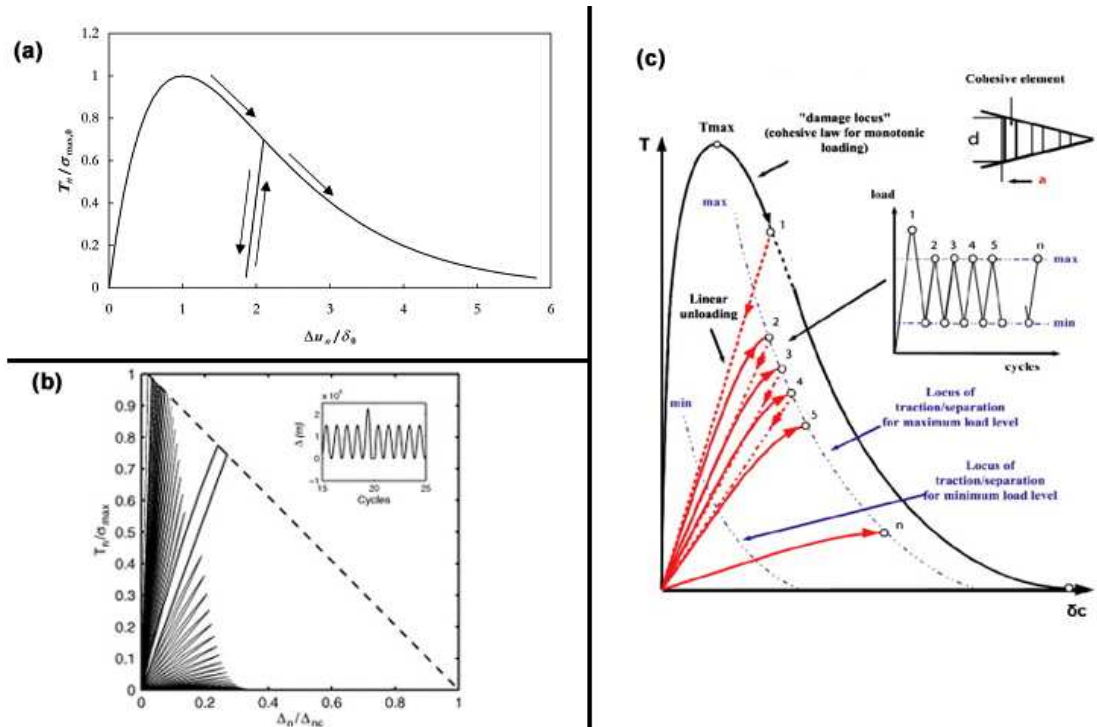


FIGURE 2.5 – Lois de traction-séparation irréversibles proposées par : (a) Roe et Siegmund [19] pour la séparation d'interfaces sous chargement cyclique, (b) Maiti et Geubelle [106] pour les polymères, et (c) Bouvard et al [23] pour la propagation de fissures de fatigue dans les superalliages monocristallins.

relation entre le vecteur des contraintes cohésives $\vec{T}$ et le vecteur « ouverture de la fissure » $\vec{\delta}$ dérive ensuite de ce potentiel par la relation suivante :

$$\vec{T} = \frac{\partial \phi}{\partial \vec{\delta}}. \quad (2.1)$$

Lois d'évolution

Pour contruire le modèle de zone cohésive dans un cadre thermodynamique, il est important de connaître l'expression de la puissance dissipée dans la zone cohésive (où il y a endommagement), afin de s'assurer qu'elle est positive à tout instant, et par conséquent que le modèle respecte l'inégalité de Clausius-Duhem (cf. équation 2.2). On se place dans un cas isotherme avec une température homogène (la dissipation thermique est nulle). En faisant l'hypothèse des petites déformations, l'inégalité de Clausius-Duhem s'écrit :

$$\vec{T} \cdot \dot{\vec{\delta}} - \dot{\phi} = \mathcal{P} \geq 0. \quad (2.2)$$

L'inégalité 2.2 combine les deux premiers principes de la thermodynamique et le théorème de l'énergie cinétique, sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP). $\vec{T} \cdot \dot{\vec{\delta}}$ représente l'opposé de la contribution des contraintes cohésives agissant dans la « process zone ». Enfin, $\mathcal{P}$ représente la puissance dissipée par unité de surface. Dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles, le respect de l'inégalité de Clausius-Duhem est une condition nécessaire pour qu'une évolution soit thermodynamiquement admissible. Par conséquent, la loi de traction-séparation doit donc assurer la positivité de la puissance surfacique dissipée $\mathcal{P}$.

Notons D la variable d'endommagement du modèle et Y la force thermodynamique associée à la variable D , définie comme :

$$Y = -\frac{\partial \phi}{\partial D}, \quad (2.3)$$

où ϕ est le potentiel thermodynamique choisi, fonction de $\vec{\delta}$ et de la variable d'endommagement D . Les relations 2.1 et 2.3 permettent d'écrire la puissance dissipée par unité de surface sous la forme :

$$\mathcal{P} = Y \cdot \dot{D}. \quad (2.4)$$

La force thermodynamique Y étant une forme quadratique définie positive [116], le respect de l'inégalité de Clausius-Duhem impose que l'évolution de la variable interne D soit irréversible (*i.e.* $\dot{D} \geq 0$). Pour définir la loi d'évolution de la variable D , on se donne un domaine de réversibilité $f = 0$ (cadre non-visqueux), où f est une fonction à valeur scalaire, continue,

convexe, non négative et nulle à l'origine dans l'espace de ses variables [116]. Dans le cadre d'un modèle associé, pour des évolutions non-visqueuses, la donnée de la surface de charge $f = 0$ suffit à définir également les lois d'évolution par l'hypothèse de normalité :

$$\dot{D} = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial Y}, \quad (2.5)$$

où λ est un multiplicateur déterminé par la relation de cohérence $\dot{f} = 0$. L'hypothèse de normalité, associée aux différentes propriétés de la fonction f , permet de vérifier *a priori* la positivité de la dissipation $\mathcal{P}$ (cf. relation 2.4), *i.e.* le second principe de la thermodynamique.

On trouve dans la littérature de nombreux modèles adaptés aux chargements mixtes monotones [117–120], qui ne satisfont pas l'inégalité fondamentale de Clausius-Duhem. C'est ce constat qui a amené Turon et al [114] à développer un modèle de zone cohésive pour la délaminage des composites sous mode de chargement mixte dans un cadre thermodynamique rigoureux. Il s'agit à l'heure actuelle du modèle implémenté dans Abaqus (cf. section 4.1.1).

2.1.5 Modèle de zone cohésive influencé par l'hydrogène

La théorie HEDE, présentée dans la section 1.5, postule que l'influence néfaste de l'hydrogène se traduit par un abaissement de l'énergie de cohésion du réseau métallique. Dans le cas du modèle de zone cohésive, cette énergie est représentée par l'aire sous la courbe de traction-séparation. Récemment, Jiang et Carter [27] ont utilisé un cycle thermodynamique de Born-Haber pour évaluer l'énergie de séparation idéale (c'est-à-dire sans plasticité) du fer et de l'aluminium en présence de différentes quantités d'hydrogène. Ces auteurs avaient pour objectif de quantifier l'influence néfaste de l'hydrogène dissous en position interstitielle ou de l'hydrogène ségrégré aux joints de grain sur l'énergie de cohésion du réseau atomique, ce qui constitue la base de la théorie HEDE (cf. section 1.5). La figure 2.6 illustre le cycle de Born-Haber. Dans cette section, nous allons montrer que le mécanisme HEDE peut être modélisé par une approche de la zone cohésive influencée par l'hydrogène.

Dans cette approche, on envisage le scénario où un métal contient de l'hydrogène dissous, qui se ségrège rapidement au niveau des surfaces nouvellement formées lors de l'avancée de la fissure. Comme l'illustre la figure 2.6, une première étape consiste à retirer l'hydrogène dissous du métal (ΔH_s représente l'opposé de l'énergie de dissolution de l'hydrogène dans le métal). Dans la deuxième étape, l'énergie de rupture idéale sans hydrogène $2\gamma(0)$ peut être calculée. Enfin, l'hydrogène est ajouté sur les surfaces du métal via l'adsorption dissociative des molécules de H_2 , pour arriver à l'état final, où l'hydrogène atomique est adsorbé sur les surfaces du métal. Une fois les différentes énergies mises en jeu calculées, l'évolution de l'énergie de séparation idéale en

fonction du taux de recouvrement en hydrogène θ peut être calculée par la formule :

$$2\gamma(\theta) = -\Delta H_s + 2\gamma(0) + E_{ad}(\theta) \quad (2.6)$$

Comme illustré sur la figure 2.7, Jiang et Carter sont arrivés à la conclusion que l'énergie de rupture idéale d'un métal décroît quasi-linéairement avec le taux de recouvrement en hydrogène. Par ailleurs, les auteurs ont calculé l'énergie de séparation en l'absence d'hydrogène (soit $\theta = 0$) : $2\gamma(0) = 4,86 \text{ J/m}^2$. Pour le fer, une corrélation des données de la figure 2.7 par Serebrinsky et al [17] donne la relation :

$$2\gamma(\theta) = (1 - 1,0467\theta + 0.1687\theta^2) \times 2\gamma(0) \quad (2.7)$$

Serebrinsky et al [17] ont utilisé cette corrélation dans un modèle de zone cohésive avec une TSL linéaire, ajoutant la dépendance de l'énergie de séparation, *i.e.* l'aire sous la courbe de traction-séparation, vis-à-vis du taux de recouvrement en hydrogène via l'équation 2.7. Par ailleurs, d'après les calculs de Van der Ven et Ceder [121] pour l'hydrogène dissous dans l'aluminium (1 1 1), l'ouverture critique pour laquelle l'élément cohésif est rompu est insensible à la valeur du taux de recouvrement θ , pour toutes ses valeurs allant de 0 à 1. La figure 2.8 illustre l'influence du taux de couverture θ sur une TSL bilinéaire, en faisant l'hypothèse que θ n'influe pas sur l'ouverture critique.

D'après Hondros et Seah [122], le taux de recouvrement en hydrogène peut être calculé par

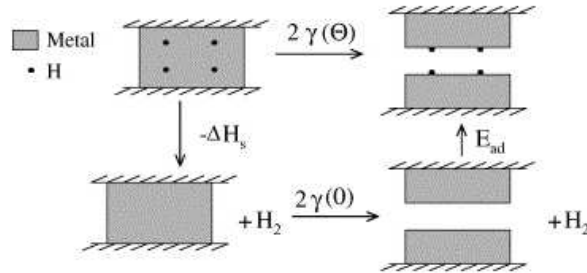


FIGURE 2.6 – Cycle thermodynamique de Born-Haber pour le calcul de l'énergie de séparation idéale ($2\gamma(\theta)$) suivant un plan d'un monocristal avec un taux de recouvrement en hydrogène θ . ΔH_s est l'enthalpie de solution du dihydrogène H_2 dans le volume du matériau, $\gamma(0)$ est l'énergie de surface du métal sans hydrogène, et E_{ad} représente l'énergie d'adsorption et de dissociation de H_2 en atomes d'hydrogène sur les surfaces du métal

la relation suivante :

$$\theta = \frac{c}{c + \exp\left(\frac{-\Delta g_b^0}{RT}\right)} \quad (2.8)$$

où c est la fraction molaire d'hydrogène dans le matériau, Δg_b^0 représente la différence d'énergie libre entre l'interface et le cœur du matériau, R est la constante des gaz parfaits et T la température. Dans les travaux de Olden et al [123], les auteurs calculent le taux de recouvrement à

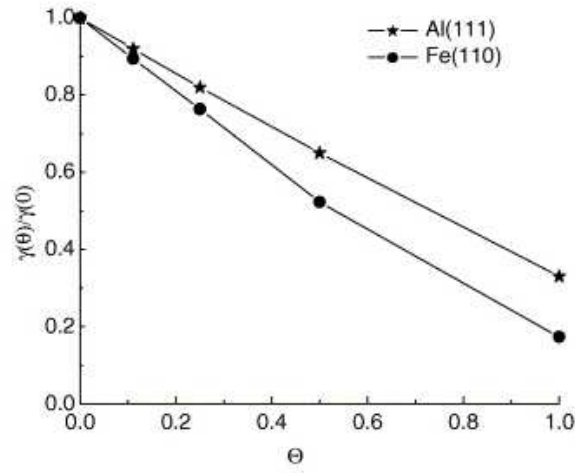


FIGURE 2.7 – Evolution de l'énergie de surface normalisée $\gamma(\theta)/\gamma(0)$ pour le fer (1 1 0) et l'aluminium (1 1 1) en fonction du taux de recouvrement en hydrogène θ

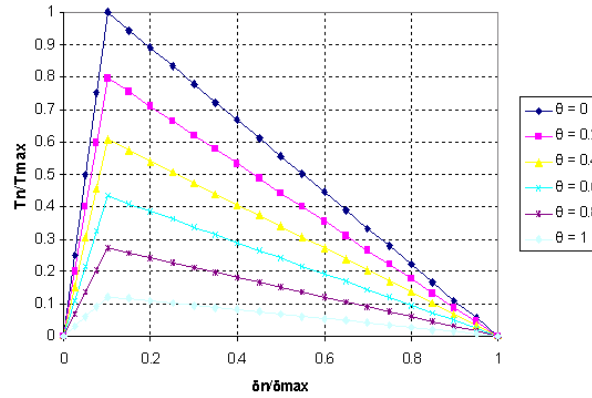


FIGURE 2.8 – Influence du taux de recouvrement en hydrogène θ sur une TSL bilinéaire normale normalisée, en faisant l'hypothèse que l'ouverture critique δ_{max} est indépendante de θ [121]

partir de la concentration totale en hydrogène $C = C_L + C_T$, où C_L représente la concentration d'hydrogène interstitiel et C_T la concentration d'hydrogène piégé. En comparaison, dans l'étude récente menée par Brocks et al [124], le taux de recouvrement est calculé à partir de la concentration d'hydrogène diffusible C_L . Dans notre étude, θ sera calculé à partir de la concentration totale en hydrogène C .

Pour conclure, cette approche montre que l'utilisation d'un modèle de zone cohésive pour modéliser la FPH est cohérente avec la théorie HEDE. Certains auteurs [17, 25, 27, 121, 125] 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.

Nous utiliserons cette approche dans le modèle de zone cohésive développé dans ce travail (cf. partie II).

2.2 Bilan critique

L'objectif de cette section est de faire une synthèse des différents points évoqués dans cette première partie bibliographique, afin de mettre en lumière les points importants et les raisons de nos choix.

L'approche de la zone cohésive est un outil relativement facile à mettre en œuvre, utilisable pour de nombreux types de matériaux et adaptable à de nombreuses problématiques, comme en témoigne la multitude d'articles de la littérature utilisant cette approche. Cette souplesse des modèles de zone cohésive explique leur succès grandissant. En particulier, les MZC ont été récemment utilisés pour modéliser le phénomène de FPH par plusieurs auteurs [24, 25] sous chargement monotone. Comme présenté précédemment (cf. section 2.1.5), l'utilisation d'un modèle de zone cohésive est intrinsèquement compatible avec le mécanisme HEDE (cf. section 1.5). En effet, la théorie HEDE postule que la présence d'hydrogène entraîne une diminution de l'énergie de cohésion ; cette influence peut être directement implémentée dans le modèle de zone cohésive, en ajoutant une dépendance des paramètres de la loi de traction-séparation vis-à-vis de la concentration en hydrogène.

L'étude bibliographique montre que les MZC peuvent être utilisés avec succès pour prédire la propagation des fissures de fatigue et le phénomène de fragilisation par l'hydrogène des matériaux métalliques sous chargement monotone. Comme précisé dans l'introduction, l'objectif premier de notre étude étant de disposer d'un outil prédictif de la tenue en fatigue des matériaux métalliques en atmosphère hydrogénée, construit dans un cadre thermodynamique, il semble raisonnable de se tourner vers un modèle de type MZC. La littérature ne fait état d'aucun modèle

de propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène. Seul Holobut [126] a récemment proposé une méthode pour prédire la fissuration en fatigue de fines plaques de fer chargées en hydrogène, en utilisant des facteurs d'intensité de contraintes modifiés par la présence d'hydrogène dans une loi de Paris améliorée. Cette approche n'a qu'un but prédictif, et ne permet pas de comprendre la physique sous-jacente. L'étude présentée dans ce manuscrit est une réponse au besoin de modèles solides pour la propagation des fissures de fatigue assistée par l'hydrogène ; on se propose d'utiliser une loi de traction-séparation qui traduit la dégradation progressive des contraintes cohésives d'un métal sous chargement cyclique, et dont les paramètres dépendent de la concentration en hydrogène (cf. 3.1). Il sera possible d'améliorer le modèle présenté en ajoutant la prise en compte d'autres mécanismes de FPH, d'autres mécanismes de transport de l'hydrogène, de modifier la loi de traction-séparation, etc.

Pour conclure, au vu des différents éléments présentés dans ce premier chapitre, l'approche de la zone cohésive offre le plus de possibilités à l'heure actuelle pour modéliser l'influence de l'hydrogène sur la propagation des fissures de fatigue. La partie II va présenter la construction du modèle, du développement d'une nouvelle loi de traction-séparation adaptée au problème étudié à l'utilisation d'une équation de diffusion couplée de l'hydrogène dans les matériaux métalliques.

Deuxième partie

Construction du modèle

Abstract

THE SECOND PART PRESENTS THE CONSTRUCTION of the model. First of all, the first chapter describes the formulation of the model, with the development of a specific traction-separation law dedicated to fatigue crack propagation assisted by hydrogen (see section 3.1), and the model of coupled diffusion of hydrogen in the bulk material (see section 3.2). A new traction-separation law is developed, which predicts a gradual degradation of stiffness under cyclic loading. The cohesive zone model is built in the framework of the Thermodynamics of Irreversible Processes. The damage variable D is defined as the maximum of two distinct contributions : a monotonous contribution D_m and a cyclic contribution D_c , with distinct laws of evolution. Through the influence of hydrogen coverage θ on the parameters of the traction-separation law, the presence of hydrogen implies a degradation of the separation energy, thus modeling the HEDE mechanism. Later on, section 3.2 describes the model of lattice hydrogen diffusion [14]. It accounts for the influence of hydrostatic stress on the interstitial diffusion of hydrogen, as well as trapping of hydrogen in dislocations. It is assumed that a local equilibrium exists between interstitial hydrogen and trapped hydrogen. The number of trap sites per unit volume of the material is determined from the local equivalent plastic deformation.

The second chapter of part II deals with the numerical implementation of the model. First of all, the implementation of the specific traction-separation law in the finite element code Abaqus, via a UEL subroutine, is presented. Then, the following section addresses the numerical implementation of the model of coupled hydrogen diffusion. Given the similarities between the mass conservation and heat equations, the coupled temperature-displacement procedure – available in Abaqus – is used to model the coupled diffusion-mechanics problem. Thus, subroutine UMATHHT can be used to implement the hydrogen diffusion equation. Furthermore, subroutine USDFLD is used to compute the local gradient of hydrostatic stress. Finally, in order to use the Von Mises plasticity model with a non-linear kinematic hardening in the coupled temperature-displacement procedure of Abaqus, a UMAT subroutine is needed (see section 4.3). In the last section, the geometry and mesh of the Abaqus model of a Compact Tension specimen are presented. The issue of mesh size is discussed.

ANS CETTE PARTIE, nous présentons les étapes de construction du modèle de propagation de fissures de fatigue assistée par l'hydrogène dans les matériaux métalliques, ainsi que son implémentation dans le code éléments finis Abaqus.

Le premier chapitre s'attardera sur la théorie du modèle. En premier lieu, on présentera le développement dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles d'une loi de traction-séparation 2D adaptée aux chargements cycliques et influencée par le taux de recouvrement en hydrogène. Ensuite, le modèle de diffusion couplée de l'hydrogène sera présenté.

Le second chapitre traitera de la réalisation du modèle Abaqus. Tout d'abord, on présentera le modèle Abaqus d'une éprouvette Compact Tension (géométrie, conditions aux limites, maillage). Enfin, on présentera en détail l'implémentation du modèle construit dans le premier chapitre, avec la programmation de plusieurs sous-routines Fortran (UEL, USDFLD, UMATHT et UMAT).

Chapitre 3

Formulation du modèle

3.1 Développement d'une loi de traction-séparation spécifique

UNE ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE menée dans la partie I a mis en évidence la nécessité de développer une nouvelle loi de traction-séparation pour élément cohésif pour pouvoir répondre à notre cahier des charges.

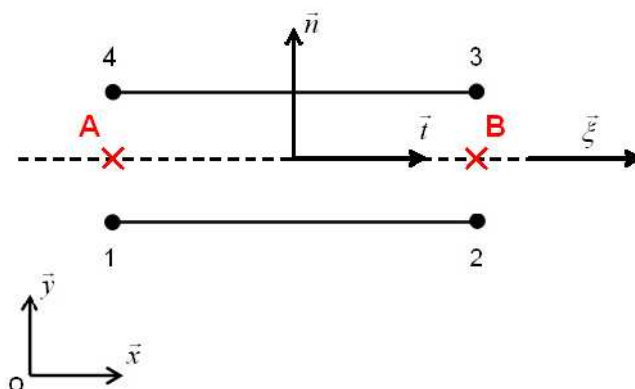


FIGURE 3.1 – Schéma d'un élément cohésif 2D linéaire à quatre nœuds

Nous souhaitons développer un modèle à deux dimensions. La figure 3.1 présente l'élément cohésif linéaire (à quatre nœuds) développé, adapté à un calcul en deux dimensions. Le point A représente le milieu du segment [nœud 1, nœud 4], et le point B est situé au milieu du segment [nœud 2, nœud 3]. La ligne médiane de l'élément, représentée en pointillés, passe par les points A et B. La position de l'élément est repérée dans le repère global $(O, \vec{x}, \vec{y})$. On associe à l'élément cohésif la base orthonormale $(\vec{n}, \vec{t})$. Le vecteur tangent unitaire $\vec{t}$ a la même direction que la ligne médiane et est orienté du point A vers le point B. Le vecteur normal unitaire $\vec{n}$ est déterminé par

la relation $\vec{t} \cdot \vec{n} = 0$, et de telle sorte à ce que la base $(\vec{x}, \vec{y})$ soit directe. Enfin, ξ est la coordonnée locale de l'élément 1D de référence auquel est ramené l'élément cohésif lors de l'intégration par la méthode de la quadrature de Gauss. Au point A, ξ vaut -1 et au point B, ξ vaut 1. Par la suite, le vecteur des contraintes cohésives $\vec{T}$ et le vecteur « ouverture de la fissure » $\vec{\delta}$ seront exprimés dans la base locale $(\vec{n}, \vec{t})$. Leur composante suivant $\vec{n}$, appelée composante normale, sera notée respectivement T_n et δ_n , et leur composante tangentielle (suivant $\vec{t}$) sera notée T_t et δ_t .

3.1.1 Développement dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles

En accord avec les différentes étapes présentées dans la section 2.1.4, la loi de traction-séparation (TSL) est construite à partir d'un potentiel thermodynamique ϕ (cf. relation 3.1).

$$\phi = \frac{1}{2}k_n(1-D)\frac{\langle\delta_n\rangle^2}{\delta_0} + \frac{1}{2}k_{comp}\frac{\langle-\delta_n\rangle^2}{\delta_0} + \frac{1}{2}k_t\frac{\delta_t^2}{\delta_0} \quad (3.1)$$

La variable D est une variable d'endommagement, adimensionnelle, qui évolue de manière irréversible de 0 (état initial non endommagé) à 1 (état complètement dégradé). Les paramètres k_n , k_{comp} et k_t , exprimés en unité de force par unité de surface, représentent respectivement la rigidité initiale en traction, la rigidité en compression et la rigidité en cisaillement de l'élément. Le paramètre δ_0 , exprimé en unité de longueur, permet d'adimensionner l'équation 3.1. Il faut noter que l'expression du potentiel thermodynamique ϕ est de degré 2 vis-à-vis des composantes de $\vec{\delta}$; cela impose la linéarité du comportement mécanique à D fixé (élasticité linéaire). Les crochets de MacAuley $\langle \cdot \rangle$ sont définis par la relation suivante :

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2}(x + |x|) \quad (3.2)$$

L'expression des composantes du vecteur des contraintes cohésives $\vec{T}$ en fonction des composantes du vecteur ouverture $\vec{\delta}$ (TSL) est obtenue par dérivation de la relation 3.1 :

$$T_n = \frac{\partial \phi}{\partial \delta_n} = k_n(1-D)\frac{\langle\delta_n\rangle}{\delta_0} + k_{comp}\frac{\langle-\delta_n\rangle}{\delta_0} \quad (3.3a)$$

$$T_t = \frac{\partial \phi}{\partial \delta_t} = k_t\frac{\delta_t}{\delta_0} \quad (3.3b)$$

Dans notre étude, nous cherchons à comparer les résultats du modèle numérique à des essais de propagation de fissure sur des éprouvettes CT sollicitées en mode I. Par conséquent, on ne s'intéressera qu'à la dégradation de la rigidité dans la direction normale, et la TSL développée fait intervenir la variable d'endommagement D uniquement dans le terme correspondant à la

sollicitation de l'élément en traction, c'est-à-dire lorsque $\delta_n \geq 0$. Lorsqu'il est sollicité en compression ou en cisaillement, la réponse de l'élément est inconditionnellement linéaire. L'élément cohésif possède une très forte rigidité en compression k_{comp} , afin d'éviter l'interpénétration de la matière.

Evolution de la variable d'endommagement

L'endommagement peut résulter de différents types de chargement (dans notre cas, monotone et cyclique) [9, 75]. L'endommagement global est l'assemblage de ces contributions élémentaires, qui ont chacune une cinétique propre. Dans le cadre de la modélisation des bétons, Mazars [127] a distingué un endommagement de traction et un endommagement de compression, qu'il a assemblés linéairement dans une variable unique D . En ce qui concerne les modèles de zone cohésive en fatigue, Roe et Siegmund [19] ont utilisé deux contributions à la variable d'endommagement unique D : une contribution monotone et une contribution cyclique. La variable d'endommagement D est alors définie comme la plus élevée de ces deux contributions. Nous allons nous inspirer de cette approche. La variable d'endommagement D est une fonction d'un endommagement monotone D_m et d'un endommagement cyclique D_c (cf. relation 3.4). L'état de dégradation de l'élément à un instant donné est ainsi représenté par la plus grande des contributions D_m et D_c , qui évoluent de manière irréversible de 0 à 1. Lorsque l'une ou l'autre atteint sa valeur maximale de 1, l'élément cohésif rompt, permettant la propagation de la fissure.

$$D(t) = \max(D_m(t), D_c(t)) \quad (3.4)$$

Dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles, l'évolution de la variable d'endommagement est déterminée par un seuil d'endommagement. Dans notre étude, les endommagements D_m et D_c évoluent indépendamment l'un de l'autre ; leurs lois d'évolution sont déterminées par deux seuils distincts.

Pour alléger les notations, notons Y la force thermodynamique associée à la variable d'endommagement D . Elle est définie par la relation suivante :

$$Y = -\frac{\partial \phi}{\partial D} = \frac{1}{2} k_n \frac{\langle \delta_n \rangle^2}{\delta_0} \quad (3.5)$$

La dérivée de Y par rapport au temps est donnée par :

$$\dot{Y} = \frac{dY}{dt} = k_n \dot{\delta}_n \frac{\langle \delta_n \rangle}{\delta_0} \quad (3.6)$$

La valeur maximale atteinte par l'ouverture normale δ_n au cours du chargement ($= \max_{[0,t]} \delta_n$) sera notée $\delta_{n,max}$. De la même manière, on notera Y_{max} la valeur maximale atteinte par la force thermodynamique Y au cours du chargement.

Evolution de la contribution cyclique

L'évolution de l'endommagement cyclique D_c est déterminée par le seuil $f_c = 0$, exprimé par la relation 3.7. Le choix de la forme de f_c est inspiré des travaux de Bouvard et al [23]. L'objectif fixé était de formuler dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles un seuil d'endommagement qui permette l'endommagement sous chargement cyclique, tout en conservant un nombre restreint de paramètres.

$$f_c = \int_0^t \langle \dot{Y} \rangle (1 - D_c)^{n_c} d\tau - (C_c + m_c D_c) = 0. \quad (3.7)$$

Selon la relation 3.7, il ne peut y avoir évolution de la variable cyclique D_c que si la dérivée $\dot{Y}$ est strictement positive; en se souvenant de l'équation 3.6, cela équivaut à $\dot{\delta}_n > 0$ (l'élément est sollicité en traction) et $\dot{\delta}_n > 0$ (montée en charge). Les décharges sont donc linéaires. L'utilisation d'une intégrale sur le temps permet d'ajouter la notion de « cumul », et donc de prendre en compte l'histoire du chargement. La dépendance linéaire de la forme « $C_c + m_c D_c$ » de l'expression 3.7 se retrouve dans de nombreux travaux, dont ceux de Marigo [128].

L'équation 3.7 fait intervenir trois paramètres, C_c , m_c et n_c . C_c représente la limite d'élasticité initiale, et est de même dimension que la force thermodynamique Y (énergie par unité de surface). Egalement homogène à une énergie par unité de surface, le paramètre m_c contrôle l'énergie de séparation, représentée graphiquement par l'aire sous la TSL, et donc l'évolution de D_c . Plus sa valeur est grande, plus il faut dissiper d'énergie pour rompre l'élément cohésif. Enfin, n_c est un exposant réel qui permet de modifier l'énergie de séparation sans modifier de façon significative la valeur maximale de la contrainte cohésive T_{max} . La définition de n_c dans l'intervalle $[1,3[$ permet d'assurer une diminution de T_n lorsque l'endommagement progresse. Le choix de cet intervalle de définition est justifié en détails dans l'annexe A.

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 $\dot{f}_c = 0$ qui, pour un processus non visqueux, traduit le fait qu'en charge, les états mécaniques tels que $f_c > 0$ sont interdits :

$$\begin{aligned}
 \dot{f}_c &= 0 \\
 \Leftrightarrow \langle \dot{Y} \rangle (1 - D_c)^{n_c} - m_c \dot{D}_c &= 0 \\
 \Leftrightarrow \dot{D}_c &= \frac{k_n}{m_c} (1 - D_c)^{n_c} \langle \dot{\delta}_n \rangle \frac{\langle \delta_n \rangle}{\delta_0}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

La relation 3.8 indique que $\dot{D}_c \geq 0$; cette relation traduit l'irréversibilité de l'évolution de D_c , et donc l'irréversibilité de l'endommagement des éléments cohésifs sous chargement cyclique.

Evolution de la contribution monotone

L'évolution de la variable monotone D_m est déterminée par la fonction seuil f_m , semblable à la fonction f_c :

$$f_m = \int_0^t \dot{Y}_{max} (1 - D_m)^{n_m} d\tau - (C_m + m_m D_m) \tag{3.9}$$

Dans la relation 3.9, le paramètre C_m contrôle la limite d'élasticité en chargement monotone ; tant que la valeur maximale de la force thermodynamique Y est strictement inférieure à C_m , la variable D_m n'évolue pas. Le paramètre m_m contrôle l'énergie de séparation sous chargement monotone, et donc l'évolution de D_m . Les paramètres C_m et m_m sont homogènes à une énergie par unité de surface. n_m est un exposant réel compris entre 1 et 3 exclus qui permet de contrôler l'énergie de séparation sous chargement monotone indépendamment de la valeur maximale de la contrainte cohésive T_{max} . La forme de f_m indique que l'évolution de la variable D_m n'est possible que si la valeur maximale de la force thermodynamique Y augmente.

Tant que le seuil n'est pas atteint ($f_m < 0$), la variable D_m n'évolue pas. Lorsque le seuil est atteint ($f_m = 0$), l'évolution de la variable d'endommagement monotone est déterminée à partir de la relation de cohérence $\dot{f}_m = 0$:

$$\begin{aligned}
 \dot{f}_m &= 0 \\
 \Leftrightarrow k_n \frac{\delta_{n,max}}{\delta_0} \dot{\delta}_{n,max} (1 - D_m)^{n_m} - m_m \dot{D}_m &= 0 \\
 \Leftrightarrow \dot{D}_m &= \frac{k_n}{m_m} (1 - D_m)^{n_m} \dot{\delta}_{n,max} \frac{\delta_{n,max}}{\delta_0}
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

La relation 3.10 traduit le fait que, sous condition que le seuil $f_m = 0$ soit atteint, l'endommagement monotone évolue uniquement si l'ouverture normale δ_n à l'instant considéré est plus grande que l'ouverture maximale atteinte au cours du chargement antérieur. Tous les chargements n'entraînant pas d'évolution de la valeur maximale de δ_n , dont le cyclage à ouverture

maximale δ_n imposée, n'entraînent pas d'évolution de la contribution D_m . Il est à noter que la relation 3.10 indique que $\dot{D}_m \geq 0$; cette relation traduit l'irréversibilité de l'évolution de D_m , et donc l'irréversibilité de l'endommagement des éléments cohésifs sous chargement monotone.

Pour récapituler, l'endommagement est décrit par la variable d'endommagement D (unique variable interne du modèle), définie comme le maximum d'une contribution monotone D_m et d'une contribution cyclique D_c , dont les évolutions sont déterminées par les seuils d'endommagement 3.7 et 3.9. Cette définition implique que l'évolution de la variable d'endommagement D est irréversible, et que :

$$\begin{aligned}\dot{D} &= \dot{D}_m \text{ si } D_m \geq D_c \\ \dot{D} &= \dot{D}_c \text{ si } D_c < D_m.\end{aligned}$$

Allure de la loi de traction-séparation

La figure 3.3 montre l'évolution de la composante normale du vecteur $\vec{T}$, normalisée par sa valeur maximale T_{max} , en fonction de la composante normale δ_n du vecteur ouverture de la fissure normalisée par sa valeur maximale δ_{max} . Le chargement imposé, en terme d'ouverture normale δ_n , est représenté sur la figure 3.2.

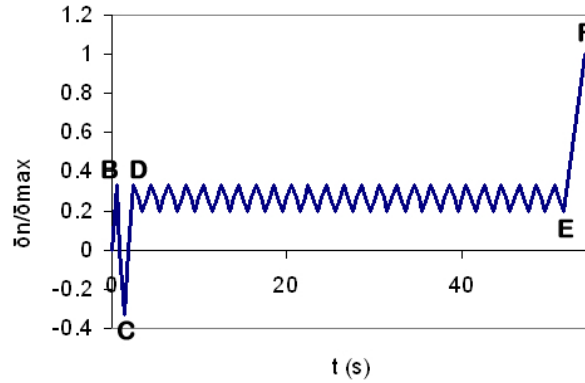


FIGURE 3.2 – Evolution de δ_n correspondant à la TSL représentée sur la figure 3.3

Sur la figure 3.3, on observe que la contrainte cohésive normale T_n est limitée par une enveloppe d'allure exponentielle, due à l'évolution de l'endommagement monotone D_m (cf. relation 3.10). Lors de la première montée en charge, la TSL normale est initialement linéaire; lorsque le seuil initial d'endommagement, représenté par la plus petite des valeurs C_c et C_m , est atteint, il y a endommagement. La première décharge (entre les points B et C), visible sur la figure 3.2, impose une ouverture négative à l'élément. Sa réponse (cf. figure 3.3) est caractérisée

par une contrainte cohésive négative et une rigidité en compression très élevée. Ensuite, comme le montre la figure 3.2, l'ouverture normale δ_n évolue de manière cyclique avec une amplitude constante (du point D au point E). La valeur maximale de δ_n n'évoluant pas durant cette phase, la contribution monotone D_m reste constante. Au contraire, à la condition que le seuil $f_c = 0$ soit atteint, la contribution cyclique D_c évolue au cours du chargement cyclique, et devient plus grande que D_m , entraînant une baisse progressive de rigidité, visible sur la figure 3.3. Pour finir, l'ouverture imposée augmente significativement jusqu'en F et l'endommagement D_m devient à nouveau plus grand que D_c . L'évolution de la contrainte suit donc l'enveloppe monotone d'allure exponentielle, jusqu'à la rupture de l'élément pour une valeur critique de D proche de 1.

La figure 3.4 présente l'évolution de la composante tangentielle du vecteur des contraintes cohésives en fonction de la composante tangentielle du vecteur $\vec{\delta}$, inconditionnellement linéaire. Comme spécifié dans les relations 3.1 et 3.3, il n'y a pas d'endommagement de l'élément cohésif en cisaillement.

3.1.2 Influence de l'hydrogène sur les paramètres de la TSL

La loi de traction-séparation développée dans la section précédente 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

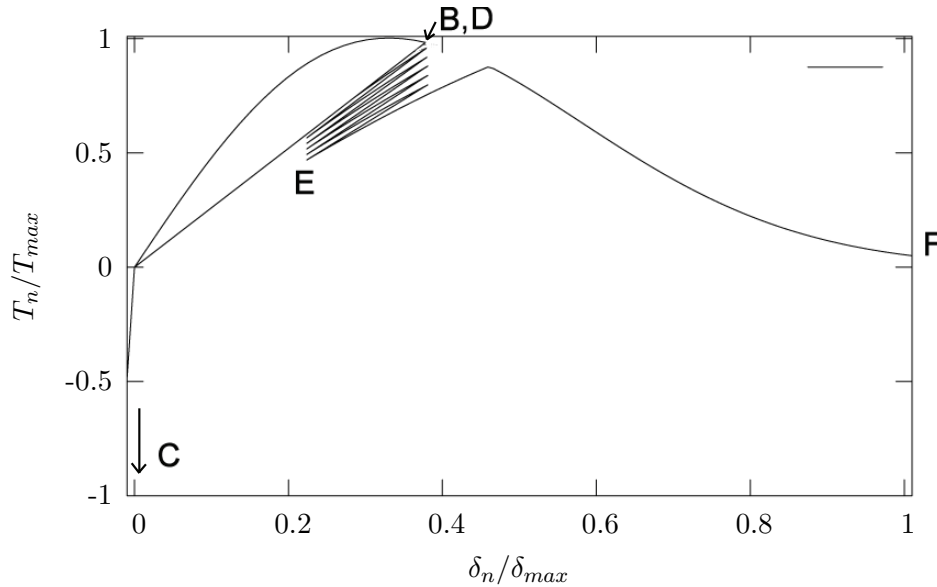


FIGURE 3.3 – Loi de traction-séparation normale normalisée sous chargement cyclique d'amplitude variable

dépendance des paramètres de la TSL vis-à-vis de la concentration locale en hydrogène. Dans cette étude, nous nous inspirons des travaux de Olden et al [25], qui ont utilisé un modèle de zone cohésive avec les TSL bilinéaire et polynomiale pour modéliser la propagation de fissures sous chargement monotone assistée par l'hydrogène. Olden et al ont utilisé la corrélation proposée par Serebrinsky et al [17] à partir des calculs des premiers principes de Jiang et Carter [27] (cf. relation 2.7) pour représenter la diminution de l'énergie de séparation avec l'augmentation du taux de recouvrement en hydrogène. Le paragraphe 2.1.5 présente en détail cette approche.

Dans notre étude, un calcul (présenté en annexe B) a permis de déterminer l'expression analytique de l'énergie de séparation sous chargement monotone $E_{rupt,m}$, représentée par l'aire sous la TSL, pour les valeurs de n_m comprises dans l'intervalle $[1,2[$:

$$E_{rupt,m} = C_m + \frac{m_m}{2 - n_m}. \quad (3.11)$$

Dès que l'exposant est supérieur ou égal à 2, l'énergie de séparation tend vers l'infini ; en pratique, l'élément cohésif rompt lorsque la valeur de la variable d'endommagement atteint une valeur proche de 1. Par conséquent, on introduit la dépendance des paramètres k_n , m_m , m_c , C_m et C_c vis-à-vis du taux de recouvrement en hydrogène θ . La corrélation de Serebrinsky et al [17] exprime la diminution de l'énergie de séparation sous chargement monotone en présence

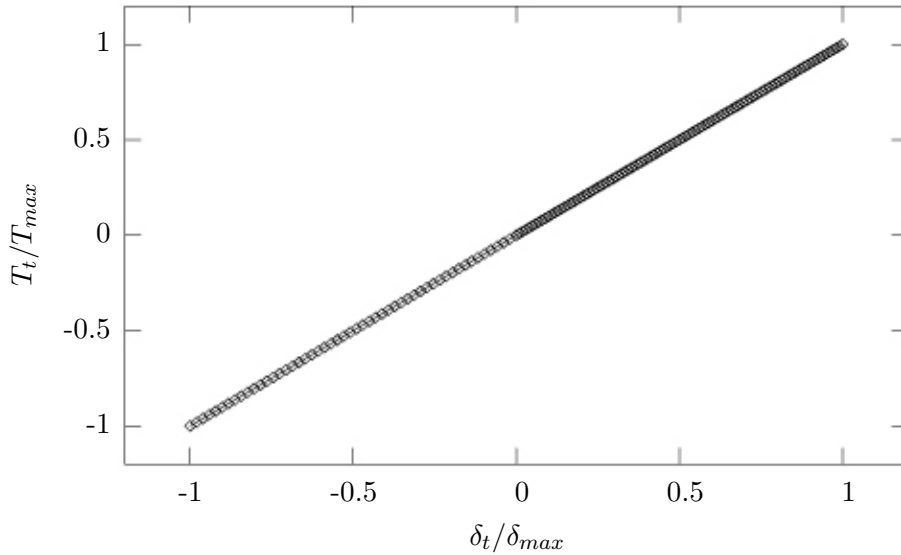


FIGURE 3.4 – Loi de traction-séparation tangentielle normalisée sous chargement cyclique ; la réponse est inconditionnellement linéaire, il n'y a pas d'endommagement en cisaillement de l'élément cohésif

d'hydrogène en fonction du taux de recouvrement (cf. relation 2.7) :

$$\frac{E_{rupt,m}(\theta)}{E_{rupt,m}(0)} = 1 - 1,0467\theta + 0,1687\theta^2 = f(\theta), \quad (3.12)$$

où (θ) et (0) signifient que la quantité est respectivement calculée en présence d'hydrogène et sans hydrogène. L'utilisation de la notation $f(\theta)$ permet d'alléger les notations.

Pour que l'ouverture critique (pour laquelle il y a rupture de l'élément cohésif) soit indépendante de la valeur de θ , l'évolution de D en fonction de l'ouverture normale δ_n doit être indépendante de θ . Par conséquent, les évolutions des deux contributions D_m et D_c doivent être indépendantes de θ . La condition précédente et la relation 3.10 permettent d'écrire les conditions suivantes :

$$\frac{k_n(\theta)}{m_m(\theta)} \frac{m_m(0)}{k_n(0)} = 1 \quad (3.13)$$

$$n_m(\theta) = n_m(0). \quad (3.14)$$

Une démarche de calcul similaire permet d'écrire les relations suivantes pour D_c :

$$\frac{k_n(\theta)}{m_c(\theta)} \frac{m_c(0)}{k_n(0)} = 1 \quad (3.15)$$

$$n_c(\theta) = n_c(0). \quad (3.16)$$

En se souvenant de l'expression de l'énergie de séparation sous chargement monotone pour $n_m \in [1, 2[$ (cf. relation 3.11) et de la relation 3.12, on peut supposer que l'évolution des paramètres m_m et C_m est la suivante :

$$\frac{m_m(\theta)}{m_m(0)} = f(\theta) \quad (3.17)$$

$$\frac{C_m(\theta)}{C_m(0)} = f(\theta). \quad (3.18)$$

De la même manière, nous allons supposer que les paramètres de l'évolution de D_c dépendent de θ par les relations :

$$\frac{m_c(\theta)}{m_c(0)} = f(\theta) \quad (3.19)$$

$$\frac{C_c(\theta)}{C_c(0)} = f(\theta). \quad (3.20)$$

Pour conclure, 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 du taux de recouvrement θ (cf. relations 3.21). Les exposants n_m et n_c sont supposés indépendants de la valeur de θ .

$$\frac{k_n(\theta)}{k_n(0)} = \frac{m_m(\theta)}{m_m(0)} = \frac{m_c(\theta)}{m_c(0)} = \frac{C_m(\theta)}{C_m(0)} = \frac{C_c(\theta)}{C_c(0)} = f(\theta). \quad (3.21)$$

La figure 3.5 présente l'influence de la valeur de θ sur la TSL normale, en utilisant les relations 3.21. On observe que l'augmentation de la valeur de θ entraîne une diminution de l'énergie de séparation et une diminution de la contrainte cohésive normale T_n . Par ailleurs, on remarque que l'ouverture critique est bien indépendante de la valeur de θ . La rigidité initiale, représentée par le paramètre k_n , diminue en présence d'hydrogène. L'endommagement commence pour la même ouverture normale δ_n , quelle que soit la valeur de θ .

3.1.3 Bilan

La TSL développée permet de modéliser la dégradation des contraintes cohésives au cours d'un chargement de fatigue. L'introduction de deux endommagements D_m et D_c , qui évoluent en parallèle et dont la valeur maximale représente l'endommagement de l'élément, permet de restreindre les contraintes cohésives sous une enveloppe d'allure exponentielle. L'élément cohésif

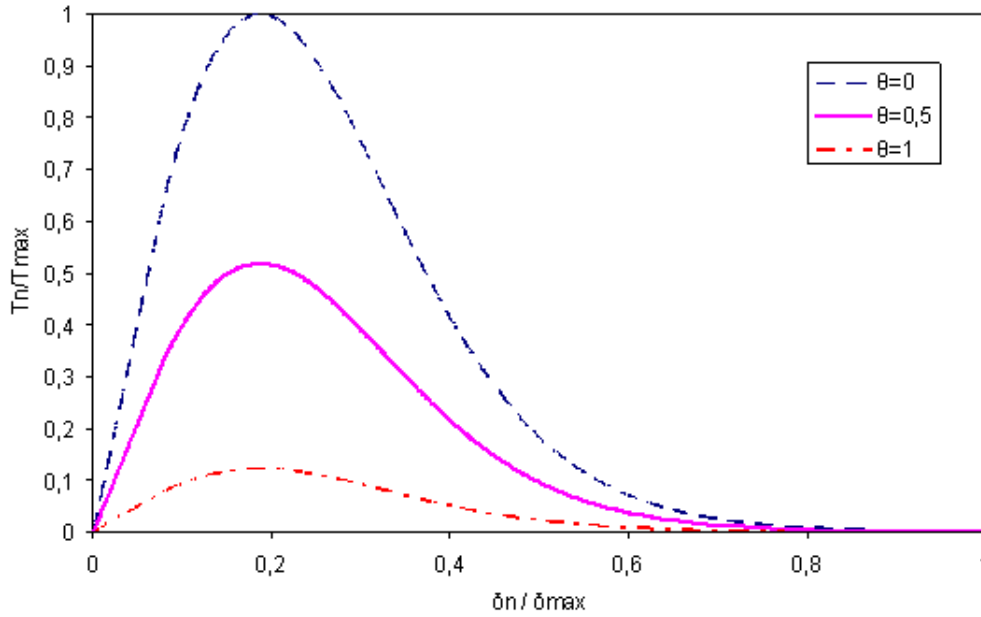


FIGURE 3.5 – Allure de la loi de traction-séparation normale normalisée sous chargement monotone sans hydrogène ($\theta = 0$) et en présence d'hydrogène ($\theta = 0,5$ et $\theta = 1$)

représente une rupture « fragile » (sans déformation plastique). La TSL a été développée dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles ; on s'assure ainsi que la puissance dissipée par endommagement est positive à tout instant. Le comportement élastoplastique du cœur du matériau va permettre d'ajouter le comportement ductile.

Les paramètres de la TSL dépendent du taux de recouvrement en hydrogène, permettant ainsi de modéliser l'influence néfaste de l'hydrogène sur l'énergie de cohésion du réseau métallique, en accord avec la théorie HEDE. La diffusion de l'hydrogène dans le cœur du matériau est modélisée par une équation de diffusion couplée, présentée dans le paragraphe suivant.

3.2 Diffusion couplée de l'hydrogène

Le modèle utilisé a été développé par Sofronis et McMeeking [13] en se basant sur la théorie d'équilibre d'Oriani [52] et Johnson et Lin [129], puis légèrement modifié par Krom et al [14]. La section 1.4.3 de la partie I a présenté les bases du modèle.

En remplaçant l'expression du flux de masse $\vec{J}_m$ par son expression (cf. relation 1.1, partie I) dans l'équation de conservation de la masse (cf. relation 1.2, partie I), et en écrivant l'équation obtenue sous sa forme locale, on obtient la relation :

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot (D_L \vec{\nabla} C_L) + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \vec{\nabla} \sigma_h \right) = 0. \quad (3.1)$$

Afin d'expliciter la dérivée partielle de C_T par rapport au temps, la théorie d'Oriani est utilisée pour écrire l'équilibre local entre l'hydrogène piégé et l'hydrogène réticulaire. En faisant l'hypothèse que les deux populations sont à l'équilibre, Oriani [52] et Johnson et Lin [129] aboutissent à la relation 1.5 (partie I), qui exprime la concentration d'hydrogène piégé C_T en fonction de C_L . De plus, on peut relier les concentrations C_L et C_T au nombre de sites interstitiels par unité de volume N_L et au nombre de pièges par unité de volume N_T par les relations suivantes :

$$C_L = \theta_L N_L \quad (3.2)$$

$$C_T = \theta_T N_T, \quad (3.3)$$

où θ_L et θ_T représentent respectivement les taux de recouvrement des sites interstitiels et des sites de piégeage.

La dérivée partielle de C_T par rapport au temps s'écrit :

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \frac{\partial C_T}{\partial C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \frac{\partial C_T}{\partial N_T} \frac{dN_T}{d\epsilon_p} \frac{d\epsilon_p}{dt} \quad (3.4)$$

Les relations 1.5 (partie I), 3.2 et 3.3 permettent d'expliciter la dérivée partielle $\frac{\partial C_T}{\partial C_L}$:

$$\frac{\partial C_T}{\partial C_L} = \frac{C_T(1 - \theta_T)}{C_L} \quad (3.5)$$

D'après la relation 3.3, la dérivée de C_T par rapport à la densité de pièges N_T s'écrit :

$$\frac{\partial C_T}{\partial N_T} = \theta_T \quad (3.6)$$

La corrélation réalisée par Sofronis et McMeeking [13] à partir des données expérimentales de Kumnick et Johnson [51], permettant d'exprimer la densité de pièges N_T en fonction de la

déformation plastique équivalente ϵ_p (cf. relation 1.3, partie I), permet de calculer la dérivée $\frac{dN_T}{d\epsilon_p}$.

Pour finir, l'utilisation des relations 3.5 et 3.6 dans l'équation 3.4 permet d'écrire :

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \frac{C_T(1 - \theta_T)}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} + \theta_T \frac{dN_T}{d\epsilon_p} \frac{d\epsilon_p}{dt} \quad (3.7)$$

Enfin, on peut remplacer la dérivée partielle $\frac{\partial C_T}{\partial t}$ dans l'équation 3.1 par l'expression 3.7 :

$$\frac{C_L + C_T(1 - \theta_T)}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot (D_L \vec{\nabla} C_L) + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \vec{\nabla} \sigma_h \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\epsilon_p} \frac{d\epsilon_p}{dt} = 0 \quad (3.8)$$

La relation 3.8 fait intervenir les deux concentrations d'hydrogène C_L et C_T . L'introduction de l'équilibre entre C_L et C_T , décrit par la relation 1.5 (partie I), permet d'exprimer C_T en fonction de C_L et de résoudre l'équation 3.8 en C_L . Cette équation de diffusion est implémentée dans le code de calcul Abaqus par une subroutine UMATHT, présentée plus loin dans la section 4.2.

Chapitre 4

Mise en place d'une stratégie de simulation

USQU'À PRÉSENT, nous avons présenté la formulation d'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. Par ailleurs, la section précédente a décrit la diffusion couplée de l'hydrogène dans le cœur du matériau (appelé « bulk »), qui tient compte de l'influence de la contrainte hydrostatique et du piégeage de l'hydrogène.

L'objectif des paragraphes suivants est de présenter les étapes de construction du modèle éléments finis. Tout d'abord, on s'intéressera à l'implémentation de la loi de traction-séparation développée (par une subroutine UEL) et de l'équation de diffusion de l'hydrogène, présentée dans la section 3.2. On présentera également le comportement mécanique du cœur du matériau, et son implémentation dans Abaqus. Enfin, nous présenterons les caractéristiques (géométrie, maillage, conditions aux limites) de la modélisation Abaqus de l'éprouvette CT.

4.1 Implémentation de la loi de traction-séparation spécifique dans Abaqus

Dans cette section, nous nous attarderons dans un premier temps à présenter les possibilités du logiciel Abaqus en ce qui concerne les éléments cohésifs, puis nous présenterons la subroutine Fortran UEL permettant de définir un élément cohésif au comportement adapté à notre étude.

4.1.1 Possibilités offertes par Abaqus

Dans ses versions récentes, la bibliothèque d'éléments du logiciel Abaqus contient des éléments cohésifs axisymétriques, 2D et 3D [130]. Abaqus propose plusieurs types de lois de comportement pour les éléments cohésifs ; dans notre étude, nous nous intéressons uniquement à la description par une loi de traction-séparation. Dans Abaqus, un critère d'amorçage contrôle le début de l'endommagement de l'élément cohésif, tandis que son évolution est contrôlée par un critère de propagation. Les paragraphes suivants présentent les différents critères disponibles, pour les éléments cohésifs 2D.

Critères d'amorçage

L'amorçage de l'endommagement a lieu lorsque les contraintes ou les déformations satisfont à un critère de début d'endommagement. Le logiciel Abaqus en propose plusieurs (équations 4.1, 4.2, 4.3, 4.4), qui font intervenir les composantes seuil du vecteur contraintes σ_n^0 et σ_t^0 , et les déformations seuil correspondantes. Les indices n et t correspondent respectivement aux directions normale et tangentielle (cf. figure 3.1).

Contrainte nominale maximale :

$$\max \left\{ \frac{\langle \sigma_n \rangle}{\sigma_n^0}, \frac{\sigma_t}{\sigma_t^0} \right\} = 1; \quad (4.1)$$

Déformation nominale maximale :

$$\max \left\{ \frac{\langle \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n^0}, \frac{\epsilon_t}{\epsilon_t^0} \right\} = 1; \quad (4.2)$$

Forme quadratique des contraintes nominales :

$$\left\{ \frac{\langle \sigma_n \rangle}{\sigma_n^0} \right\}^2 + \left\{ \frac{\sigma_t}{\sigma_t^0} \right\}^2 = 1; \quad (4.3)$$

Forme quadratique des déformations nominales :

$$\left\{ \frac{\langle \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n^0} \right\}^2 + \left\{ \frac{\epsilon_t}{\epsilon_t^0} \right\}^2 = 1. \quad (4.4)$$

Evolution de l'endommagement

Lorsque le critère d'amorçage est atteint, l'endommagement progressif de l'élément cohésif est décrit par la variable d'endommagement D , dont la valeur évolue de 0 à 1. Les contraintes cohésives T_n et T_t sont alors calculées par les expressions suivantes :

$$T_n = \begin{cases} (1 - D) \bar{T}_n & \text{si } \bar{T}_n \geq 0 \\ \bar{T}_n & \text{sinon (pas d'endommagement en compression)} \end{cases} \quad (4.5a)$$

$$T_t = (1 - D) \bar{T}_t, \quad (4.5b)$$

où $\bar{T}_n$ et $\bar{T}_t$ sont les contraintes cohésives en l'absence d'endommagement. On introduit l'ouverture effective δ_m , définie comme :

$$\delta_m = \sqrt{\langle \delta_n \rangle^2 + \delta_t^2}. \quad (4.6)$$

Seules deux types de loi d'évolution de la variable D sont disponibles dans Abaqus : linéaire (cf. figure 4.1) ou exponentielle (cf. figure 4.2). Le modèle proposé est basé sur les travaux de Turon et al [114].

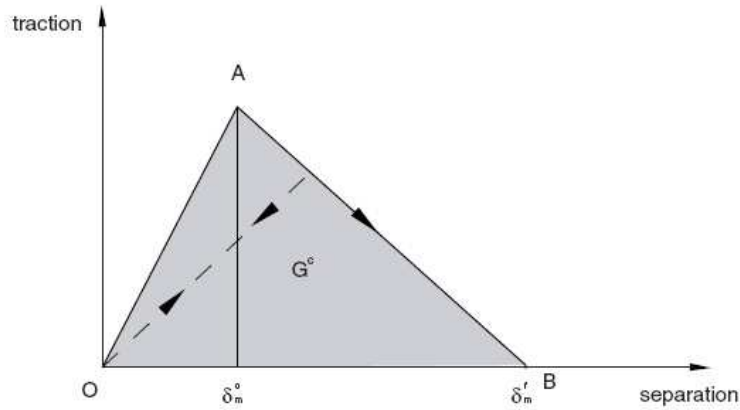


FIGURE 4.1 – Allure de la loi de traction-séparation avec évolution linéaire de D dans Abaqus [130]

Pour l'adoucissement linéaire, l'évolution de la variable D est donnée par l'équation suivante :

$$D = \frac{\delta_m^f (\delta_{m,max} - \delta_{m,0})}{\delta_{m,max} (\delta_{m,f} - \delta_{m,0})}, \quad (4.7)$$

où $\delta_{m,0}$, $\delta_{m,f}$ et $\delta_{m,max}$ représentent respectivement l'ouverture effective correspondant à l'amorçage de l'endommagement, l'ouverture effective à la rupture de l'élément ($D = 1$) et la valeur maximale de l'ouverture effective atteinte au cours du chargement. Pour l'adoucissement

exponentiel, l'évolution de la variable D est régie par l'équation suivante :

$$D = 1 - \left\{ \frac{\delta_{m,0}}{\delta_{m,max}} \right\} \left\{ 1 - \frac{1 - \exp \left(-\alpha \left(\frac{\delta_{m,max} - \delta_{m,0}}{\delta_{m,f} - \delta_{m,0}} \right) \right)}{1 - \exp(-\alpha)} \right\}, \quad (4.8)$$

où α est un paramètre adimensionnel qui contrôle la cinétique d'endommagement.

Pour conclure, Abaqus offre dans ses versions récentes la possibilité d'utiliser un modèle de zone cohésive grâce à des éléments cohésifs 3D, 2D et axisymétriques disponibles dans sa bibliothèque. En revanche, le choix des lois de comportement est limité (partie élastique suivie d'un adoucissement linéaire ou exponentiel). En outre, ces dernières ne sont pas adaptées aux chargements cycliques. En effet, les lois d'évolution de la variable d'endommagement D (cf. équations 4.7 et 4.8) ne font intervenir que l'ouverture maximale atteinte au cours du chargement $\delta_{m,max}$; ainsi, comme on peut le voir sur la figure 4.1 (cycle charge-décharge), tant que la valeur maximale de l'ouverture n'évolue pas, la variable d'endommagement n'évolue pas non plus. Par conséquent, sous chargement cyclique à ouverture effective imposée, la variable d'endommagement n'évolue pas.

Pour pouvoir implémenter dans Abaqus la loi de traction-séparation spécifique développée dans le cadre de ce travail (cf. section 3.1) et permettant l'endommagement progressif du matériau au cours d'un chargement cyclique, notre choix s'est rapidement porté sur le développement d'une subroutine UEL.

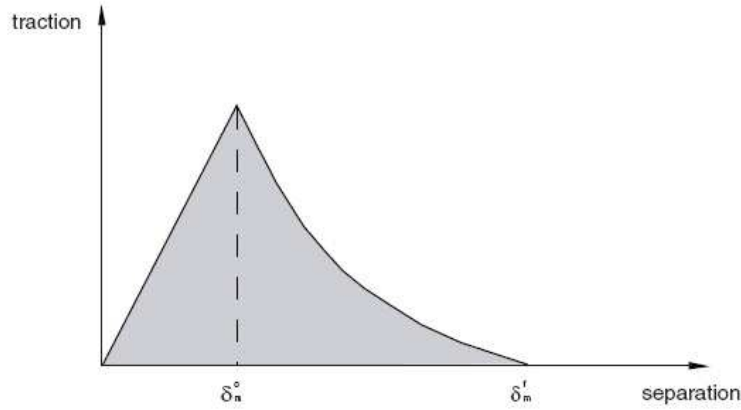


FIGURE 4.2 – Allure de la loi de traction-séparation avec évolution exponentielle de D dans Abaqus [130]

4.1.2 Description de la subroutine UEL

Le logiciel Abaqus permet à ses utilisateurs de programmer en Fortran ses propres subroutines. Parmi elles, la subroutine UEL (pour « User ELe ment ») permet de définir un élément fini personnalisé.

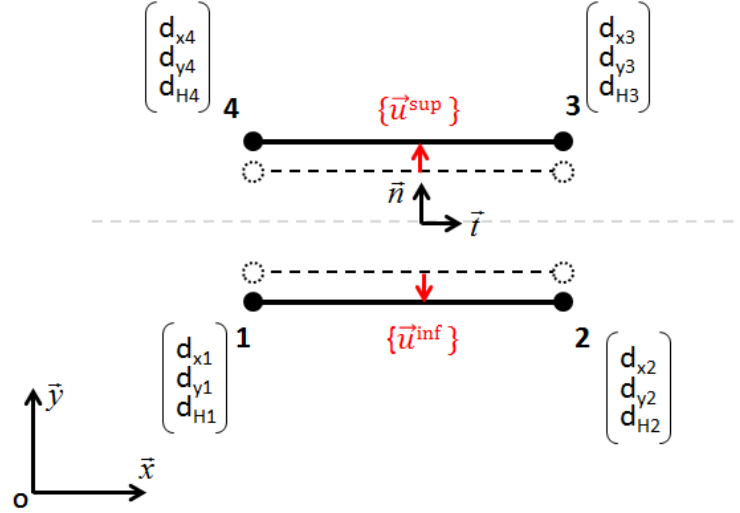


FIGURE 4.3 – Schéma de l'élément cohésif 2D à 4 nœuds

Pendant les simulations, la subroutine UEL est appelée pour chaque élément choisi, à chaque incrément de temps de calcul. La subroutine contient toutes les étapes de calcul nécessaires pour définir un élément fini ; dans notre cas, il s'agit des étapes de construction d'un élément cohésif 2D à quatre nœuds et deux points d'intégration pour le comportement mécanique, possédant un degré de liberté de température, et pouvant ainsi être utilisé en procédure « coupled temperature-displacement » d'Abaqus. En effet, grâce à l'analogie entre les équations de la chaleur et de diffusion de l'hydrogène, la concentration d'hydrogène est assimilée au degré de liberté de température. On ne permet pas à l'hydrogène de diffuser dans l'élément cohésif, sauf lorsque l'élément est rompu. Dans ce cas, l'hydrogène diffuse quasi-instantanément dans l'élément, permettant ainsi de « représenter » l'atmosphère d'hydrogène gazeux lorsque la fissure avance. Numériquement, la diffusion quasi-instantanée lors de la rupture de l'élément permet d'adapter la condition aux limites imposée en fond de fissure de concentration d'hydrogène constante à l'avancée de la fissure.

Le schéma 4.4 présente les étapes de calcul de la subroutine UEL. L'objectif est de déterminer les vecteurs $\vec{n}$ et $\vec{t}$ du repère local associé à l'élément cohésif, le déterminant de la matrice Jacobienne $\det J$, le vecteur résidu des forces nodales $\vec{f}_N^{el}$ et la matrice de rigidité de l'élément $\bar{\bar{K}}^{el}$. L'élément cohésif linéaire (cf. figure 4.3), adapté aux géométries 2D, possède 12 degrés de

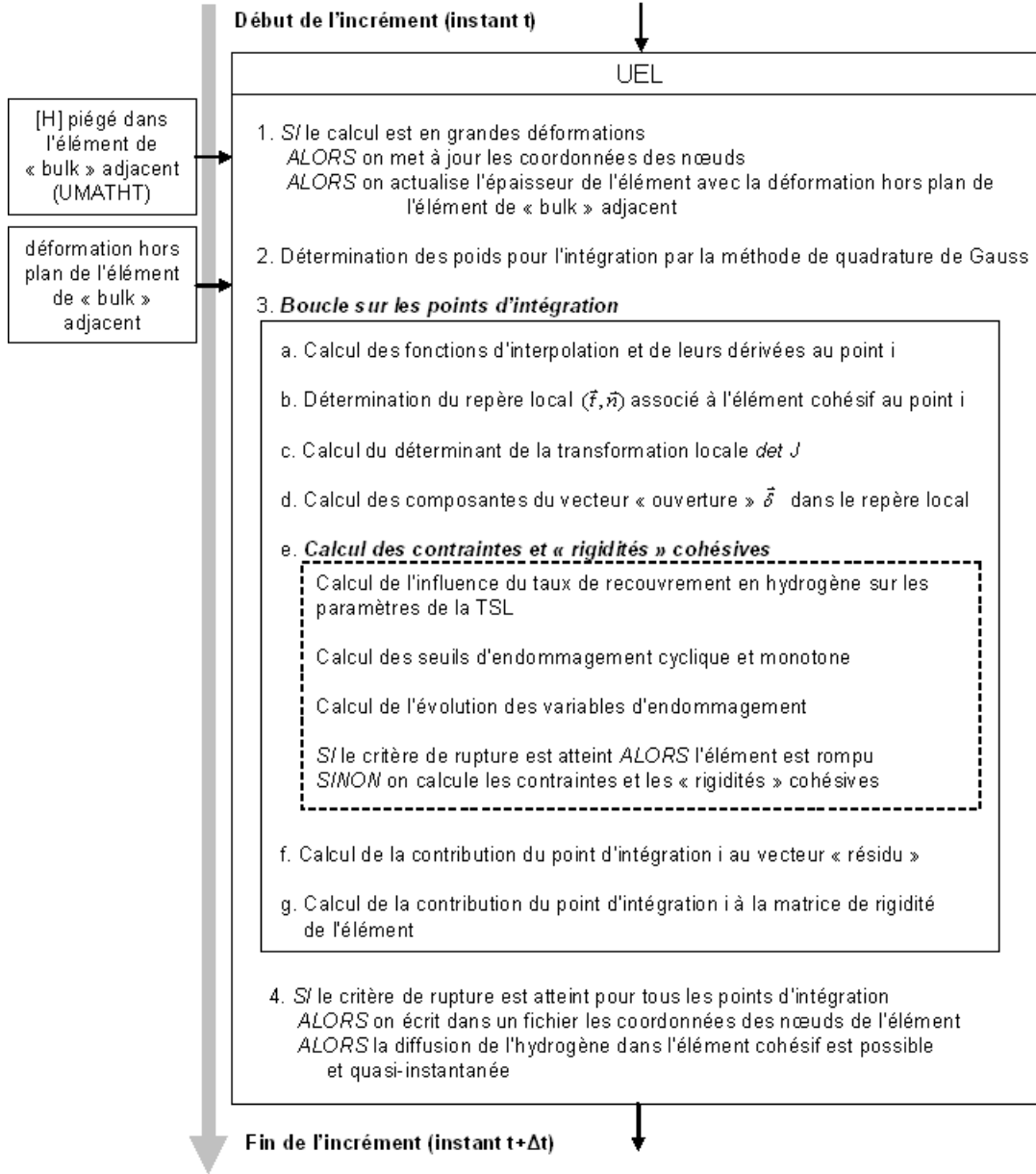


FIGURE 4.4 – Schéma des étapes de calcul de la subroutine UEL

liberté (4 nœuds à 3 degrés de liberté chacun). Le vecteur des déplacements aux nœuds (de dimension 12×1) dans le repère global s'écrit :

$$\vec{d}_N = (d_x^1, d_y^1, d_H^1, d_x^2, d_y^2, d_H^2, d_x^3, d_y^3, d_H^3, d_x^4, d_y^4, d_H^4)^T \quad (4.9)$$

où d_x^i et d_y^i représentent les déplacements du nœud i dans les directions $\vec{x}$ et $\vec{y}$ du repère

global, et d_H^i est la concentration d'hydrogène interstitiel au nœud i . L'ordre des composantes du vecteur $\vec{d}_N$ suit les conventions d'Abaqus. Ensuite, le vecteur ouverture $\vec{\delta}$ est défini comme la différence entre les déplacements des surfaces supérieure ($\{\vec{u}\}^{sup}$) et inférieure ($\{\vec{u}\}^{inf}$) de l'élément cohésif :

$$\vec{\delta} = \{\vec{u}\}^{sup} - \{\vec{u}\}^{inf}, \quad (4.10)$$

ce qui permet ensuite d'écrire le vecteur ouverture aux nœuds de l'élément $\vec{\delta}_N$ sous la forme suivante :

$$\vec{\delta}_N = \bar{\bar{\Phi}} \cdot \vec{d}_N \quad (4.11)$$

où la matrice $\bar{\bar{\Phi}}$ est définie comme :

$$\bar{\bar{\Phi}} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

Le vecteur $\vec{\delta}_N$ est de dimension 4×1 . Le vecteur ouverture $\vec{\delta}$ est ensuite interpolé jusqu'aux points d'intégration à l'aide des fonctions d'interpolation. Notons $N_i(\xi)$ les fonctions d'interpolation pour la paire de nœuds 1, 2, où ξ est la coordonnée locale associée à l'élément, comprise dans l'intervalle $[-1,1]$. Pour chaque point de l'élément, le déplacement relatif des surfaces supérieure et inférieure est alors calculé de la manière suivante :

$$\vec{\delta}(\xi) = \begin{pmatrix} \delta_x(\xi) \\ \delta_y(\xi) \end{pmatrix} = \bar{\bar{H}}(\xi) \cdot \vec{\delta}_N \quad (4.13)$$

où $\bar{\bar{H}}$ est une matrice 2×4 contenant les fonctions d'interpolation :

$$\bar{\bar{H}}(\xi) = \begin{pmatrix} N_1(\xi) & 0 & N_2(\xi) & 0 \\ 0 & N_1(\xi) & 0 & N_2(\xi) \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Pour un élément de référence linéaire à deux nœuds, les fonctions d'interpolation sont :

$$\begin{aligned} N_1(\xi) &= \frac{1}{2}(1 - \xi) \\ N_2(\xi) &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Finalement, on peut exprimer le vecteur ouverture $\vec{\delta}$ en chaque point de l'élément cohésif en fonction de l'ouverture aux nœuds :

$$\vec{\delta}(\xi) = \bar{H}(\xi) \cdot \bar{\Phi} \cdot \vec{d}_N = \bar{B}(\xi) \cdot \vec{d}_N \quad (4.16)$$

où $\bar{B}(\xi)$ est une matrice de dimension 2×12 et $\vec{\delta}(\xi)$ est de dimension 2×1 . La relation 4.16 permet de décrire le champ de déplacement continu dans les directions globales $\vec{x}$ et $\vec{y}$ en chaque point de l'élément.

Ensuite, il est nécessaire de calculer les composantes des vecteurs de la base orthonormale $(\vec{t}, \vec{n})$ associée à l'élément cohésif. Notons $\vec{x}_N$ le vecteur des coordonnées initiales des nœuds de l'élément. Calculons les coordonnées $\vec{x}_N^R$ des points A et B de la ligne médiane de l'élément (cf. figure 3.1). Si le choix s'est porté sur un calcul en grandes déformations, le calcul est basé sur les coordonnées courantes des nœuds (cf. relation 4.17), tandis que si les calculs se font dans l'hypothèse des petites perturbations, le repère local à l'instant courant est confondu avec le repère local initial (cf. relation 4.18).

$$\vec{x}_N^{R,GD} = \frac{1}{2} \bar{\Phi} \cdot (\vec{x}_N + \vec{d}_N) \quad (4.17)$$

$$\vec{x}_N^{R,HPP} = \frac{1}{2} \bar{\Phi} \cdot \vec{x}_N \quad (4.18)$$

A l'instar de l'équation 4.13, les coordonnées $\vec{x}^R(\xi)$ d'un point repéré par sa coordonnée locale ξ sur la ligne médiane sont données par :

$$\vec{x}^R(\xi) = \begin{pmatrix} x^R(\xi) \\ y^R(\xi) \end{pmatrix} = \bar{H}(\xi) \cdot \vec{x}_N^R \quad (4.19)$$

où $\vec{x}_N^R$ est confondu avec $\vec{x}_N^{R,HPP}$ ou $\vec{x}_N^{R,GD}$, selon l'hypothèse retenue. Le vecteur tangent unitaire à la ligne médiane $\vec{t}$ est alors calculé par :

$$\vec{t} = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \vec{x}^R}{\partial \xi} \right\|} \left(\frac{\partial x^R}{\partial \xi}, \frac{\partial y^R}{\partial \xi} \right)^T \quad (4.20)$$

Le vecteur unitaire normal à la ligne médiane $\vec{n}$ est ensuite calculé par la relation :

$$\vec{n} = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \vec{x}^R}{\partial \xi} \right\|} \left(-\frac{\partial y^R}{\partial \xi}, \frac{\partial x^R}{\partial \xi} \right)^T \quad (4.21)$$

La dérivée $\frac{\partial \vec{x}^R}{\partial \xi}$ est déterminée par :

$$\frac{\partial \vec{x}^R(\xi)}{\partial \xi} = \begin{pmatrix} x_{,\xi}^R \\ y_{,\xi}^R \end{pmatrix} = \frac{\partial \bar{H}(\xi)}{\partial \xi} \cdot \vec{x}_N^R = \bar{h}(\xi) \vec{x}_N^R, \quad (4.22)$$

où

$$\bar{h}(\xi) = \begin{pmatrix} N_{1,\xi}(\xi) & 0 & N_{2,\xi}(\xi) & 0 \\ 0 & N_{1,\xi}(\xi) & 0 & N_{2,\xi}(\xi) \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Les dérivées par rapport à la coordonnée locale ξ des fonctions d'interpolation $N_i(\xi)$ sont :

$$\begin{aligned} N_{1,\xi}(\xi) &= -\frac{1}{2} \\ N_{2,\xi}(\xi) &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Le Jacobien de la transformation $\det J$ du repère global vers le repère local muni de la coordonnée ξ est :

$$\det J = \left\| \frac{\partial \vec{x}^R}{\partial \xi} \right\| = \sqrt{\left(\frac{\partial x^R}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y^R}{\partial \xi} \right)^2} = \frac{1}{2} \quad (4.25)$$

La matrice de rotation $\bar{\bar{\Theta}}$ du repère global au repère local est donnée par :

$$\bar{\bar{\Theta}} = [\vec{t}, \vec{n}], \quad (4.26)$$

ce qui permet d'exprimer le vecteur ouverture local en fonction de l'ouverture dans le repère global :

$$\vec{\delta}_{loc} = \bar{\bar{\Theta}}^T \cdot \vec{\delta}. \quad (4.27)$$

Dans la suite, nous noterons les matrices locales avec l'indice $_{loc}$, tandis que l'absence d'indice indiquera que la quantité est exprimée dans le repère global. En accord avec la notation utilisée dans la section 3.3, $\vec{T}$ est le vecteur des contraintes cohésives. En accord avec la nouvelle règle de notation, le vecteur des contraintes cohésives local sera noté $\vec{T}_{loc}$ dans la suite de ce paragraphe, tandis que son expression dans le repère global sera notée $\vec{T}$. En se souvenant de l'équation 3.3, le vecteur des contraintes cohésives est relié au vecteur ouverture $\vec{\delta}_{loc}$ par la TSL, que l'on peut résumer par l'expression suivante :

$$\vec{T}_{loc} = \bar{\bar{C}}_{loc} \cdot \vec{\delta}_{loc} \quad (4.28)$$

Dans notre étude, la TSL développée (cf. section 3.1) implique que les composantes de $\bar{\bar{C}}_{loc}$ sont indépendantes de l'ouverture $\vec{\delta}_{loc}$ (élasticité linéaire).

La subroutine Fortran UEL d'Abaqus requiert de définir la matrice de rigidité de l'élément, ainsi que le vecteur résidu des forces nodales. Ce dernier, de dimension 12×1 , est défini par la relation :

$$\vec{f}_N^{el} = \int_{S_{el}} \bar{\bar{B}}^T \cdot \vec{T} dS \quad (4.29)$$

$$= W \int_{-1}^1 \bar{\bar{B}}^T \cdot \bar{\bar{\Theta}} \cdot \vec{T}_{loc} \det J d\xi, \quad (4.30)$$

où S_{el} est la surface de l'élément cohésif, et W son épaisseur. En grandes déformations et sous l'hypothèse des contraintes planes, il est nécessaire d'actualiser à chaque pas de temps l'épaisseur du modèle. En accord avec les travaux de Scheider et Brocks [93], la déformation hors-plan est calculée pour l'élément de « bulk » adjacent à l'élément courant sous hypothèse d'incompressibilité. L'annexe C présente les détails de la mise en œuvre numérique.

La matrice de rigidité de l'élément, de dimension 12×12 , est définie par l'expression :

$$\bar{\bar{K}}^{el} = - \frac{\partial \vec{f}_N^{el}}{\partial \vec{d}_N} \quad (4.31)$$

où la convention de signe est en accord avec la convention d'Abaqus. Par dérivation de l'équation 4.29, on obtient :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{K}}^{el} &= - \int_{S_{el}} \bar{\bar{B}}^T \bar{\bar{\Theta}} \frac{\partial \vec{T}_{loc}}{\partial \vec{d}_N} dS \\ &= - W \int_{L_{el}} \bar{\bar{B}}^T \bar{\bar{\Theta}} \frac{\partial \vec{T}_{loc}}{\partial \vec{d}_N} dl \\ &= - W \int_{L_{el}} \bar{\bar{B}}^T \bar{\bar{\Theta}} \frac{\partial \vec{T}_{loc}}{\partial \vec{\delta}_{loc}} \frac{\partial \vec{\delta}_{loc}}{\partial \vec{\delta}} \frac{\partial \vec{\delta}}{\partial \vec{d}_N} dl \\ &= - W \int_{L_{el}} \bar{\bar{B}}^T \bar{\bar{\Theta}} \frac{\partial \vec{T}_{loc}}{\partial \vec{\delta}_{loc}} \bar{\bar{\Theta}}^T \bar{\bar{B}} dl \\ &= - W \int_{-1}^1 \bar{\bar{B}}^T \bar{\bar{\Theta}} \bar{\bar{C}}_{loc} \bar{\bar{\Theta}}^T \bar{\bar{B}} \det J d\xi. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Avec la TSL développée dans notre étude, la matrice $\bar{\bar{C}}_{loc}$ est diagonale, car T_n ne dépend que de δ_n , et T_t ne dépend que de δ_t (cf. section 3.1).

Pour conclure, nous avons présenté la construction de la subroutine Fortran UEL, qui permet d'implémenter dans Abaqus le comportement des éléments cohésifs, régi par la loi de traction-séparation spécifique développée dans la section 3.1. Nous allons maintenant développer la mise en œuvre numérique du comportement du cœur du matériau, *i.e.* l'implémentation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène et de la loi de comportement élastoplastique du « bulk ».

4.2 Implémentation de la diffusion couplée de l'hydrogène dans Abaqus

4.2.1 Analogie entre diffusion de la masse et de la chaleur

Le logiciel d'éléments finis Abaqus ne dispose pas de procédure de calcul couplé mécanique/-diffusion. Toutefois, l'équation de diffusion de masse est analogue à l'équation de la chaleur. Le tableau 4.1 dresse le parallèle entre la température et la concentration d'hydrogène, ainsi qu'entre le flux de chaleur et le flux de masse.

Tableau 4.1 – Parallèle entre l'équation de la chaleur et l'équation de diffusion de la masse

	Equation de la chaleur $\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + r_q = 0$	Conservation de la masse $\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_m + r_m = 0$
Degré de liberté	Température T (K)	Concentration d'hydrogène C (at/ m^3)
Flux de chaleur/masse	$\vec{J}_q$ (W/ m^2)	$\vec{J}_m$ (atomes/ m^2/s)
Terme source	r_q (W/ m^3)	r_m (atomes/ m^3/s)

Le couplage entre comportement mécanique et diffusion de l'hydrogène peut donc être modélisé à l'aide d'un calcul couplé température/déplacement, disponible dans Abaqus. Ainsi, la subroutine UMATHT, qui permet à l'utilisateur de définir le comportement thermique de son matériau, peut être utilisée pour implémenter l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène, présentée dans la section 3.2. Le manuel du logiciel Abaqus [130] indique que la subroutine UMATHT doit définir l'énergie interne par unité de masse U_q à la fin de l'incrément de temps, ainsi que sa dérivée par rapport à la température, et définir le flux de chaleur $\vec{J}_q$, ainsi que ses dérivées par rapport à la température et à son gradient. Ces quantités interviennent dans l'équation de diffusion, écrite sous sa forme générale :

$$\rho \dot{U}_q + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + r_q = 0 \quad (4.1)$$

en utilisant les notations du tableau 4.1, et avec ρ la densité volumique du matériau considéré. Dans l'équation de la chaleur, $\dot{U}_q$ est égal à $C_P \frac{\partial T}{\partial t}$, où T est la température et C_P la capacité calorifique. L'analogie entre la température et la concentration d'hydrogène réticulaire va nous permettre d'implémenter l'équation de diffusion de masse sous la forme générale :

$$\rho \dot{U}_m + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_m + r_m = 0, \quad (4.2)$$

en utilisant les notations du tableau 4.1. Dans notre cas, le terme source r_m est nul (absence de source interne d'hydrogène), et il faut définir dans la subroutine la quantité U_m à la fin de

l'incrément de temps courant et sa dérivée par rapport à la concentration C_L , et définir le flux de masse $\vec{J}_m$, ainsi que ses dérivées par rapport à C_L et à son gradient. En écrivant l'équation 1.2 sous sa forme locale, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \{C_L + C_T\} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_m = 0 \quad (4.3)$$

où le flux d'hydrogène $\vec{J}_m$ est donné par l'expression 1.1. Par analogie entre les relations 4.2 et 4.3, la quantité U_m peut être déterminée à partir de :

$$\rho \dot{U}_m = \frac{\partial}{\partial t} \{C_L + C_T\}. \quad (4.4)$$

En accord avec la théorie d'équilibre d'Oriani, la concentration d'hydrogène piégé C_T s'exprime en fonction de C_L par :

$$C_T = \frac{N_T K_T C_L}{K_T C_L + N_L} \quad (4.5)$$

où la densité de sites interstitiels N_L est déterminée par la relation 4.6 [14] pour le fer α , K_T est une constante d'équilibre, et la densité de pièges N_T est une fonction de la déformation plastique équivalente ϵ_p (relation 1.3, partie I).

$$N_L = \frac{\mathcal{N}_A \beta \rho}{A_r} \quad (4.6)$$

Dans la relation 4.6, $\mathcal{N}_A$ est le nombre d'Avogadro ($= 6,02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$), β est le nombre de sites interstitiels par atome de fer, ρ est la densité du fer ($= 7,87 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ à 293 K [131]) et A_r est la masse molaire du fer ($= 55,8 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$ à 293 K [131]). D'après Krom et al [14], la relation 4.6 donne la valeur $N_L = 5,1 \times 10^{29} \text{ sites/m}^3$, en supposant que $\beta = 6$ (occupation des sites tétrahédriques par l'hydrogène à température ambiante).

Finalement, U_m est une fonction de C_L et de ϵ_p , et sa valeur à la fin de l'incrément courant est calculée par :

$$\begin{aligned} \rho U_m(t + \Delta t) &= \rho U_m(t) + \frac{\partial \rho U_m}{\partial C_L} dC_L + \frac{\partial \rho U_m}{\partial N_T} \frac{dN_T}{d\epsilon_p} d\epsilon_p \\ \text{où } \frac{\partial \rho U_m}{\partial C_L} &= 1 + \frac{N_T K_T N_L}{(K_T C_L + N_L)^2} \\ \text{et } \frac{\partial \rho U_m}{\partial N_T} &= \frac{K_T C_L}{K_T C_L + N_L}, \\ \text{avec } \frac{dN_T}{d\epsilon_p} &= 2,95 \times 10^{-8} \exp(-5,5\epsilon_p) \times 10^{23,26-2,33 \exp(-5,5\epsilon_p)}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

La relation 4.7 fournit les expressions de $U_m(t + \Delta t)$ et $\frac{\partial U_m}{\partial C_L}$. U_m ne dépend pas du gradient de C_L . L'incrément de déformation plastique équivalente $d\epsilon_p$ est directement fourni par Abaqus

si on utilise les modèles de plasticité classiques, ou calculé dans une subroutine utilisateur s'il est besoin de définir un modèle de comportement spécifique.

En ce qui concerne le flux d'hydrogène $\vec{J}_m$, son expression est donnée par la relation 1.1. Sa dérivée par rapport à la concentration d'hydrogène réticulaire C_L est calculée comme :

$$\frac{\partial \vec{J}_m}{\partial C_L} = \frac{D_L \bar{V}_H}{RT} \vec{\nabla} \sigma_h. \quad (4.8)$$

Le gradient de contrainte hydrostatique $\vec{\nabla} \sigma_h$ est calculé dans une subroutine USDFLD, en interpolant la contrainte hydrostatique entre les points d'intégration de chaque élément. La section 4.2.2 entre plus en détail dans ces calculs. La dérivée du vecteur $\vec{J}_m$ par rapport au gradient de la concentration d'hydrogène C_L est donnée par :

$$\frac{\partial \vec{J}_m}{\partial \vec{\nabla} C_L} = -D_L \bar{\bar{I}}, \quad (4.9)$$

où la matrice $\bar{\bar{I}}$ est la matrice Identité de dimension 2×2 .

Pour conclure, les équations 4.7, 4.8 et 4.9 permettent d'utiliser la subroutine UMATHHT d'Abaqus pour implémenter l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène dans le matériau. Comme évoqué précédemment, le calcul du gradient de la contrainte hydrostatique σ_h est fait dans la subroutine USDFLD.

4.2.2 Calcul du gradient de contrainte hydrostatique

La subroutine USDFLD permet de calculer plusieurs quantités nécessaires aux subroutines UEL et UMATHHT. Le paragraphe suivant détaille les étapes du calcul du gradient de σ_h . Pour les éléments de volume 2D linéaires utilisés dans cette étude, on dénombre quatre points d'intégration. Pour calculer le gradient de la contrainte hydrostatique à chaque point d'intégration des éléments de « bulk », on réalise une interpolation de la contrainte hydrostatique dans le quadrilatère constitué des points d'intégration. L'interpolation est identique à celle utilisée pour obtenir les déplacements à partir des nœuds, mais est ici appliquée aux points d'intégration de l'élément. La figure 4.5 illustre le passage du quadrilatère réel au quadrilatère de référence, muni des coordonnées locales (ξ, η) .

Notons $N_i(\xi, \eta)$ les fonctions d'interpolation du quadrilatère de référence 2D, avec i un entier

compris entre I et IV. Leurs expressions sont les suivantes :

$$\begin{cases} N_I(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ N_{II}(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ N_{III}(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \\ N_{IV}(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \end{cases} \quad (4.10)$$

La contrainte hydrostatique peut être évaluée en tout point du quadrilatère de référence par la relation :

$$\sigma_h(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^4 N_i(\xi, \eta) \sigma_{h,i}, \quad (4.11)$$

où les $\sigma_{h,i}$ sont les valeurs de la contrainte hydrostatique aux 4 points d'intégration, disponibles dans la subroutine USDFLD. Les composantes du gradient de σ_h dans le repère local s'expriment donc par les relations :

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_h}{\partial \xi}(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^4 N_{i,\xi}(\xi, \eta) \sigma_{h,i} \\ \frac{\partial \sigma_h}{\partial \eta}(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^4 N_{i,\eta}(\xi, \eta) \sigma_{h,i} \end{cases}, \quad (4.12)$$

où les dérivées partielles des fonctions $N_i(\xi, \eta)$ sont facilement obtenues à partir des relations 4.10. Dans le repère global $(O, \vec{x}, \vec{y})$, le gradient de σ_h s'exprime en fonction du gradient de

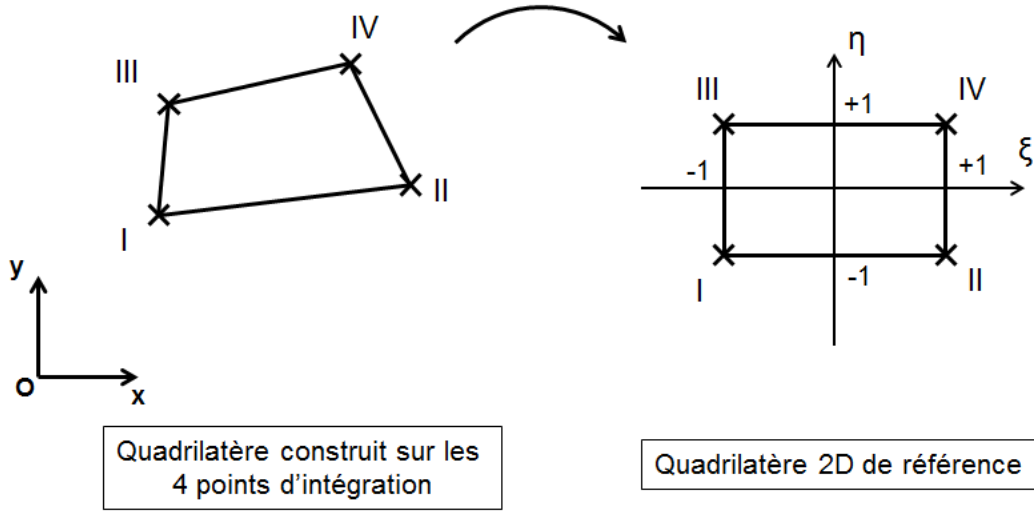


FIGURE 4.5 – Schéma de la transformation d'un quadrilatère réel construit à partir des 4 points d'intégration des éléments 2D linéaires du bulk (notés en chiffres romains, de I à IV), au quadrilatère de référence 2D. Le repère global est $(O, \vec{x}, \vec{y})$, et le repère local associé au quadrilatère de référence est $(\vec{\xi}, \vec{\eta})$

σ_h calculé dans le repère local de la manière suivante :

$$\vec{\nabla}\sigma_h(x, y) = \bar{\bar{J}}^{-1} \cdot \vec{\nabla}\sigma_h(\xi, \eta) \quad (4.13)$$

où la matrice $\bar{\bar{J}}$ est la matrice Jacobienne du changement de repère, qui contient les dérivées partielles des coordonnées globales x et y par rapport aux coordonnées locales ξ et η , calculées par :

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^4 \frac{\partial \{N_i(\xi, \eta)x_i\}}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^4 N_{i,\xi}(\xi, \eta)x_i \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^4 N_{i,\eta}(\xi, \eta)x_i \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^4 N_{i,\xi}(\xi, \eta)y_i \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^4 N_{i,\eta}(\xi, \eta)y_i, \end{cases} \quad (4.14)$$

où les x_i et les y_i sont les coordonnées suivant $\vec{x}$ et $\vec{y}$ des quatre points d'intégration. En calculant les composantes de la matrice $\bar{\bar{J}}$, puis en inversant la matrice, on peut calculer les composantes du gradient de contrainte hydrostatique aux quatre points d'intégration. Les composantes suivant $\vec{x}$ et $\vec{y}$ de $\vec{\nabla}\sigma_h$ sont ensuite transmises à la subroutine UMATHT pour chaque point d'intégration via des variables d'état. Cette méthode permet de calculer le gradient de contrainte hydrostatique aux points d'intégration des éléments à quatre points d'intégration ; elle n'est donc pas applicable au cas des éléments à intégration réduite. Pour des éléments possédant plus de 4 points d'intégration, la méthode est valable à condition d'adapter les fonctions d'interpolation en conséquence. Par ailleurs, cette méthode ne permet pas de connaître le gradient de contrainte hydrostatique en tout point de l'élément.

4.2.3 Ecrouissage cinématique non-linéaire

Le comportement mécanique de l'acier 15-5PH a été étudié au laboratoire par Hamon [9], et les observations ont montré que le modèle le plus représentatif de son comportement plastique est le modèle d'écrouissage cinématique non-linéaire. La section 5.1 présentera plus en détails l'étude expérimentale du comportement de cet acier. Pour les simulations en présence d'hydrogène, l'utilisation de la procédure couplée température/déplacement d'Abaqus implique le développement d'une subroutine UMAT ; en effet, les versions actuelles d'Abaqus ne permettent pas d'utiliser directement l'écrouissage cinématique non-linéaire avec cette procédure.

La subroutine Fortran UMAT d'Abaqus permet à l'utilisateur de définir une loi de comportement spécifique pour un élément fini. La programmation de l'UMAT requiert de définir en chaque point d'intégration de chaque élément fini le tenseur des contraintes $\bar{\sigma}$ et la matrice tangente $\frac{\partial \Delta \bar{\sigma}}{\partial \Delta \bar{\epsilon}}$ (où $\bar{\epsilon}$ est le tenseur des déformations vraies) à la fin de l'incrément de temps courant.

Notons $\bar{\bar{s}}$ le déviateur du tenseur des contraintes, défini comme :

$$\bar{\bar{s}} = \bar{\bar{\sigma}} - \frac{1}{3}\text{tr}(\bar{\bar{\sigma}})\bar{\bar{I}}, \quad (4.15)$$

où $\bar{\bar{I}}$ est la matrice Identité. Notons $\bar{\bar{\epsilon}}_e$ et $\bar{\bar{\epsilon}}_p$ les tenseurs des déformations élastiques et plastiques, λ le multiplicateur plastique, $\bar{\bar{\alpha}}$ la variable d'écrouissage et $\bar{\bar{X}}$ le tenseur des forces thermodynamiques associées à $\bar{\bar{\alpha}}$. Le tenseur $\bar{\bar{X}}$ représente le déplacement du centre de la surface de charge, dû à la plasticité cinématique.

Pour le modèle d'écrouissage cinématique non-linéaire, il faut résoudre à chaque pas de temps de calcul le système d'équations suivant [132] :

$$\rho\Psi = \rho\Psi_e(\bar{\bar{\epsilon}}_e) + \rho\Psi_p(\bar{\bar{\alpha}}) = \frac{1}{2}\bar{\bar{\epsilon}}_e : \mathbf{C} : \bar{\bar{\epsilon}}_e + \frac{1}{3}C_{cin}\bar{\bar{\alpha}} : \bar{\bar{\alpha}} \quad (4.16)$$

$$\bar{\bar{\sigma}} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\bar{\epsilon}}_e} = \mathbf{C} : \bar{\bar{\epsilon}}_e = \mathbf{C} : (\bar{\bar{\epsilon}} - \bar{\bar{\epsilon}}_p) \quad (4.17)$$

$$\bar{\bar{X}} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\bar{\alpha}}} = \frac{2}{3}C_{cin}\bar{\bar{\alpha}} \quad (4.18)$$

$$\bar{\bar{\Sigma}} = \bar{\bar{s}} - \bar{\bar{X}} \quad (4.19)$$

$$f(\bar{\bar{\Sigma}}) = \sqrt{\frac{3}{2}}\|\bar{\bar{\Sigma}}\| - \sigma_y \quad (4.20)$$

$$g(\bar{\bar{\sigma}}, \bar{\bar{X}}) = f(\bar{\bar{\Sigma}}) + \frac{3\gamma}{4C_{cin}}\bar{\bar{X}} : \bar{\bar{X}} \quad (4.21)$$

$$\dot{\bar{\bar{\epsilon}}}_p = \dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \bar{\bar{\sigma}}} = \frac{3}{2}\dot{\lambda} \frac{\bar{\bar{\Sigma}}}{\sqrt{\frac{3}{2}}\|\bar{\bar{\Sigma}}\|} \quad (4.22)$$

$$\dot{\bar{\bar{\alpha}}} = -\dot{\lambda} \frac{\partial g}{\partial \bar{\bar{X}}} = \dot{\bar{\bar{\epsilon}}}_p - \frac{3\gamma}{2C_{cin}}\dot{\lambda}\bar{\bar{X}} \quad (4.23)$$

$$\dot{\lambda} \geq 0, \quad f(\bar{\bar{\Sigma}}) \geq 0, \quad \dot{\lambda}f(\bar{\bar{\Sigma}}) = 0. \quad (4.24)$$

- La relation 4.16 définit l'énergie libre par unité de volume $\rho\Psi$, qui correspond à l'énergie accumulée par le matériau déformé sous chargement, où ρ est sa masse volumique. Ce potentiel est constitué de deux termes distincts : $\rho\Psi_e$, qui représente la densité d'énergie élastique réversible, et $\rho\Psi_p$, qui représente la densité d'énergie bloquée par écrouissage. On fait l'hypothèse que les comportements élastique et plastique sont découplés. $\mathbf{C}$ représente le tenseur d'élasticité isotrope, d'ordre 4. Par la suite, les tenseurs d'ordre 4 seront notés en gras. Les deux points « : » représentent le produit doublement contracté. C_{cin} est un paramètre du modèle.
- Selon la relation 4.17, le tenseur des contraintes $\bar{\bar{\sigma}}$ dérive du potentiel $\rho\Psi$. Le tenseur des déformations $\bar{\bar{\epsilon}}$ est supposé être la somme des tenseurs des déformations élastiques $\bar{\bar{\epsilon}}_e$ et des déformations plastiques $\bar{\bar{\epsilon}}_p$.

- L'équation 4.18 donne la définition du tenseur $\bar{\bar{X}}$, en fonction du tenseur $\bar{\alpha}$ et du paramètre cinématique C_{cin} . $\bar{\bar{X}}$ est défini comme la dérivée partielle du potentiel $\rho\Psi$ par rapport à la variable interne $\bar{\alpha}$.
- L'équation 4.19 présente la définition du tenseur d'ordre deux $\bar{\bar{\Sigma}}$, appelé tenseur des « contraintes relatives », qui dépend du déviateur des contraintes $\bar{\bar{s}}$ (cf. équation 4.15) et du tenseur des forces thermodynamiques $\bar{\bar{X}}$.
- La relation 4.20 présente la surface de charge f , fonction de la norme du tenseur $\bar{\bar{\Sigma}}$. σ_y représente la limite d'élasticité initiale du matériau. Le terme $\sqrt{\frac{3}{2}} \|\bar{\bar{\Sigma}}\|$ représente la contrainte équivalente de Von Mises.
- Proposée par Armstrong et Frederick [133], l'équation 4.21 définit le potentiel de dissipation g , différent de f pour le modèle d'écrouissage cinématique non-linéaire (modèle non-associé). γ est un paramètre du modèle.
- Les relations 4.22 et 4.23 définissent le principe de normalité. L'évolution du tenseur des déformations plastiques est normale au potentiel de dissipation g , tandis que l'évolution de la variable interne $\bar{\alpha}$ est proportionnelle à l'opposé de la dérivée de la surface g vis-à-vis du tenseur $\bar{\bar{X}}$.
- Les relations 4.24 sont les conditions de Kuhn-Tucker, qui réduisent le problème à un problème d'optimisation. Elles stipulent que l'évolution du multiplicateur plastique λ est irréversible, et que le cas $f(\bar{\bar{\Sigma}}) > 0$ est impossible. La dernière condition est appelée équation de cohérence. L'existence d'une zone élastique implique que $\dot{\lambda} = 0$ lorsque $f(\bar{\bar{\Sigma}}) < 0$, et que $\dot{\lambda} \geq 0$ si $f(\bar{\bar{\Sigma}}) \geq 0$.

Pour résoudre le système d'équations 4.16 à 4.24 dans un calcul de type éléments finis, le système d'équations doit être discrétisé. Ensuite, un algorithme de type prédicteur élastique est employé, qui est présenté en Annexe D.

Calcul de la matrice tangente

Comme précisé au début de cette section, la programmation d'une UMAT requiert de calculer la matrice tangente $\frac{\partial \Delta \bar{\sigma}}{\partial \Delta \bar{\epsilon}}$. Lorsque la solution du prédicteur élastique est satisfaisante, la matrice tangente est la matrice de rigidité élastique isotrope $\mathbf{C}$. Dans le cas où l'étape de correction plastique est nécessaire, la matrice tangente élasto-plastique, qui sera notée $\mathbf{C}_{ep}$, est définie par :

$$\dot{\bar{\sigma}} = \mathbf{C}_{ep} : \dot{\bar{\epsilon}}. \quad (4.25)$$

Dans un premier temps, déterminons l'expression de $\dot{\lambda}$. Rappelons que l'équation de cohérence s'écrit sous la forme suivante lorsqu'il y a plastification du matériau, c'est-à-dire lorsque $\dot{\lambda} \neq 0$:

$$\dot{f}(\bar{\bar{\Sigma}}) = 0.$$

La fonction f se différencie par rapport au temps de la manière suivante :

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} : \dot{\bar{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \bar{X}} : \dot{\bar{X}}. \quad (4.26)$$

En se remémorant les relations 4.17 et 4.22 et la définition du tenseur $\bar{n}$ (cf. relation D.1), on peut écrire :

$$\dot{\bar{\sigma}} = \mathbf{C} : \left(\dot{\bar{\epsilon}} - \frac{3}{2} \dot{\lambda} \bar{n} \right). \quad (4.27)$$

La dérivation de l'équation 4.18 par rapport au temps donne :

$$\dot{\bar{X}} = \frac{2}{3} C_{cin} \dot{\bar{\alpha}}. \quad (4.28)$$

Les équations 4.27 et 4.28, ainsi que l'expression 4.23, permettent d'expliciter la relation 4.26 :

$$\begin{aligned} \dot{f} &= \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} : \dot{\bar{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \bar{X}} : \dot{\bar{X}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \bar{\sigma}} : \mathbf{C} : \left(\dot{\bar{\epsilon}} - \frac{3}{2} \dot{\lambda} \bar{n} \right) + C_{cin} \frac{\partial f}{\partial \bar{X}} : \left(\dot{\lambda} \bar{n} - \frac{\gamma}{C_{cin}} \dot{\lambda} \bar{X} \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.29)$$

En isolant $\dot{\lambda}$, on obtient l'expression finale suivante :

$$\dot{\lambda} = \frac{\partial f / \partial \bar{\sigma} : \mathbf{C} : \dot{\bar{\epsilon}}}{\frac{3}{2} \partial f / \partial \bar{\sigma} : \mathbf{C} : \bar{n} - \partial f / \partial \bar{X} : (C_{cin} \bar{n} - \gamma \bar{X})} \quad (4.30)$$

En introduisant l'expression de $\dot{\lambda}$ dans la relation 4.27, on peut exprimer $\dot{\bar{\sigma}}$ sous la forme de la relation 4.25, et identifier la matrice tangente $\mathbf{C}_{ep}$:

$$\mathbf{C}_{ep} = \mathbf{C} - \frac{\frac{3}{2} \{(\mathbf{C} : \bar{n}) \otimes (\mathbf{C} : \partial f / \partial \bar{\sigma})\}}{\frac{3}{2} \partial f / \partial \bar{\sigma} : \mathbf{C} : \bar{n} - \partial f / \partial \bar{X} : (C_{cin} \bar{n} - \gamma \bar{X})} \quad (4.31)$$

Spécificité du calcul en contraintes planes

La subroutine UMAT développée est spécifique aux éléments linéaires 2D de contraintes planes d'Abaqus. Il est nécessaire de faire quelques modifications à l'algorithme prédicteur - correcteur pour s'assurer que l'hypothèse des contraintes planes est vérifiée durant les deux étapes de l'algorithme. Notons 1 et 2 les indices associés aux directions du plan, et 3 l'indice associé à la direction normale au plan. Il s'agit de résoudre le système d'équations 4.16 - 4.24 sous la condition :

$$\sigma_{33} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0. \quad (4.32)$$

La relation précédente est imposée dans l'algorithme prédicteur - correcteur au niveau du point de Gauss, par une boucle itérative avec une méthode de Newton dans la subroutine UMAT. La méthode, présentée dans [134], est relativement facile à mettre en œuvre, et ne sera pas présentée ici.

4.3 Modélisation Abaqus de l'éprouvette CT

4.3.1 Géométrie

L'un des objectifs de notre étude étant de confronter le modèle aux résultats de la campagne d'essais de fatigue sous hydrogène gazeux menée à l'Institut PPRIME sur un acier inoxydable martensitique 15-5PH (présentée plus loin dans le chapitre 5), les simulations éléments finis visent à reproduire le comportement des éprouvettes Compact Tension (CT) 40 utilisées lors des essais de fatigue sous hydrogène gazeux sur l'acier 15-5PH. L'objectif étant de comparer des informations bidimensionnelles (vitesses de propagation de fissure de fatigue), la modélisation éléments finis est réalisée en deux dimensions.

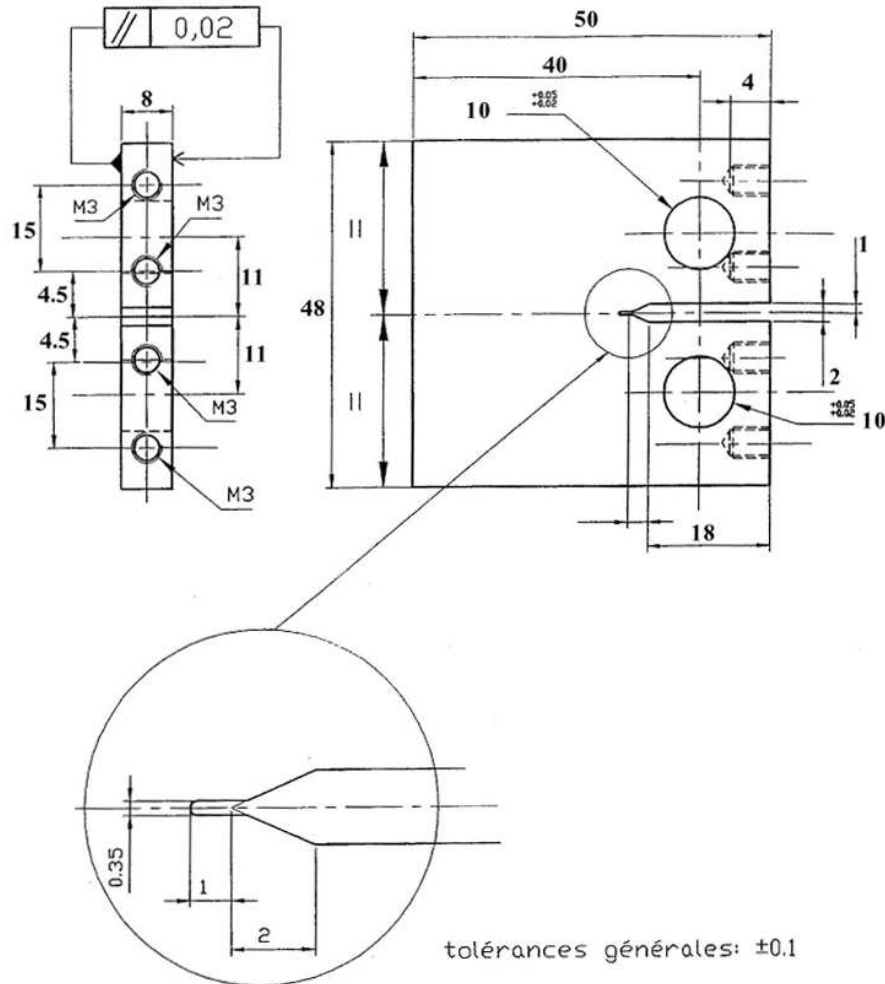


FIGURE 4.6 – Schéma de l'éprouvette Compact Tension 40 utilisée pour la campagne d'essais

Le schéma des éprouvettes CT utilisées, en accord avec la norme internationale E647 de l'ASTM intitulée « Standard Test Method for Measurement of Fatigue Crack Growth Rates » [135], est visible sur la figure 4.6. Etant donnée la symétrie de ce type d'éprouvette, le choix a été fait de n'en modéliser que la moitié, par souci de réduire le temps de calcul.

4.3.2 Maillage de l'éprouvette

La figure 4.7 présente le maillage de la demi-éprouvette CT. Une couche d'éléments cohésifs est placée le long du trajet de fissure, sur toute la largeur de l'éprouvette. Leur comportement est régi par la loi de traction-séparation présentée dans la section 3.1. La mise en œuvre numérique du modèle de zone cohésive est présentée dans la section 4.1.

En dehors des éléments cohésifs, le modèle est maillé avec des éléments de contraintes planes CPS4T (ou CPS4 sans hydrogène). L'utilisation d'éléments de couplage température - déplacement est justifiée par l'analogie possible entre l'équation de la chaleur et l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène, présentée plus loin dans la section 4.2. Le choix d'éléments de contraintes planes a été motivé par la géométrie de l'éprouvette CT 40 (cf. figure 4.6), dont l'épaisseur (8 mm) est relativement faible par rapport à ses dimensions dans le plan $(\vec{x}, \vec{y})$ ($\simeq 50$ mm). Par ailleurs, le gradient de contrainte hydrostatique, nécessaire pour implémenter l'équation de diffusion de l'hydrogène, peut être calculé à partir des points d'intégration des éléments de contraintes planes, tandis que les éléments de déformations planes (CPE4T) requièrent une mise en œuvre numérique plus complexe. Il serait intéressant d'étudier l'influence du type d'élément sur les résultats des simulations.

Comme le montre la figure 4.7, la taille de maille est de 2 mm loin du trajet de fissure. Le maillage est progressivement raffiné à l'approche de ce dernier. En pointe de fissure initiale, une zone de 1 mm de long (et de 5 μm de hauteur) est raffinée le long du trajet de fissure.

Etude de l'influence de la taille de maille

Avant de lancer les simulations, il est nécessaire d'étudier l'influence de la taille de maille. L'objectif final de la construction du modèle est de modéliser la propagation de fissures de fatigue sous hydrogène ; il est donc essentiel d'évaluer l'influence du paramètre de taille de maille sur la vitesse de propagation en chargement cyclique, ne serait-ce que pour réduire au maximum les temps de calculs, souvent conséquents. La taille d'élément le long du trajet de fissure doit être suffisamment petite pour permettre de décrire la « process zone » et la zone plastifiée cyclique en pointe de fissure.

Initialement, la taille de maille a été estimée en utilisant le critère de McClung et Sehitoğlu [136]. Les auteurs ont montré que pour limiter le phénomène de dépendance au maillage,

il est nécessaire de s'assurer que dix éléments sont présents dans la zone plastifiée en tête de fissure. Dans le cas de la propagation des fissures de fatigue, on doit s'assurer qu'il y ait dix éléments dans la zone plastifiée cyclique au plus faible niveau de ΔK que l'on souhaite simuler. Sous l'hypothèse des contraintes planes, la taille de zone plastifiée est calculée par la relation

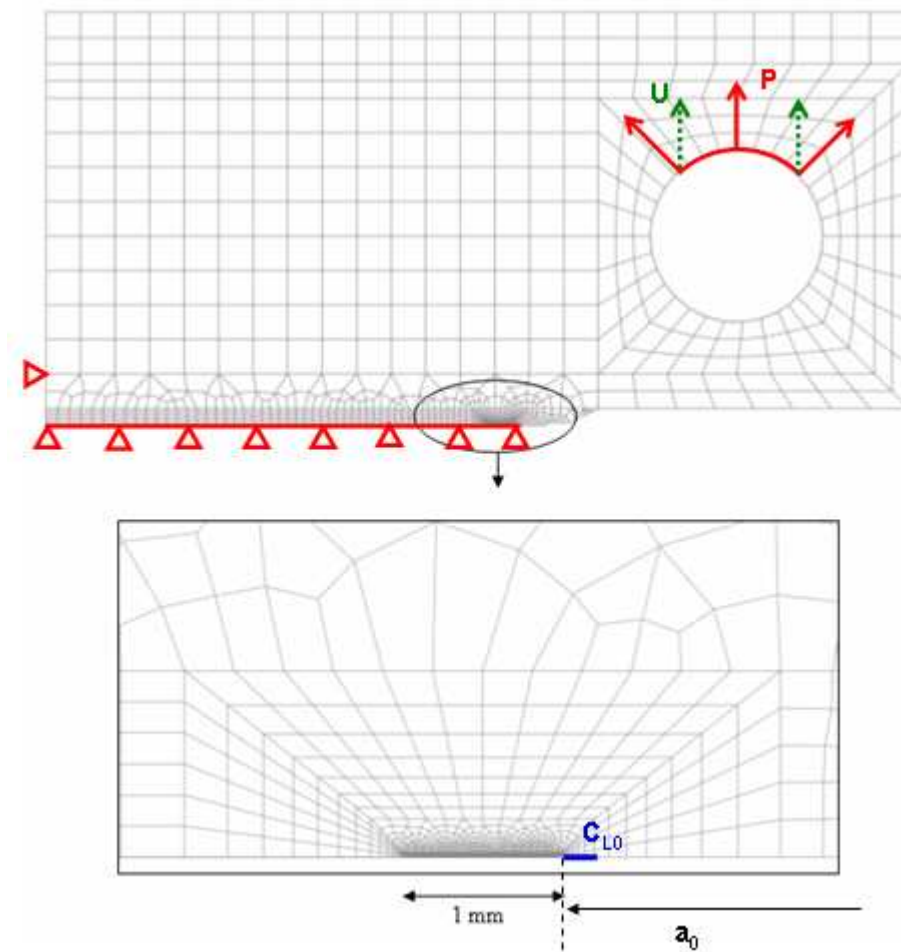


FIGURE 4.7 – Géométrie de la modélisation Abaqus d'une demi-éprouvette CT 40. La distance a_0 représente la longueur initiale de fissure (mesurée à partir du trou de la goupille), P représente la pression imposée sur le quart supérieur du trou de la goupille, éventuellement remplacée par une condition aux limites en déplacement U , et C_{L0} est la concentration d'hydrogène imposée (éventuellement) en fond de fissure.

suivante [116] :

$$r_{ZP,cyc} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\Delta K}{2\sigma_y} \right)^2. \quad (4.1)$$

Pour l'acier 15-5PH, la caractérisation du comportement du matériau (cf. section 5.1) a fourni une limite d'élasticité σ_y de 750 MPa. Pour une valeur de ΔK de 10 MPa $m^{1/2}$ (valeur la plus faible de l'intervalle de ΔK qui nous intéresse), la taille de la zone plastifiée cyclique vaut donc $r_{ZP} \simeq 7,07\mu m$ d'après la relation 4.1. D'après le critère de McClung et Sehitoglu, il faut donc s'assurer que les dix éléments les plus proches du trajet de fissure ont une taille inférieure à $7,07/10 \simeq 0,7\mu m$.

D'après Bouvard et al [23], la taille de la « forward zone » peut également être estimée en utilisant la relation 4.1, en remplaçant la limite d'élasticité σ_y par la valeur de la contrainte cohésive normale correspondant au début de l'endommagement. La valeur du paramètre « seuil » C_m étant déterminée de telle sorte que l'endommagement débute pour une contrainte cohésive d'environ $\sigma_y = 750$ MPa, la relation 4.1 indique que la taille de la « forward zone » est également de $7,07\mu m$.

En ce qui concerne la taille de la « wake zone », elle dépend de la valeur de l'exposant n_m , qui modifie l'allure de la TSL après le pic de contrainte cohésive. Plus la valeur de n_m est élevée, plus la « wake zone » est étirée.

La finalité de notre travail étant de modéliser la propagation des fissures de fatigue, les vitesses de propagation sous chargement cyclique ont été relevées pour plusieurs tailles de maille le long du trajet de fissure ($0,4\mu m$, $1\mu m$, et $2\mu m$), pour un niveau de ΔK de 10 MPa $m^{1/2}$ et pour un rapport de charge $R = 0,7$, avec les paramètres de TSL suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_n = 5.10^7 \text{ MPa} \\ m_m = m_c = 500 \text{ kJ/m}^2 \\ C_m = C_c = 10 \text{ kJ/m}^2 \\ n_m = n_c = 1 \\ \delta_0 = 1 \text{ mm.} \end{array} \right. \quad (4.2)$$

Ces paramètres donnent la même évolution aux variables D_m et D_c . L'utilisation d'exposants égaux à 1 permet de diminuer au maximum la taille de la « wake zone », et donc de se placer dans le cas le plus limitant. Les simulations faites pour les trois maillages ont donné la même vitesse de propagation d'environ 10^{-7} m/cycle.

Les simulations réalisées n'ont montré aucune influence de la taille de maille sur l'évolution de la longueur de la fissure en fonction du nombre de cycles. Il a donc été décidé de conserver le maillage raffiné à $2\mu m$ sur le trajet de fissure.

4.3.3 Conditions aux limites

Conditions aux limites mécaniques

D'après le rapport technique de Feih [137], dans le modèle de la demi-éprouvette CT, des nœuds additionnels sont dupliqués sur la ligne de symétrie pour permettre de définir les éléments cohésifs. Au cours de la déformation de l'éprouvette, les nœuds supérieurs et inférieurs de ces derniers se séparent progressivement. Le déplacement suivant la direction $\vec{y}$ des nœuds sur la ligne de symétrie est donc bloqué. Si l'on se limite à cette unique condition aux limites, les nœuds de la ligne de symétrie sont libres de se déplacer dans la direction $\vec{x}$, et les analyses préliminaires de Feih [137] indiquent que la demi-éprouvette modélisée ne représente pas correctement l'éprouvette complète. Pour ce dernier, étant donnée la symétrie de l'éprouvette CT, les nœuds supérieurs et inférieurs correspondants ont le même déplacement suivant $\vec{x}$, et les éléments cohésifs ne subissent aucun cisaillement. Par conséquent, pour modéliser la demi-éprouvette CT, le déplacement suivant $\vec{x}$ des nœuds sur la ligne de symétrie doit être égal au déplacement suivant $\vec{x}$ des nœuds supérieurs correspondants. Dans Abaqus, cela se fait en introduisant la commande *EQUATION pour chaque couple de nœuds.

Ensuite, afin d'empêcher les mouvements de solide rigide dans la direction $\vec{x}$, il est nécessaire de bloquer au moins un nœud selon cette direction. Pour éviter une quelconque influence sur la réponse en pointe de fissure, le nœud bloqué est situé du côté opposé à l'entaille, assez loin du trajet de fissure. La figure 4.7 schématise les différentes conditions aux limites.

Le type de chargement imposé varie selon le type de simulation (statique, monotone, fatigue) ; en revanche, sa localisation reste identique. Pour représenter l'effort appliqué à l'éprouvette par la goupille, on impose le chargement sur le quart supérieur du trou de la goupille [9], comme visible sur la figure 4.7. Les différents types de chargement (déplacement, pression) seront présentés dans leurs sections respectives dans la partie III.

Concentration d'hydrogène en fond de fissure

Pour les calculs sous chargements statique, monotone et cyclique en atmosphère d'hydrogène gazeux, l'environnement hydrogéné est représenté par une condition aux limites sur quelques nœuds en fond de fissure, où la concentration d'hydrogène est supposée constante (égale à C_{L0}) au cours du chargement (cf. figure 4.7). Le choix de cette condition aux limites est justifié par la construction en deux dimensions du modèle. En effet, le profil de concentration d'hydrogène dans la moitié de l'épaisseur de l'éprouvette CT (8 mm), calculé à partir de l'approximation de plaque épaisse de la seconde loi de Fick (cf. chapitre 5, et figure 5.9), montre que l'hydrogène ne dispose pas du temps nécessaire pour diffuser jusqu'au centre de l'épaisseur de l'éprouvette CT pendant les essais à la fréquence de 20 Hz. De plus, la zone d'intérêt pour la diffusion couplée

de l'hydrogène (zone plastifiée, et zone à forte contrainte hydrostatique) est située en amont de la pointe de fissure.

La valeur de la concentration C_{L0} est déterminée par la loi de Sieverts en fonction de la pression d'hydrogène gazeux (cf. section 1.3.2 de la partie I). Vu le manque de données pour l'acier martensitique 15-5PH, le choix a été fait d'utiliser en première approximation la loi de Sieverts pour le fer α . Par exemple, pour la pression d'hydrogène expérimentale de 9 MPa (soit 90 bars), à la température ambiante d'environ 300 K, la loi de Sieverts pour le fer α donne une solubilité de $S = 1,96 \times 10^{22}$ atomes/ m^3 . Cette loi étant fonction de la racine de la pression, une pression égale à 0,09 MPa (soit 0,9 bars) entraîne une solubilité dix fois plus faible, soit $S = 1,96 \times 10^{21}$ atomes/ m^3 . En supposant que la concentration en surface est égale à la solubilité, on peut estimer la concentration d'hydrogène à imposer aux nœuds en fond de fissure.

Troisième partie

Validation du modèle et confrontation avec l'expérience

Abstract

 IN THIS LAST PART, the model will be validated and confronted with the experimental results of fatigue crack propagation tests – carried out on the Hycomat test bench – in gaseous hydrogen at high pressure on a 15-5PH martensitic stainless steel.

First of all, the first chapter presents the results of the fatigue crack propagation experiments under high pressure H_2 . Firstly, section 5.1 presents the properties and the cyclic behavior of the material – a precipitation-hardened martensitic stainless steel. Then, the next section describes the Hycomat test bench, as well as the experimental set-up. After that, the results of the experimental tests are presented. The effect of gaseous hydrogen pressure in relation with the loading frequency on the fatigue crack growth behavior of the material and the cracking mode is investigated. Crack propagation curves in hydrogen at 9 MPa and 0,09 MPa for a high loading frequency (20 Hz) are compared to the curve obtained for the same steel in air. It is shown that hydrogen leads to a degradation in fatigue crack growth resistance, which derives from a complex interaction between the fatigue damage and the amount of hydrogen enriching the crack tip – which is dependent on the hydrogen pressure, loading frequency, and stress intensity factor level.

The second chapter presents a study of interstitial hydrogen diffusion under static loading. This section aims at validating the implementation of the coupled diffusion equation ; the evolutions of lattice and trapped hydrogen concentrations are compared to those of [14]. Furthermore, the influence of hydrostatic stress and plastic deformation on hydrogen diffusion is studied.

After that, the ability of the model to predict crack propagation under monotonous loading in high pressure H_2 is analyzed. R-CTOD curves, simulated with and without hydrogen for different loading rates, are confronted with an experimental and numerical study by Scheider et al [24]. In particular, results obtained with the coupled diffusion equation are compared to R-CTOD curves simulated with a mere Fick's law. The contribution of trapped hydrogen in the calculation of hydrogen coverage θ is examined.

Later on, the specific traction-separation law is tested without hydrogen under fatigue loading. Fatigue crack propagation is simulated for different levels of ΔK and different load ratios (0.1 and 0.7). The parameters of the traction-separation law are identified from experimental crack propagation rates in a 15-5PH martensitic stainless steel in air. The simulated curves for both load ratios are compared to the experimental ones.

Finally, in chapter 9, the ability of the model to predict fatigue crack propagation in a 15-5PH martensitic stainless steel in gaseous hydrogen is studied. More particularly, the influence of pressure, loading frequency and stress intensity factor amplitude is examined. Simulated fatigue crack propagation rates are compared to experimental measurements in H_2 at 0,09 and 9 MPa. The profiles of hydrogen coverage along the ligament are studied for different hydrogen

pressures, loading frequencies and ΔK levels. In particular, the contribution of trapped hydrogen is examined.

LA PARTIE PRÉCÉDENTE A PRÉSENTÉ la formulation et l'implémentation du modèle, avec le développement d'une loi de traction-séparation apte à décrire la dégradation du matériau sous chargement cyclique, et l'utilisation d'une équation de diffusion couplée de l'hydrogène dans le volume du matériau. L'objectif de cette partie est de mettre à l'épreuve le modèle construit et de conclure sur ses possibilités et ses limitations, en le confrontant avec les résultats de la littérature et avec les résultats de la campagne expérimentale sous H_2 sur Hycomat sur l'acier inoxydable martensitique 15-5PH. La partie III est donc divisée en plusieurs chapitres.

Le premier chapitre présentera l'acier inoxydable martensitique 15-5PH étudié, ainsi que les essais de propagation de fissures de fatigue sous hydrogène gazeux. Ensuite, les deux sections suivantes présenteront la validation de la diffusion couplée de l'hydrogène en chargement statique et l'utilisation du modèle pour prédire la propagation des fissures sous chargement monotone en présence d'hydrogène. Le chapitre suivant présentera la capacité du modèle à prédire la propagation des fissures de fatigue sous chargement cyclique. Enfin, dans le dernier chapitre, les vitesses de propagation de fissure de fatigue dans l'hydrogène gazeux simulées seront confrontées aux vitesses expérimentales. Ces études permettront de faire le bilan des possibilités du modèle, et d'évoquer ses éventuelles améliorations.

Chapitre 5

Essais de propagation de fissures de fatigue dans l'acier 15-5PH sous hydrogène gazeux

5.1 Présentation du matériau

DANS UN PREMIER TEMPS, présentons le matériau étudié, ainsi que la caractérisation de son comportement cyclique. La campagne d'essais porte sur un acier commercial 15-5PH (numéro UNS S15500), aussi connu sous le nom de X5CrNiCu15-5 dans la nomenclature Afnor. Il s'agit d'un acier inoxydable martensitique à base de chrome-nickel-cuivre durci par précipitation, produit industriellement sous forme de plaques. La composition exacte de l'acier est reportée dans le tableau 5.1. La figure 5.1 montre une micrographie du 15-5PH, qui révèle une structure martensitique revenue. Cet alliage combine à la fois une bonne résistance sous chargement monotone, à la corrosion et un caractère ductile. Le 15-5PH est largement utilisé dans les industries chimiques et pétrochimiques, et dans le domaine aéronautique, notamment pour certaines pièces d'avion (vannes, soupapes, systèmes de fixation, etc.) en environnement corrosif sous haute pression.

L'acier utilisé porte la dénomination H1025, c'est-à-dire qu'il a été soumis à un traitement thermique de quatre heures à une température de 551°C (soit 1025°F, ou 823 K) avant d'être refroidi rapidement à l'aide d'un jet d'air froid. D'après Murray [10], c'est sous cette forme que l'acier 15-5PH est le plus sensible à la fragilisation par l'hydrogène. Cet auteur a préchargé cathodiquement en hydrogène des échantillons d'acier 15-5PH sous deux formes (H1025 et H1050, correspondant à un revenu de quatre heures à 1050°F, soit 566°C), puis les a soumis à des essais

Tableau 5.1 – Composition chimique de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH

Elément chimique	C	Mn	Si	Cr	Ni	Cu	Nb + Ta
Pourcentage en masse	< 0,07	< 1	< 1	14 à 15,5	3,5 à 5,5	2,5 à 4,5	0,15 à 0,45

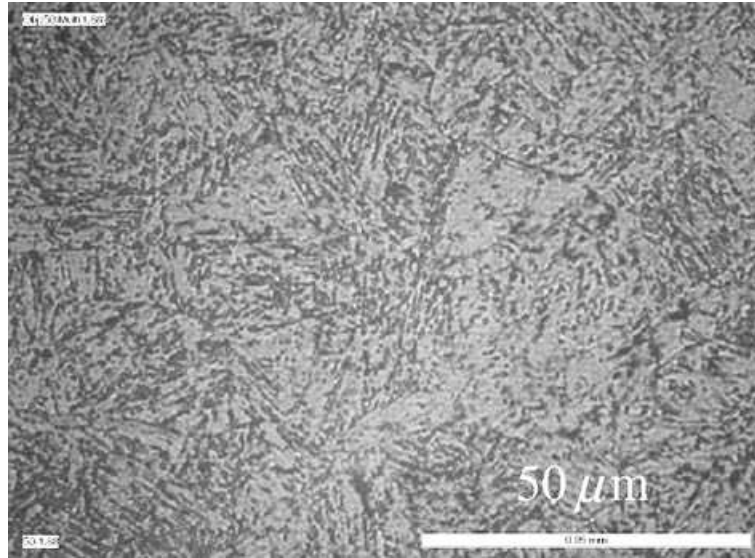


FIGURE 5.1 – Micrographie de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH (H1025)

de traction, et a étudié la réduction de section à la rupture des échantillons en fonction du temps de chargement en hydrogène. Il en a déduit que l'acier 15-5PH sous sa forme H1025 est plus sensible à la fragilisation par l'hydrogène. On peut donc raisonnablement penser que c'est sous cette forme qu'on est le plus à même d'observer un effet de l'hydrogène gazeux à haute pression sur le comportement mécanique du 15-5PH.

Caractérisation du comportement cyclique

Dans sa thèse à l'Institut PPRIME portant sur la modélisation du comportement mécanique en fissuration d'alliages aéronautiques, François Hamon [9] a réalisé l'identification du comportement élastoplastique avec écrouissage cinématique non-linéaire, nécessaire pour simuler le comportement cyclique de l'acier inoxydable 15-5PH. La figure 5.2 présente les cycles stabilisés pour différentes valeurs de déformation totale imposée pour l'acier 15-5PH dans le sens LT.

Les essais de traction-compression cyclique ont permis d'identifier les paramètres du comportement cyclique du matériau (module de Young E , coefficient de Poisson ν , limite d'élasticité σ_y et paramètres de l'écrouissage cinématique non-linéaire C_{cin} et γ), qui sont reportés dans le tableau 5.2.

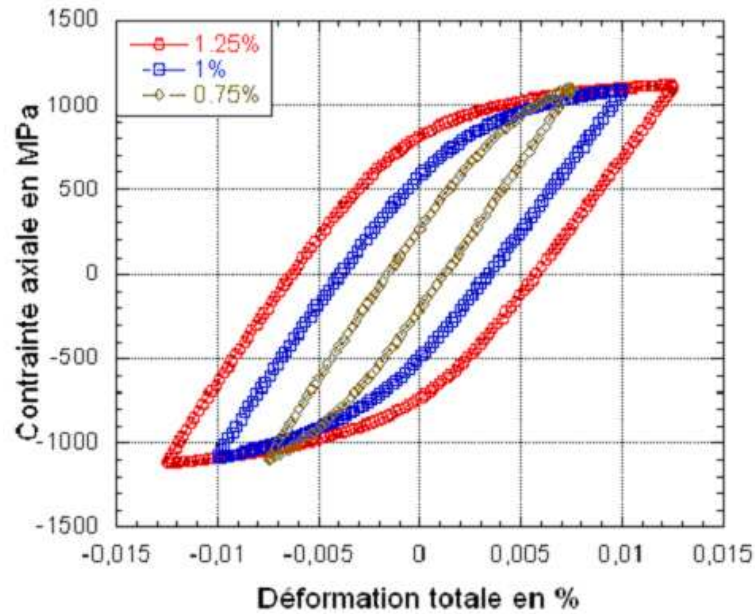


FIGURE 5.2 – Cycles stabilisés sous différentes valeurs de déformation totale imposée au cours de l'essai sur l'acier 15-5PH dans le sens LT

Tableau 5.2 – Paramètres du comportement cyclique de l'acier inoxydable martensitique 15-5PH, identifiés par le modèle de Pommier-Hamam [138]

Paramètre	Valeur	Unité
E	200 000	MPa
ν	0,3	–
σ_y	750	MPa
C_{cin}	270 000	MPa
γ	600	–

Eprouvettes « Compact Tension »

Les éprouvettes utilisées ont été prélevées dans le sens longitudinal-transversal (LT). Il s'agit d'éprouvettes Compact Tension (CT) 40. La figure 4.6 a présenté leur géométrie. Une précédente étude menée à l'Institut PPRIME a montré que le sens de prélèvement des éprouvettes n'a que peu d'impact sur la propagation des fissures de fatigue dans ce matériau [9].

Pour les essais sous hydrogène, après polissage avec des papiers abrasifs, les surfaces des éprouvettes ont subi un polissage diamant jusqu'à une taille d' $1\ \mu\text{m}$ pour permettre de suivre l'avancée de la fissure avec un microscope longue distance de type Questar. L'avancée de la

fissure est également suivie par différence de potentiel. Les éprouvettes testées en atmosphère d'hydrogène ont été pré-entaillées par électro-érosion à l'Institut PPRIME sous air jusqu'à une longueur d'environ 1 mm.

5.2 Essais de propagation de fissure de fatigue sous haute pression d' H_2

Les essais cycliques sous hydrogène ont été menés sur le dispositif expérimental Hycomat sur le site du Centre d'Etudes Aérodynamiques et Thermiques de l'Université de Poitiers - ENSMA, à Poitiers. Le paragraphe suivant présente les caractéristiques et les possibilités du dispositif Hycomat. On s'attardera ensuite à présenter le principe des essais de fatigue sous haute pression d'hydrogène. On conclura ce chapitre en présentant les résultats et conclusions de l'étude.

5.2.1 Présentation du dispositif Hycomat

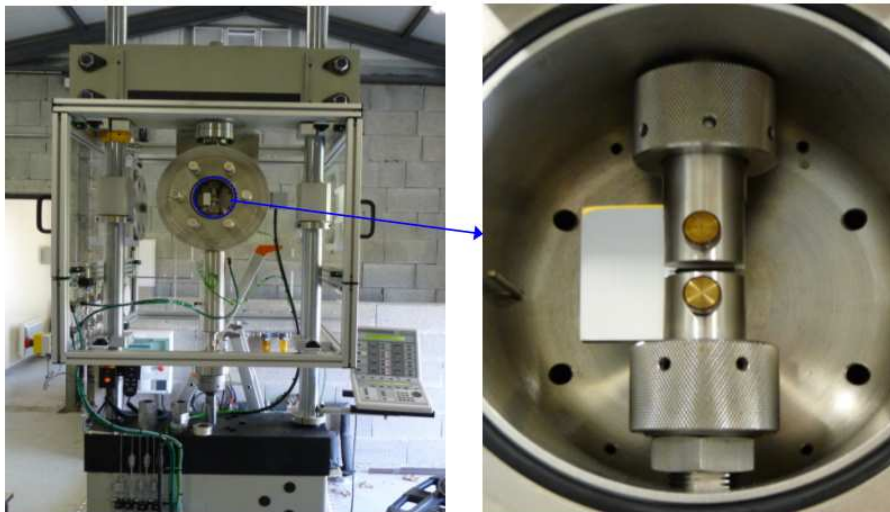


FIGURE 5.3 – Photographies du dispositif Hycomat

Le dispositif Hycomat [139, 140] est un banc d'essais développé à l'Institut PPRIME pour l'étude des effets d'environnement sur le comportement mécanique des matériaux. Il est possible d'effectuer des essais sous azote (N_2), dioxyde de carbone (CO_2), ou hydrogène (H_2). Ce banc est constitué d'une machine de traction hydraulique INSTRON 8802 munie d'une enceinte sous pression, régulée thermiquement par l'intermédiaire d'un collier chauffant permettant des essais sous pression de gaz jusqu'à 40 MPa entre la température ambiante et 150°C (cf. figures 5.3

et 5.4). L'intérieur de cette enceinte est cylindrique et représente un volume de 1,77 L. La machine de traction, d'une capacité maximale de 20 kN, peut fonctionner jusqu'à une fréquence de sollicitation de 40 Hz. Sa course maximale est limitée à 20 mm par la hauteur de la chambre pressurisée, ce qui limite les dimensions des éprouvettes. Cette machine d'essai permet la réalisation d'essais mécaniques traditionnels de traction uniaxiale, de fluage et de fatigue.

Pour les essais de fissuration de fatigue sous H_2 , les éprouvettes Compact Tension sont fixées aux mors de la machine de traction dans l'enceinte sous pression, dans laquelle on règle la pression d'hydrogène. Le système informatique mis en place permet de piloter l'essai et d'acquérir les données de manière automatisée. L'avancée de la fissure est suivie en direct par la méthode de la différence de potentiel, ainsi que par un microscope longue distance de type Questar. Il est également possible de faire des mesures de fermeture de fissure.

5.2.2 Principe des essais de propagation de fatigue sous H_2

Les essais de propagation de fissure en fatigue ont été réalisés à température ambiante sous différentes pressions d'hydrogène sur le banc d'essais Hycomat. Les tests ont été effectués en contrôlant la charge, à amplitude de chargement constante, c'est-à-dire en augmentant progressivement l'amplitude de variation du facteur d'intensité de contraintes $\Delta K = K_{max} - K_{min}$ après préfissuration. Afin d'étudier l'effet de la pression d'hydrogène sur la propagation des fissures de fatigue, des essais ont été réalisés sur différentes éprouvettes dans l'air et dans l'hydrogène à différentes pressions (0,09 MPa et 9 MPa). Ces tests ont généralement été réalisés à une fréquence de 20 Hz. Toutefois, afin d'étudier l'impact de la variation de la fréquence cyclique, un essai a

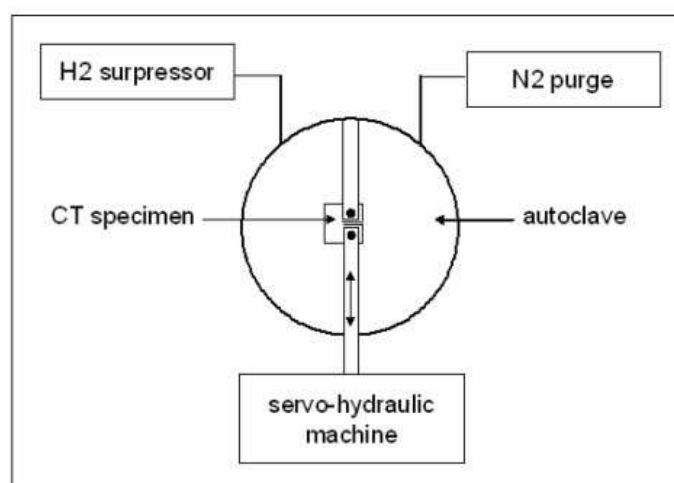


FIGURE 5.4 – Schéma du fonctionnement du dispositif Hycomat

été réalisé sous 0,9 MPa d'hydrogène à une fréquence de 20 Hz, abaissée de temps à autres à 0,2 Hz pour plusieurs valeurs de ΔK .

Tous les essais ont été réalisés avec une forme de signal sinusoïdale, à un rapport de charge $R = K_{min}/K_{max} = 0,7$ pour éviter les effets de fermeture de fissure. Après la fin des essais, les surfaces de rupture ont été observées en détail au microscope électronique à balayage (MEB). Le paragraphe 5.2.3 détaille les résultats de l'étude.

5.2.3 Mesures et observations expérimentales

Cette section présente les résultats des mesures et observations réalisées pendant et après les essais sous haute pression d'hydrogène sur le dispositif Hycomat sur un acier 15-5PH. Les paragraphes suivants présentent les analyses de l'influence de différents paramètres (pression d'hydrogène dans l'enceinte, fréquence de l'essai cyclique) en lien avec la littérature. Pour conclure cette section sur la campagne d'essais, le paragraphe 5.2.4 donnera lieu à une discussion sur le rôle de l'hydrogène dans la modification des mécanismes d'endommagement en pointe de fissure.

Influence de la pression d' H_2 sur la propagation des fissures de fatigue

L'influence de la pression d'hydrogène gazeux est illustrée par la figure 5.5, qui présente l'évolution des vitesses de propagation de fissures de fatigue da/dN en fonction de la variation du facteur d'intensité de contraintes ΔK à température ambiante dans l'hydrogène à différentes pressions et dans l'air à pression atmosphérique. On remarque globalement que les vitesses de propagation sont plus élevées dans l'hydrogène que dans l'air.

Par ailleurs, si l'on compare les courbes obtenues dans l'air et dans l'hydrogène à faible pression (0,09 MPa) dans l'intervalle de ΔK étudié, on observe que l'augmentation de vitesse due à l'influence de l'hydrogène est légère (augmentation de vitesse d'un facteur 4 environ). Les pentes des courbes $da/dN - \Delta K$ sont du même ordre, ce qui amène à penser que la présence d'hydrogène ne change pas fondamentalement le mode de rupture. Les observations des surfaces de rupture corroborent cette affirmation. La figure 5.6 présente les surfaces de rupture caractéristiques des éprouvettes rompues sous chargement cyclique dans l'air (a) et dans l'hydrogène gazeux à la pression de 0,09 MPa (b). Il est à noter que la morphologie des surfaces de rupture est la même dans toute la gamme de ΔK explorée. Les fractographies (a) et (b) sont similaires, malgré l'environnement différent (air et H_2). La rupture se fait principalement par quasi-clivage ; quelques facettes intergranulaires sont également visibles. Plusieurs auteurs [141–143] ont noté la présence de décohésions le long des joints des anciens grains d'austénite, en particulier pour des aciers faiblement alliés à haute résistance trempés et revenus, dans l'air et dans l'hydrogène gazeux. En revanche, les facettes intergranulaires sont quasiment absentes pour les essais sous

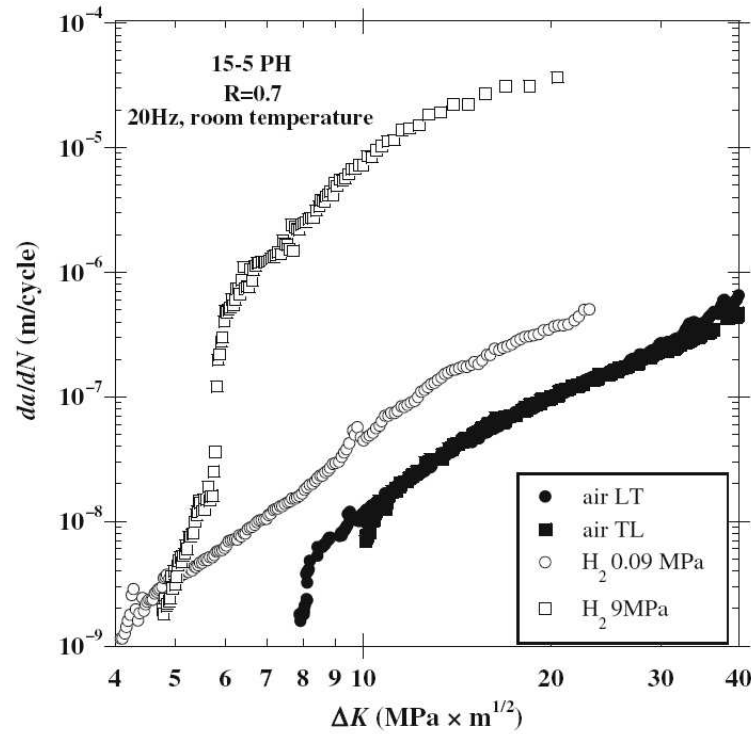


FIGURE 5.5 – Courbes $\frac{da}{dN}$ en fonction de ΔK pour l'acier 15-5PH dans l'hydrogène à 0,09 et 9 MPa, comparées à la courbe obtenue dans l'air à pression et température ambiantes

vide, où la rupture se fait principalement par quasi-clivage, à l'instar de ce que l'on observe dans l'air [144]. Les fractographies (a) et (b) sont en outre sensibles à la microstructure. Ce type de morphologie avec lattes de martensite a également été observé par Ding et al [5] sur un acier 13-8PH Mo inoxydable martensitique durci par précipités. Si l'on compare les images (a) et (b), on remarque que les joints des anciens grains d'austénite semblent plus nets dans l'hydrogène à 0,09 MPa que dans l'air. Les facettes intergranulaires sont également légèrement plus nombreuses que dans l'air, ce qui est cohérent avec l'effet modéré de l'hydrogène à 0,09 MPa (cf. figure 5.5).

Sous 9 MPa d'hydrogène, la courbe de propagation révèle un comportement différent : pour de faibles niveaux de ΔK ($< 6 \text{ MPa } m^{1/2}$), les vitesses relevées sont légèrement plus élevées qu'à 0,09 MPa d' H_2 . On voit ensuite apparaître un régime transitoire brutal autour de $\Delta K = 7 \text{ MPa } m^{1/2}$, où la vitesse de propagation augmente rapidement. Enfin, pour les valeurs de $\Delta K > 7 \text{ MPa } m^{1/2}$, il semble qu'on ait atteint un régime où les vitesses de propagation de fissure relevées sont environ deux ordres de grandeur plus élevées que dans l'air. La pente de la courbe $da/dN - \Delta K$ est alors du même ordre que les pentes des courbes dans l'air et dans l'hydrogène

à 0,09 MPa.

De telles augmentations brutales des vitesses de propagation dans un intervalle de ΔK limité ont déjà été rapportées par Cialone et Holbrook [145, 146] sur un acier X42 et par Walter et Chandler [147] sur un acier SAE-105 grade II sous une pression d'hydrogène comparable (6,9 MPa). Des observations similaires sur des aciers différents suggèrent que cette augmentation brutale de vitesse n'est pas due à des détails microstructuraux mais principalement à la structure de base du matériau.

Par ailleurs, les observations révèlent que la surface de rupture change progressivement de morphologie au fur et à mesure que le niveau de ΔK augmente. En effet, pour de faibles niveaux de ΔK ($< 6 \text{ MPa } m^{1/2}$), on observe des facettes de quasi-clivage, à l'instar de ce qu'on observe pendant les essais de traction à vitesse lente dans l'hydrogène gazeux à 10 MPa [148], et des facettes intergranulaires avec des fissures secondaires (cf. figure 5.7 (a)). Ces facettes intergranulaires ont tendance à disparaître au cours du régime transitoire, et sont totalement absentes lorsque le régime permanent à haut ΔK est atteint. On observe alors de nombreuses fissures secondaires ouvertes ainsi que du quasi-clivage (cf. figure 5.7 (b)). La surface de rupture présente un aspect très fragile, malgré les valeurs élevées de K_{max} . Remarquons enfin que cette surface de rupture est très proche de celle décrite par Nibur et al [149] pour un acier faiblement allié rompu sous chargement monotone dans une atmosphère d'hydrogène à 103 MPa. Au final, ces observations permettent de conclure que le nombre de facettes intergranulaires n'est pas un indi-

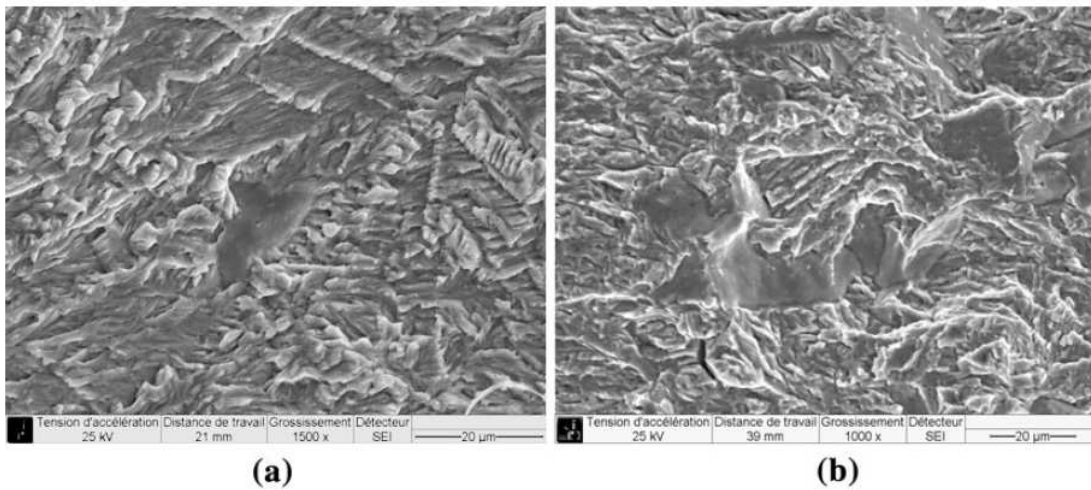


FIGURE 5.6 – Surfaces de rupture représentatives de la propagation de fissures de fatigue (a) dans l'air ($\Delta K = 10 \text{ MPa } m^{1/2}$, $da/dN = 7 \times 10^{-9} \text{ m/cycle}$) et (b) dans l'hydrogène à 0,09 MPa ($\Delta K = 10 \text{ MPa } m^{1/2}$, $da/dN = 1,6 \times 10^{-8} \text{ m/cycle}$)

cateur de l'intensité de l'effet de l'hydrogène sur l'endommagement en pointe de fissure. D'autres travaux [150–152] ont rapporté des conclusions similaires.

L'analyse des surfaces de rupture et des courbes de propagation montre que le mécanisme d'endommagement prédominant dépend de la pression d'hydrogène et du niveau de ΔK . Si on compare les résultats obtenus dans l'hydrogène gazeux à ceux obtenus dans l'air, on voit que la présence de facettes intergranulaires, de facettes de quasi-clivage et de fissures secondaires est due à l'effet fragilisant de l'hydrogène, qui entraîne des vitesses de propagation plus élevées que dans l'air.

Influence de la fréquence de chargement sous 0,9 MPa d' H_2

La figure 5.8 montre l'influence de la fréquence de chargement sur la propagation de fissures de fatigue sous hydrogène. L'essai a été effectué sous une pression d'hydrogène de 0,9 MPa en faisant varier la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz à 0,2 Hz pendant une durée de quelques cycles à plusieurs longueurs de fissure déterminées correspondant à différentes valeurs de ΔK . Sur la courbe obtenue, on peut voir que la baisse ponctuelle de la fréquence de 20 à 0,2 Hz entraîne une augmentation rapide de la vitesse de propagation qui semble s'approcher des vitesses relevées à 9 MPa d' H_2 à une fréquence de 20 Hz. Cette augmentation de vitesse

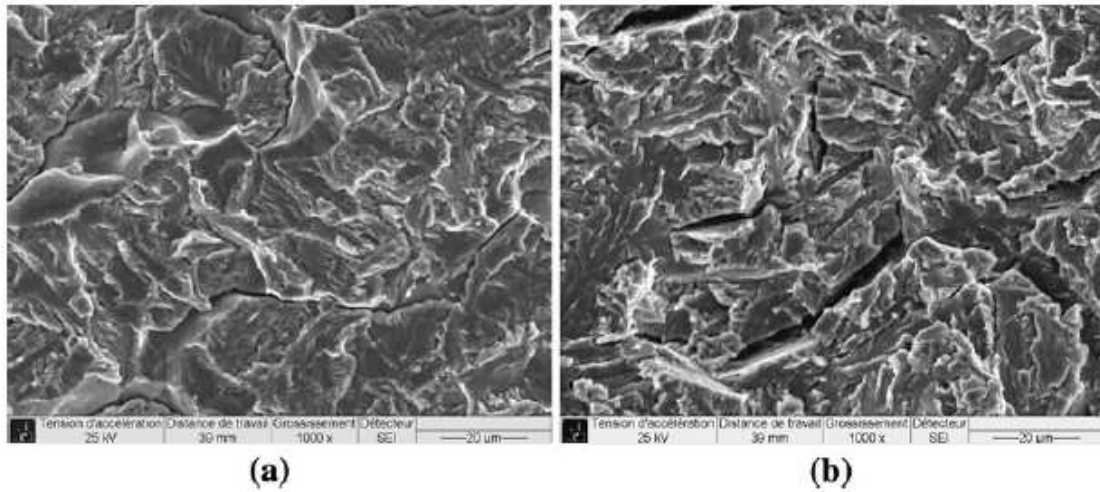


FIGURE 5.7 – Surfaces de rupture représentatives de la propagation des fissures de fatigue dans l'hydrogène gazeux à 9 MPa (a) pour de faibles niveaux de ΔK ($\Delta K = 5 \text{ MPa } m^{1/2}$, $da/dN = 4,1 \times 10^{-9} \text{ m/cycle}$) et (b) pour des niveaux de ΔK élevés ($\Delta K = 10,5 \text{ MPa } m^{1/2}$, $da/dN = 3 \times 10^{-6} \text{ m/cycle}$)

semble plus prononcée pour les grandes valeurs de ΔK ($> 7 \text{ MPa } m^{1/2}$). Une fois que la fissure s'est propagée d'une certaine distance à la fréquence de 0,2 Hz, le retour à la fréquence initiale de 20 Hz entraîne une diminution de la vitesse jusqu'à ce que la courbe recouvre la tendance mesurée sous 0,9 MPa d'hydrogène à 20 Hz (cf. figure 5.8). Certains auteurs [153] ont observé une augmentation de vitesse comparable dans un acier Cr-Mo trempé revenu à la même fréquence de chargement et aux mêmes niveaux de ΔK pour les éprouvettes les plus chargées par voie cathodique (typiquement $> 0,5 \text{ ppm}$). De plus, la nature transitoire de l'augmentation de vitesse observée amène à penser que ce n'est pas l'hydrogène ayant diffusé dans le matériau grâce à un plus grand temps d'exposition lors des phases à fréquence faible qui contrôle ce phénomène. En effet, si c'était le cas, l'augmentation de vitesse serait maintenue après le retour à haute fréquence.

La figure 5.9 représente le profil de concentration d'hydrogène dans la moitié de l'épaisseur de l'éprouvette Compact Tension (d'épaisseur 8 mm), calculé à partir de l'approximation de plaque épaisse de la seconde loi de Fick. En supposant que la concentration sur la surface libre

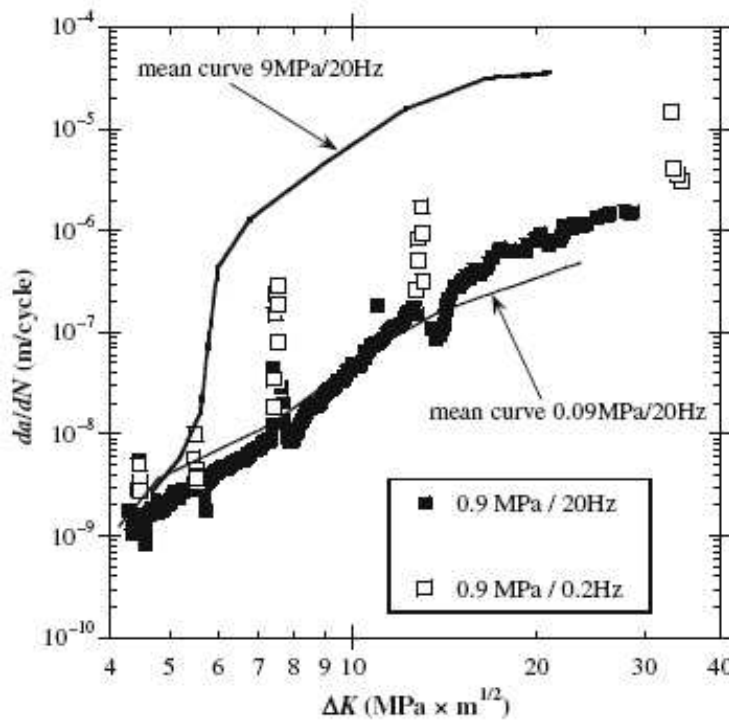


FIGURE 5.8 – Courbe de propagation da/dN en fonction de ΔK obtenue en faisant varier la fréquence de chargement entre 20 Hz et 0,2 Hz sous 0,9 MPa d' H_2 , comparée aux courbes da/dN - ΔK sous 0,09 MPa et 9 MPa d' H_2 à une fréquence de 20 Hz

de l'éprouvette est constante et vaut C_S , et que la concentration d'hydrogène interne initiale peut être négligée par rapport à la concentration en surface, on obtient :

$$\frac{C(x,t)}{C_S} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_H t}}\right) \quad (5.1)$$

Sur la figure 5.9, on observe que pour une durée d'essai de 24 h (durée moyenne d'un essai à haute fréquence), la concentration d'hydrogène est faible dans l'épaisseur de l'éprouvette, tandis que la concentration d'hydrogène est non négligeable sur les deux premiers millimètres à partir de la surface pour une durée d'essai de 5 jours (ce qui correspond à la durée moyenne d'un essai à faible fréquence). Etant donné que l'on retrouve la vitesse de propagation initiale après réaugmentation de la fréquence de chargement, on peut arriver à la conclusion que la diffusion de l'hydrogène depuis la surface n'est pas seule responsable de l'augmentation de la vitesse relevée lorsqu'on diminue la fréquence.

La figure 5.10 (a) montre la surface de rupture de l'éprouvette dans son ensemble. Les bandes foncées correspondent aux zones où la fissure s'est propagée à basse fréquence (0,2 Hz) pendant quelques cycles. Les zones plus claires correspondent à la propagation à 20 Hz. Des observations à

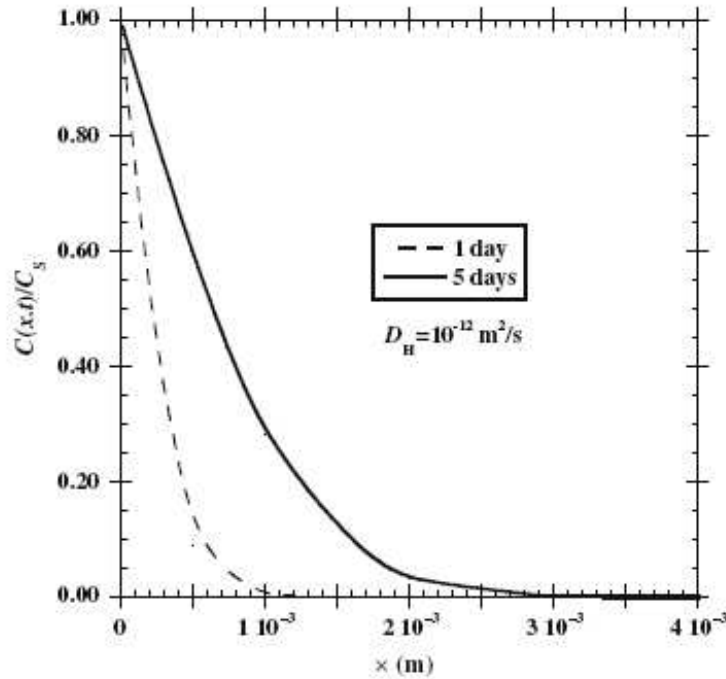


FIGURE 5.9 – Profil de concentration d'hydrogène en fonction de la durée de l'essai

plus fort grandissement de ces différentes zones ont été faites au MEB afin de déceler les éventuels changements de mécanisme d'endommagement. Pour illustrer un effet possible du niveau de ΔK , les fractographies aux deux fréquences sont présentées pour deux valeurs de ΔK : 6 et 15 $\text{MPa m}^{1/2}$.

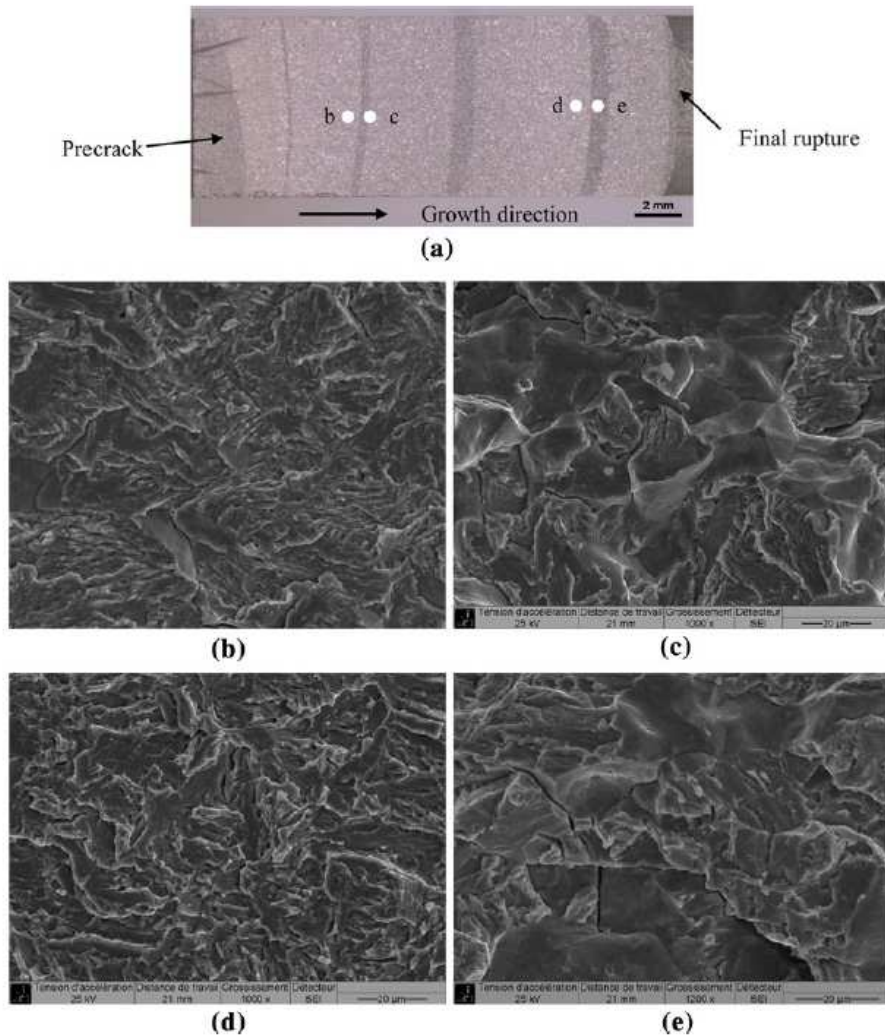


FIGURE 5.10 – Observations de la surface de rupture : (a) image de la surface globale, où les bandes foncées correspondent à la propagation de la fissure pendant un certain nombre de cycles à 0,2 Hz, (b) à $\Delta K = 6 \text{ MPa m}^{1/2}$ à 20 Hz, (c) à $\Delta K = 6 \text{ MPa m}^{1/2}$ à 0,2 Hz, (d) à $\Delta K = 15 \text{ MPa m}^{1/2}$ à 20 Hz, et (e) à $\Delta K = 15 \text{ MPa m}^{1/2}$ à 0,2 Hz. La diminution de la fréquence 20 Hz à 0,2 Hz favorise l'apparition des facettes intergranulaires

Les figures 5.10 (b) et (c) présentent respectivement les observations MEB de la surface de rupture à 20 Hz et 0,2 Hz à $\Delta K = 6 \text{ MPa } m^{1/2}$. A 20 Hz, la surface de rupture révèle un mode de rupture plutôt ductile avec quelques facettes intergranulaires (cf. figure 5.10 (b)). La morphologie de la surface à 0,2 Hz est différente : on y repère de nombreuses facettes et fissures secondaires intergranulaires (cf. figure 5.10 (c)). Cela indique donc qu'à cette pression d'hydrogène, l'abaissement de la fréquence de chargement cyclique favorise la décohésion intergranulaire.

Les figures 5.10 (d) et (e) présentent des exemples caractéristiques de surface de rupture pour les niveaux plus élevés de ΔK (ici $15 \text{ MPa } m^{1/2}$) à 20 Hz et 0,2 Hz. Pour la haute fréquence de chargement (20 Hz), la rupture est intragranulaire et on peut observer la présence de nombreuses petites facettes de quasi-clivage (cf. figure 5.10 (d)). Ce même type de morphologie a été reporté par Ding et al [5] pour un acier 13-8PH Mo sous 0,2 MPa d'hydrogène à une fréquence cyclique de 20 Hz. Dans le cas de la faible fréquence (0,2 Hz), la surface de rupture présente de nombreuses facettes intergranulaires et des traces de fissures secondaires intergranulaires (cf. figure 5.10 (e)).

Le retour de 0,2 à 20 Hz entraîne l'apparition d'une surface de rupture transgranulaire proche de ce qui a été observé avant la diminution de fréquence initiale. Lors du changement de fréquence de 0,2 à 20 Hz, il faut donc un certain temps de propagation pour recréer un front de fissure qui corresponde au mode de rupture transgranulaire prédominant à 20 Hz à partir d'un front de fissure majoritairement intergranulaire à 0,2 Hz, entraînant un ralentissement de la propagation de la fissure. La diminution de la vitesse observée sur la figure 5.8 immédiatement après la réaugmentation de la fréquence de 0,2 à 20 Hz est cohérente avec cette affirmation. Ces observations suggèrent une forme de réversibilité ; elles sont confortées par les travaux de Moro et al [2], qui ont montré qu'au vu de la réversibilité du phénomène de fragilisation par l'hydrogène, l'effet fragilisant disparaît progressivement lorsqu'on purge l'hydrogène de la chambre.

Les résultats de la campagne expérimentale menée sur Hycomat montrent que la réversibilité de la FPH pourrait également expliquer les effets de fréquence. Nous allons par la suite analyser plus en profondeur l'influence des différents paramètres des essais (pression d' H_2 et fréquence du chargement), en lien avec les changements de mécanismes de rupture observés.

5.2.4 Discussion

L'exploitation des résultats de la campagne d'essais montre que la présence d'hydrogène gazeux a une influence délétère sur la tenue en fatigue de l'acier 15-5PH, par rapport à celle observée dans l'air. En effet, les essais en atmosphère de H_2 ont donné des vitesses de propagation de fissures de fatigue plus élevées, quelle que soit la pression d'hydrogène. L'augmentation observée dépend cependant de la pression du gaz, de la fréquence du chargement cyclique et du niveau de ΔK . L'effet est d'autant plus marqué que la pression et la valeur de ΔK sont élevés, et que la fréquence est faible. Ces conclusions concordent avec les résultats expérimentaux

présentés dans l'article de Clark [154] pour des aciers HY-80 et HY-130.

On considère qu'augmenter la pression d'hydrogène a pour conséquence, pour un chargement donné, d'augmenter la concentration d'hydrogène au voisinage de la pointe de fissure. De la même manière, on considère que diminuer la fréquence favorise l'absorption et/ou la diffusion de l'hydrogène dans le matériau très déformé en pointe de fissure. Par conséquent, la vitesse de déformation est un paramètre clé dans la compréhension des mécanismes d'endommagement en jeu dans la propagation de fissures de fatigue assistée par l'hydrogène. Par ailleurs, Lynch et Ryan [155] ont montré sur un acier faiblement allié à haute limite d'élasticité que l'augmentation de la vitesse de propagation due à l'atmosphère d' H_2 à 0,013 MPa est contrôlée à niveau de ΔK fixé par le temps de montée de chargement, indépendamment de la fréquence et de la forme du signal.

L'influence de ces paramètres est étudiée dans les paragraphes suivants.

Influence de la pression d' H_2

Comme présenté dans la partie « résultats » (cf. section 5.2.3), plus la pression d'hydrogène est élevée, plus les vitesses de propagation mesurées sont élevées. L'effet fragilisant de l'hydrogène est plus marqué sous 9 MPa d' H_2 pour de forts niveaux de ΔK . Afin d'analyser plus quantitativement l'effet de la pression d'hydrogène, on introduit un paramètre appelé facteur d'accélération, qui représente le rapport entre la vitesse de propagation dans l'hydrogène et la vitesse dans l'air, au même ΔK et à la même fréquence. La figure 5.11 montre son évolution en fonction de la pression d'hydrogène, à 20 Hz pour trois niveaux de ΔK : 10, 15 et 20 MPa $m^{1/2}$.

On observe que les pentes des courbes pour chaque niveau de ΔK sont proches de 1, et non de 1/2 comme on aurait pu s'y attendre (Macadre et al [156] ont trouvé une pente de 1/2). D'après la loi de Sieverts, si les pentes étaient proches de 1/2, l'augmentation de la vitesse de propagation serait principalement contrôlée par la pénétration de l'hydrogène à la surface. En effet, la loi de Sieverts stipule que la concentration surfacique est proportionnelle à la racine carrée de la pression du gaz. Dans le cas de l'étude sur Hycomat, l'augmentation de vitesse ne semble donc pas directement liée à la concentration en surface. Par ailleurs, la loi de Sieverts est fondée sur des hypothèses d'équilibre ; or on ne peut pas savoir si l'équilibre est atteint à la pointe d'une fissure déformée cycliquement, particulièrement à haute fréquence. On peut donc simplement conclure que le facteur d'accélération est proportionnel à la pression d'hydrogène pour la fréquence étudiée, et que l'effet de l'hydrogène sur la vitesse n'est pas directement lié à la concentration en surface, ce qui suggère l'existence d'autres étapes à prendre en compte.

D'après l'isotherme de Langmuir-McLean, la pression d'hydrogène a une influence sur le taux de recouvrement et l'adsorption des molécules sur les surfaces solides. Cependant, les résultats présentés ici montrent que le fait de diminuer la fréquence permet en partie de contrebalancer les

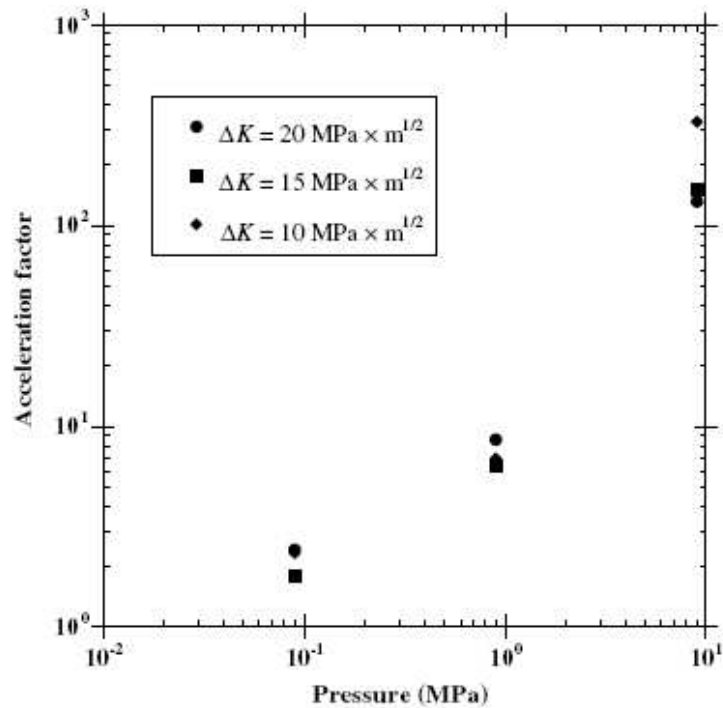


FIGURE 5.11 – Evolution du facteur d'accélération à 20 Hz en fonction de la pression d'hydrogène pour trois valeurs de ΔK

effets d'une diminution de la pression d'hydrogène, pour obtenir une vitesse de propagation du même ordre. Il faut donc étudier plus précisément le transport de l'hydrogène dans la « process zone ». Le paragraphe suivant aborde cette question.

Transport de l'hydrogène et fréquence de chargement

Indépendamment du mécanisme de ruine (HELP, HEDE, AIDE), l'augmentation de la vitesse de propagation due à l'hydrogène doit être étudiée du point de vue de la cinétique d'enrichissement en hydrogène en pointe de fissure. On considère souvent que l'enrichissement en hydrogène à la pointe de fissure est contrôlé par le phénomène de diffusion. La diffusion de l'hydrogène n'est pas uniquement contrôlée par le gradient de concentration, mais également par le gradient de pression hydrostatique dans le matériau. En effet, le potentiel chimique du système hydrogène-métal est plus faible aux endroits où la pression hydrostatique est plus élevée [40].

Comme présenté précédemment, la diminution de la fréquence de l'essai à 0,9 MPa entraîne l'augmentation des vitesses de propagation. Tout d'abord, il faut noter que les étapes d'adsorption des molécules d'hydrogène à la surface de la pointe de fissure et de dissociation en atomes

d'hydrogène ne doivent donc pas être considérées comme limitantes [4, 43]. Il faut néanmoins faire attention à la pureté du gaz dans la chambre d'essais. En effet, Nelson [157] a montré que l'ajout de petites quantités d'impuretés comme la vapeur d'eau et le monoxyde de carbone CO peut partiellement inhiber l'effet fragilisant de l'hydrogène.

Il est important de considérer le transport de l'hydrogène atomique dans la zone plastifiée cyclique comme une étape cinétiquement limitante. Si la fréquence et la vitesse de propagation de fissure sont faibles, l'hydrogène a le temps nécessaire pour diffuser dans la « process zone » en pointe de fissure et pour se concentrer dans les zones où la pression hydrostatique est élevée, favorisant potentiellement le glissement ou la décohésion [4]. En comparaison, comme le mentionnent Fassina et al [158], lorsque la vitesse de propagation de la fissure est grande, l'hydrogène n'a pas le temps nécessaire pour diffuser dans la « process zone » et s'accumuler à certains endroits et ainsi « fragiliser » le matériau. En effet, la fissure avance si vite que la diffusion réticulaire des atomes d'hydrogène n'a pas le temps de se faire. En conséquence, l'influence de l'hydrogène sur la propagation des fissures devrait être moins néfaste.

Les observations sur la propagation de fissure pour des valeurs élevées de ΔK (entre 8 et 20 MPa $m^{1/2}$) dans l'hydrogène à 9 MPa contredisent cette affirmation. En effet, l'influence néfaste de l'hydrogène ne diminue pas, malgré des vitesses et une fréquence de chargement élevées. L'exposant de Paris de la courbe da/dN reste quasiment constant dans ce domaine de ΔK . Si le phénomène limitant était la diffusion, l'effet de l'hydrogène devrait s'atténuer au fur et à mesure que la vitesse de propagation augmente. Ce n'est pas le cas ; cela suggère qu'un autre mécanisme de transport de l'hydrogène est peut-être en compétition avec la diffusion interstitielle, et que le mécanisme prépondérant dépend du niveau de ΔK .

L'influence de l'exposition, c'est-à-dire du produit de la pression d'hydrogène et du temps de chargement, doit également être étudiée. Les données de la figure 5.8 indiquent que l'augmentation de vitesse due à l'hydrogène n'est pas reliée à l'exposition. En effet, une exposition de 4,5 MPa.s, correspondant à une fréquence de 0,2 Hz à 0,9 MPa entraîne une augmentation de vitesse moins marquée qu'une exposition de 0,45 MPa.s obtenue à 20 Hz et 9 MPa d' H_2 . Par conséquent, l'augmentation de la vitesse observée est probablement due à l'interaction plus complexe entre l'exposition à l'hydrogène gazeux, la déformation en pointe de fissure et les processus d'endommagement. Il serait intéressant de compléter l'étude expérimentale par des essais supplémentaires à basse fréquence et à différentes pressions d'hydrogène, en particulier pour voir si on atteint une saturation au niveau de la vitesse de propagation lorsque l'on abaisse la fréquence à une pression donnée et/ou on augmente la pression à une fréquence donnée.

Comme mentionné précédemment, les vitesses de propagation relevées sous 9 MPa d'hydrogène à 20 Hz sont très rapides pour des niveaux de $\Delta K > 7$ MPa $m^{1/2}$ (cf. figure 5.5). Dans ce domaine, la fissure avance à une vitesse telle que la diffusion de l'hydrogène par les sites

interstitiels n'a certainement pas le temps de se faire. En effet, on peut estimer la distance de pénétration par diffusion interstitielle des atomes d'hydrogène à partir de la pointe de fissure pendant la phase de montée en charge du cycle de fatigue par la formule suivante [43] :

$$X_D = 4\sqrt{\frac{D_L}{2f}} \quad (5.2)$$

où D_L est le coefficient de diffusion de l'hydrogène à température ambiante et f est la fréquence. En supposant que $D_L = 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ [25, 28], on trouve que $X_D = 0,63 \text{ }\mu\text{m}$. Cette distance est au moins 10 fois plus courte que l'avancée de fissure par cycle ($da/dN > 10^{-6} \text{ m/cycle}$ pour $\Delta K > 7 \text{ MPa m}^{1/2}$). Cela suggère qu'il existe bien un autre mécanisme concurrent au phénomène de diffusion interstitielle. Il pourrait s'agir du transport de l'hydrogène par les dislocations mobiles.

A l'aide de simulations éléments finis avec un modèle élasto-plastique de diffusion couplée de l'hydrogène sur des barreaux cylindriques sollicités en traction statique, Krom et al [159] sont arrivés à la conclusion que, pour des vitesses de déformation élevées, les sites de piégeage de l'hydrogène se remplissent au détriment des sites interstitiels, tandis que des vitesses de déformation faibles favorisent le remplissage des sites interstitiels de la matrice métallique. Par conséquent, si l'on fait l'hypothèse que les atomes d'hydrogène profondément piégés ne jouent aucun rôle dans le processus de fragilisation, le comportement devrait être moins ductile à faible vitesse de déformation, ce qui est cohérent avec les observations expérimentales. Ces auteurs ont montré que cet effet de vitesse de déformation sur le remplissage des sites interstitiels est aussi valable pour une fissure émoussée en plasticité confinée [14]. Par des observations expérimentales et des calculs de diffusion, Moro et al [2] sont également arrivés à la conclusion que l'hydrogène piégé profondément ne peut pas être la cause de la fragilisation observée sous haute pression (30 MPa) dans un acier X80, particulièrement dans la phase de propagation de fissure. Ces auteurs ont conclu que la fragilisation observée à cette pression était vraisemblablement due à l'hydrogène adsorbé ou diffusible proche de la surface, ce qui correspond dans l'idée au postulat de la théorie AIDE.

En utilisant une approche similaire, Kotake et al [160] se sont intéressés plus en détail à la question de l'enrichissement en hydrogène au niveau de la pointe de fissure sous chargement cyclique. Leurs simulations ont montré que la concentration d'hydrogène maximale dans les sites interstitiels ainsi que la position de ce maximum dépendent du temps de chargement, c'est-à-dire de la fréquence, ainsi que du nombre de cycles. Ce phénomène peut être expliqué par le fait que l'équilibre entre le terme de diffusion dû au gradient de concentration et le terme de gradient de pression hydrostatique évolue rapidement. Ces conclusions sont qualitativement en accord avec les résultats de la campagne d'essais sur Hycomat. En revanche, l'article de Kotake et al stipule

que l'influence de la fréquence sur la concentration maximale d'hydrogène à concentration de surface constante n'est pas très marquée. Cela suggère donc que la sévérité de l'effet délétère de l'hydrogène dépend fortement de cette concentration maximale.

Pour finir, les aspects thermodynamiques (à l'instar des travaux de Wang [161], en particulier concernant les cas limites de décohésion le long d'une interface à concentration de soluté ségrégué constante ou à potentiel chimique constant) doivent être étudiés pour mieux comprendre les effets transitoires en pointe de fissure.

Mécanismes d'endommagement

L'examen des surfaces de rupture montre des changements de mode de rupture selon les conditions expérimentales comme les niveaux de pression et de ΔK et la fréquence du chargement. La présence de facettes de décohésion intergranulaire et de facettes de quasi-clivage sans réelle plastification suggère que le mécanisme HEDE entre en jeu. En effet, ce mécanisme est fondé sur l'hypothèse que l'hydrogène diminue la barrière énergétique à franchir pour voir apparaître de la décohésion le long des joints de grain ou des plans de clivage. Le mode de rupture intergranulaire à basse fréquence peut être le résultat de la ségrégation de l'hydrogène au niveau des joints de grain. En effet, les joints de grain sont des pièges profonds des atomes d'hydrogène [49], et la ségrégation intergranulaire de l'hydrogène diminue l'énergie de cohésion des joints de grain, ce qui favorise la formation de facettes intergranulaires. La rupture intergranulaire ne peut avoir lieu que si une quantité suffisante d'hydrogène a été transportée de l'environnement aux joints de grain en tête de fissure [162], ce qui pourrait expliquer les effets de fréquence.

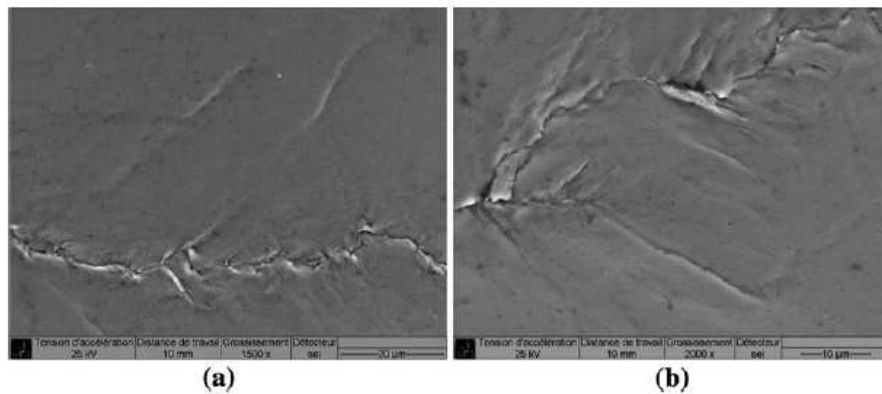


FIGURE 5.12 – Exemples de déformation plastique importante localisée le long du trajet de fissure : (a) $\Delta K = 14 \text{ MPa } m^{1/2}$ et (b) $\Delta K = 18 \text{ MPa } m^{1/2}$. La pression est 0,9 MPa, la fréquence 20 Hz et la fissure se propage de gauche à droite

D'autre part, la présence de déformation plastique considérable localisée pourrait être due au mécanisme HELP. Les micrographies de la figure 5.12 révèlent que la déformation plastique le long du trajet de fissure sous 0,9 MPa d' H_2 est importante et très localisée. Elle devrait l'être encore plus sous 9 MPa d'hydrogène. Cette observation suggère que le mécanisme HELP est actif, mais qu'il ne peut être seul responsable des différents phénomènes que l'on observe. Par ailleurs, on a montré que la diminution de la fréquence de 20 à 0,2 Hz favorise la décohésion intergranulaire aux dépens de la rupture intragranulaire, ce qui nous amène à la conclusion que les mécanismes HEDE et HELP semblent être en compétition, le mécanisme dominant dépendant de paramètres comme la fréquence, la pression et le niveau de ΔK .

Pour un niveau de ΔK et une fréquence élevés (ici sous 0,9 MPa d' H_2), la déformation plastique est importante et la fissure se propage rapidement ; le mécanisme HELP serait prédominant, et le transport de l'hydrogène se ferait majoritairement par les dislocations mobiles. En revanche, pour des ΔK et une fréquence faibles, les fissures avancent relativement lentement, et l'hydrogène dispose donc de plus de temps pour diffuser vers le cœur du matériau ou les joints de grain. Dans ce cas, le processus de diffusion interstitielle domine, ce qui favorise la séparation des plans atomiques (décohésion) plutôt que le glissement. D'après Lynch [70], il arrive souvent qu'on ait une combinaison de plusieurs mécanismes, et que le mécanisme prépondérant dépende de la résistance mécanique du matériau, du facteur d'intensité de contraintes, etc., qui ont un impact sur le trajet de fissure et sa morphologie.

5.3 Bilan

L'analyse des résultats de la campagne expérimentale menée sur Hycomat a montré que le comportement des fissures de fatigue d'un acier inoxydable martensitique 15-5PH dans l'hydrogène gazeux dépend de la pression du gaz (entre 0,09 et 9 MPa), de la fréquence de sollicitation et du niveau de ΔK . Les vitesses de propagation de fissures sont globalement plus élevées dans l'hydrogène que dans l'air, et sont très rapides à haute pression d' H_2 (9 MPa), avec une augmentation brutale aux alentours de $\Delta K = 6 \text{ MPa } m^{1/2}$. De plus, une faible fréquence de chargement à pression d' H_2 modérée permet d'augmenter les vitesses de propagation et de contrebalancer l'effet d'une faible pression de gaz.

Ces effets ne peuvent être ni expliqués, ni prédits, si l'on suppose uniquement que l'augmentation de vitesse est contrôlée par le paramètre d'exposition. De plus, une faible pression et/ou une fréquence faible favorisent la décohésion intergranulaire, tandis que la propagation à haute pression/fréquence est majoritairement transgranulaire. Ces observations montrent que les liens entre l'exposition, le mode de rupture et l'augmentation de vitesse observée sont extrêmement complexes. Les observations tendent à indiquer que les mécanismes HEDE, HELP et/ou

AIDE opèrent simultanément, et que le mécanisme dominant dépendrait du niveau de ΔK et des conditions d'exposition. Ainsi, sous haute pression d'hydrogène, à fort niveau de ΔK et à haute fréquence, la fissure de fatigue se propage rapidement et ce serait le transport des atomes d'hydrogène par les dislocations mobiles dominerait, favorisant ainsi la rupture par le mécanisme HELP. A faible niveau de ΔK et/ou faible fréquence cyclique, les fissures se propagent relativement lentement, et la diffusion interstitielle pourrait alors promouvoir la rupture HEDE. Malgré tout, on ne peut totalement exclure l'existence d'un effet des atomes d'hydrogène adsorbés sur les premières couches atomiques, en particulier à haute pression.

Ces résultats préliminaires ont besoin d'être étoffés, notamment par l'étude de l'influence de paramètres comme le rapport de charge, l'histoire du chargement, et la fermeture de fissure, ainsi que par la détermination du comportement en fatigue en environnement inerte.

L'un des objectifs du modèle développé dans le cadre de ce travail de thèse est de disposer d'un outil numérique pour étudier le rôle des différents mécanismes de ruine (HEDE, HELP, AIDE) et de transport de l'hydrogène (diffusion interstitielle, transport par les dislocations mobiles) dans la propagation des fissures de fatigue. Le modèle va permettre de mieux comprendre les effets de fréquence et de pression observés expérimentalement. L'utilisation d'un modèle de zone cohésive influencé par la présence d'hydrogène permet de représenter le modèle HEDE. De plus, l'utilisation d'une équation de diffusion interstitielle de l'hydrogène, influencée par la contrainte hydrostatique, va permettre de comprendre l'importance des différents mécanismes de transport de l'hydrogène dans le matériau. Enfin, l'implémentation de l'équilibre entre l'hydrogène diffusible et l'hydrogène piégé va permettre de comprendre le rôle joué par chacune de ces populations. La confrontation du modèle avec les résultats expérimentaux va permettre de conclure si les outils mis en place sont suffisants pour expliquer les phénomènes observés.

Chapitre 6

Etude de la diffusion couplée de l'hydrogène

 OUR PERMETTRE UNE PREMIÈRE VALIDATION, le modèle présenté dans la partie II est testé sous chargement statique, afin de valider l'implémentation de la diffusion couplée de l'hydrogène. Le paragraphe 6 présente les résultats d'une simulation de diffusion d'hydrogène sous chargement statique sur éprouvette CT, dans des conditions proches de celles de Krom et al [14] (cf. section 3.2). Les profils de concentration d'hydrogène diffusible et piégé seront comparées avec les simulations de Krom et al. L'objectif de cette première série de simulations est de valider l'implémentation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène dans le cœur du matériau, sans propagation de fissure.

6.1 Mise en données

Les paramètres matériau sont identiques à ceux proposés par Krom et al pour le fer, dont le module d'Young est $E = 207$ GPa, le coefficient de Poisson $\nu = 0,3$ et la limite d'élasticité $\sigma_y = 250$ MPa. Le comportement du matériau est élastoplastique, et la courbe de traction est donnée par la loi puissance suivante :

$$\epsilon = \begin{cases} \frac{\sigma}{E} & \text{si } \sigma \leq \sigma_y \\ \frac{\sigma_y}{E} \left(\frac{\sigma}{\sigma_y} \right)^5 & \text{si } \sigma > \sigma_y, \end{cases} \quad (6.1)$$

où ϵ et σ représentent respectivement la déformation et la contrainte dans l'axe de traction. Concernant la diffusion de l'hydrogène, le coefficient de diffusion de l'hydrogène dans le fer à la température ambiante (300 K) est $D_L = 1,27 \times 10^{-8}$ m²/s [13], et le volume partiel molaire de l'hydrogène vaut 2×10^{-6} m³ pour le fer α à 293 K [30]. L'énergie de piégeage ΔW_B , qui

permet de déterminer la constante d'équilibre de la théorie d'Oriani K_T (cf. équation 1.4, partie I), a été estimée à environ -60 kJ/mol par Kumnick et Johnson [51], qui ont effectué des tests de perméation sur du fer chargé par l'hydrogène gazeux. Ces auteurs ont observé que l'énergie de piégeage était indépendante de la température et du niveau de déformation plastique. L'utilisation d'une unique énergie de piégeage suppose qu'il n'y a qu'un seul type de piège au sein du matériau ; il s'agit ici du piégeage de l'hydrogène dans les dislocations. La densité de pièges N_T est déterminée à partir de la déformation plastique équivalente ϵ_p (relation 1.3, partie I).

Les calculs ont été faits sur le modèle Abaqus d'une demi-éprouvette Compact Tension, présenté dans la section 4.3 de la partie II, qui diffère de celui de Krom et al [14], qui ont utilisé l'approche de la couche limite pour ne représenter qu'une zone demi-circulaire autour de la pointe de fissure émoussée. Les géométries des modèles étant différentes, les contraintes et les déformations en pointe de fissure ne sont pas comparables. Toutefois, la comparaison des résultats de Krom et al avec nos simulations va permettre de valider qualitativement l'implémentation de la diffusion couplée de l'hydrogène. Nous allons imposer des conditions aux limites représentatives des conditions de l'étude expérimentale sur Hycomat (cf. chapitre 5).

Dans notre étude, la concentration d'hydrogène diffusible C_L est initialement nulle en chaque nœud du modèle, ce qui correspond à l'absence de préchargement en hydrogène de l'éprouvette CT. Au cours des calculs, une concentration constante de $2,08 \times 10^{21}$ at/ m^3 est imposée sur quelques nœuds en fond de fissure, ce qui correspond à la solubilité de l'hydrogène calculée par la loi de Sieverts (cf. relation 1.12, partie I) pour une pression d'hydrogène de 1 atm à la température de 300 K. Cette condition à la limite représente le chargement en hydrogène de l'éprouvette CT, placée dans une atmosphère d'hydrogène gazeux à 1 atm à la température ambiante de 300 K. On fait l'hypothèse que l'hydrogène ne pénètre dans le matériau qu'au niveau du fond de fissure initial (cf. section 4.3.3). Ces conditions aux limites sont différentes de celles de Krom et al par la valeur de la concentration initialement imposée en tout point de l'éprouvette. En effet, ces auteurs ont imposé initialement une concentration de $2,08 \times 10^{21}$ atomes/ m^3 en tout point de leur modèle, ce qui correspond au préchargement de l'éprouvette jusqu'à saturation dans de l'hydrogène à 300 K et 1 atm.

Les autres conditions aux limites sont celles présentées dans la section 4.3 de la partie II. En accord avec les simulations de Krom et al [14], le chargement mécanique imposé à l'éprouvette CT consiste en une étape de montée en charge d'une durée de 130 s, permettant d'atteindre $K_I = 89,2 \text{ MPa}\sqrt{m}$ en pointe de fissure, suivie d'une étape de diffusion de l'hydrogène, où la charge imposée à l'éprouvette est maintenue. Le temps de chargement total est de 1419 h.

Etant donné qu'on ne s'intéresse pas à la propagation de la fissure, les éléments cohésifs sont supposés ne pas s'endommager. Dans la subroutine UEL, on impose donc à chaque incrément

de temps $\dot{D}_c = \dot{D}_m = 0$.

6.2 Etude des profils de concentration d'hydrogène

Les profils de plusieurs quantités (pression hydrostatique, déformation plastique équivalente, concentrations d'hydrogène diffusible et piégé) sont étudiés à la fin de la montée en charge ($t = 130$ s) et à la fin de l'étape de diffusion sous chargement statique ($t = 1419$ h).

La figure 6.1 présente les profils de contrainte hydrostatique σ_h et de concentration d'hydrogène réticulaire C_L (normalisée par la concentration imposée en fond de fissure C_{L0}) le long de la ligne de symétrie du modèle, à la fin de la montée en charge ($t = 130$ s) et à la fin de l'étape de diffusion sous chargement statique ($t = 1419$ h).

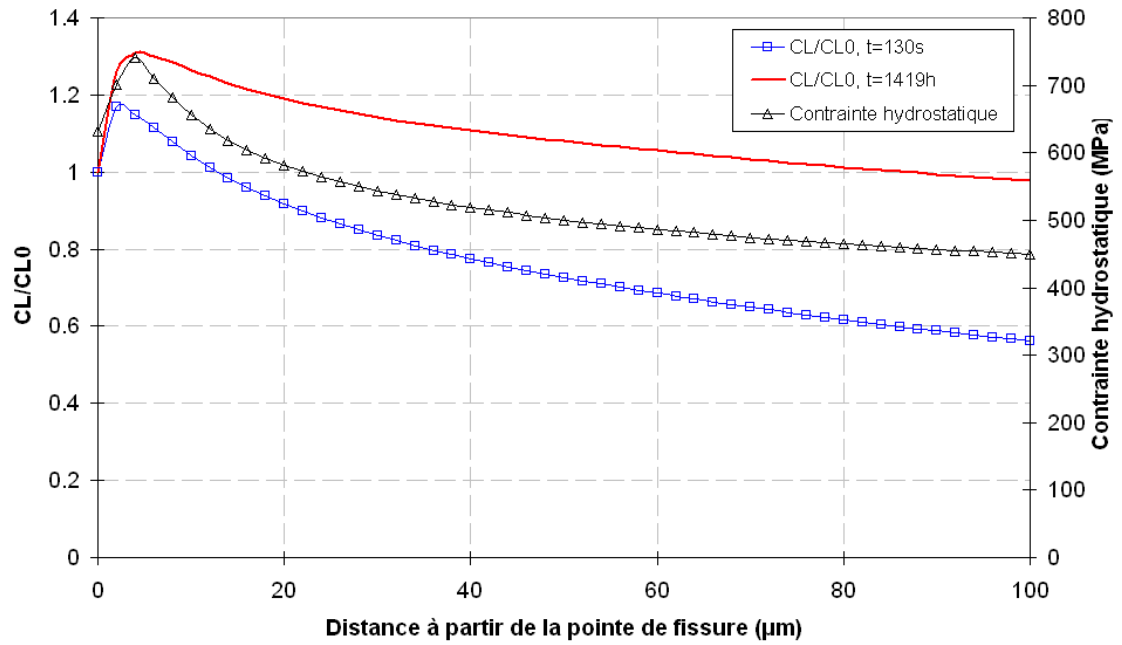


FIGURE 6.1 – Evolution de la concentration d'hydrogène diffusible C_L normalisée par la concentration imposée en fond de fissure C_{L0} et de la contrainte hydrostatique σ_h en fonction de la distance le long de la ligne de symétrie du modèle à partir de la pointe de la fissure, à $t = 130$ s et $t = 1419$ h.

En pointe de fissure, la concentration C_L reste égale à la concentration initiale C_{L0} , conformément à la condition aux limites imposée. On observe également que la concentration d'hydrogène diffusible est plus élevée en tout point du trajet de fissure après un long temps de diffusion

($t = 1419$ h) qu'à la fin de la montée en charge ($t = 130$ s), ce qui est dû au temps de diffusion laissé à l'hydrogène. Par ailleurs, la concentration d'hydrogène réticulaire diminue plus vite en s'éloignant de la pointe de la fissure à $t = 130$ s qu'à $t = 1419$ h. A $t = 130$ s et 1419 h, on observe un pic de concentration d'hydrogène réticulaire situé à environ $2 \mu\text{m}$ (à $t = 130$ s) et $6 \mu\text{m}$ (à $t = 1419$ h) de la pointe de la fissure. Ce déplacement du pic au cours du temps est également observé sur les courbes de Krom et al [14], bien que plus léger. Plus le temps de diffusion est grand, plus la valeur maximale de la concentration réticulaire est élevée. Après 1419 h, la concentration d'hydrogène diffusible est environ 1,3 fois plus élevée que la concentration C_{L0} imposée en fond de fissure ; la simulation de Krom et al indique une valeur d'environ 1,95 fois la concentration de surface C_{L0} . En raison de la différence de géométrie entre les modèles éléments finis, on ne peut pas comparer précisément ces valeurs ; néanmoins, on remarque qu'elles sont du même ordre de grandeur. Sur cette même figure, le profil de pression hydrostatique présente également un pic, situé à environ $6 \mu\text{m}$ de la pointe de la fissure, c'est-à-dire à la même distance que le maximum de concentration d'hydrogène diffusible à la fin du calcul. Cette similarité des profils reflète le fait que la diffusion de l'hydrogène en position interstitielle est guidée par le gradient de contrainte hydrostatique, en accord avec le terme supplémentaire apparaissant dans l'expression du flux d'hydrogène selon Krom et al [14] (cf. relation 1.1, partie I).

De la même manière, la figure 6.2 dresse le parallèle entre les profils de déformation plastique équivalente ϵ_p et de concentration d'hydrogène piégé C_T (normalisée par C_{L0}) le long de la ligne de symétrie du modèle, à la fin de la montée en charge ($t = 130$ s) et à la fin de l'étape de diffusion sous chargement statique ($t = 1419$ h). A première vue, on remarque que, plus on s'approche de la pointe de la fissure, plus la déformation plastique équivalente ϵ_p et la concentration d'hydrogène piégé C_T sont élevées. En pointe de fissure, la déformation plastique équivalente atteint 1800 % ; cette valeur très élevée est due à la très forte concentration de contraintes en pointe de fissure dans l'éprouvette CT, et à la loi de comportement élastoplastique choisie. De plus, les éléments cohésifs ne s'endommagent pas. La forme du profil de concentration d'hydrogène piégé est identique à celle obtenue par Krom et al [14]. Que ce soit à la fin de la montée en charge ou après 1419 h, la concentration d'hydrogène piégé atteint son maximum dans une zone d'une dizaine de microns située en pointe de fissure. Il faut remarquer que ce maximum correspond en réalité à la saturation des pièges à hydrogène. Ce phénomène est dû à la forme de l'expression de la densité de pièges N_T en fonction de la déformation plastique équivalente ϵ_p (cf. relation 1.3, partie I). En effet, cette relation indique que la densité de pièges N_T sature à partir d'une déformation plastique équivalente d'environ 80% ; cela se vérifie sur les profils de concentration d'hydrogène piégé de la figure 6.2. Par ailleurs, on peut remarquer que le profil de concentration d'hydrogène piégé évolue au cours de l'étape de diffusion de l'hydrogène sous chargement statique. Cette évolution est due à l'évolution de la concentration d'hydrogène diffusible. En effet, d'après la

théorie d'Oriani, l'hydrogène piégé est supposé être en équilibre avec l'hydrogène en position interstitielle. Modifier la concentration d'hydrogène diffusible revient à modifier la concentration d'hydrogène piégé.

En comparant les profils de concentration des figures 6.1 et 6.2, on voit que la concentration d'hydrogène piégé est nettement plus importante que la concentration d'hydrogène diffusible dans toute la zone le long de la ligne de symétrie du modèle étudiée. En particulier, la concentration d'hydrogène piégé est environ 85 fois plus élevée que la concentration d'hydrogène interstitiel en pointe de fissure, ce qui résulte de l'équilibre entre les concentrations C_L et C_T (théorie d'Oriani). Ces remarques sont identiques à celles émises par Sofronis et McMeeking [13] et Krom et al [14], tant en ce qui concerne la forme du profil de concentration d'hydrogène piégé que sa valeur en pointe de fissure.

Pour conclure, l'étude des profils de concentration d'hydrogène et de certaines quantités mécaniques (contrainte hydrostatique, déformation plastique équivalente) et la comparaison avec les résultats et les conclusions de Krom et al [14] a permis d'obtenir une première validation qualitative de l'implémentation dans Abaqus de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène.

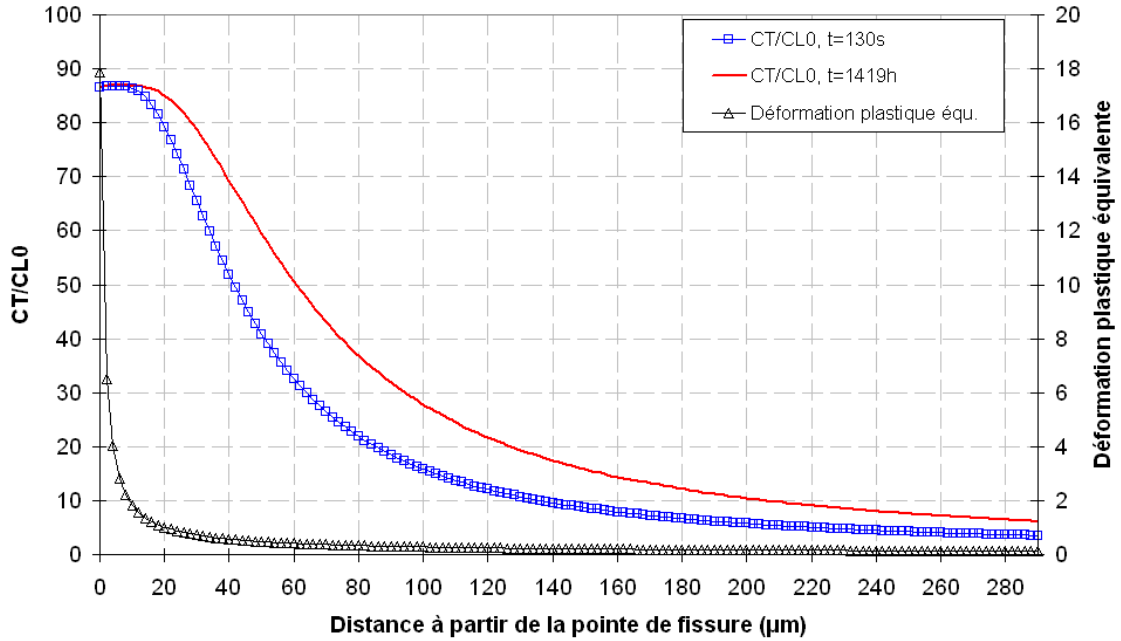


FIGURE 6.2 – Evolution de la concentration d'hydrogène piégé C_T normalisée par la concentration imposée en fond de fissure C_{L0} et de la déformation plastique équivalente ϵ_p en fonction de la distance le long de la ligne de symétrie du modèle à partir de la pointe de la fissure

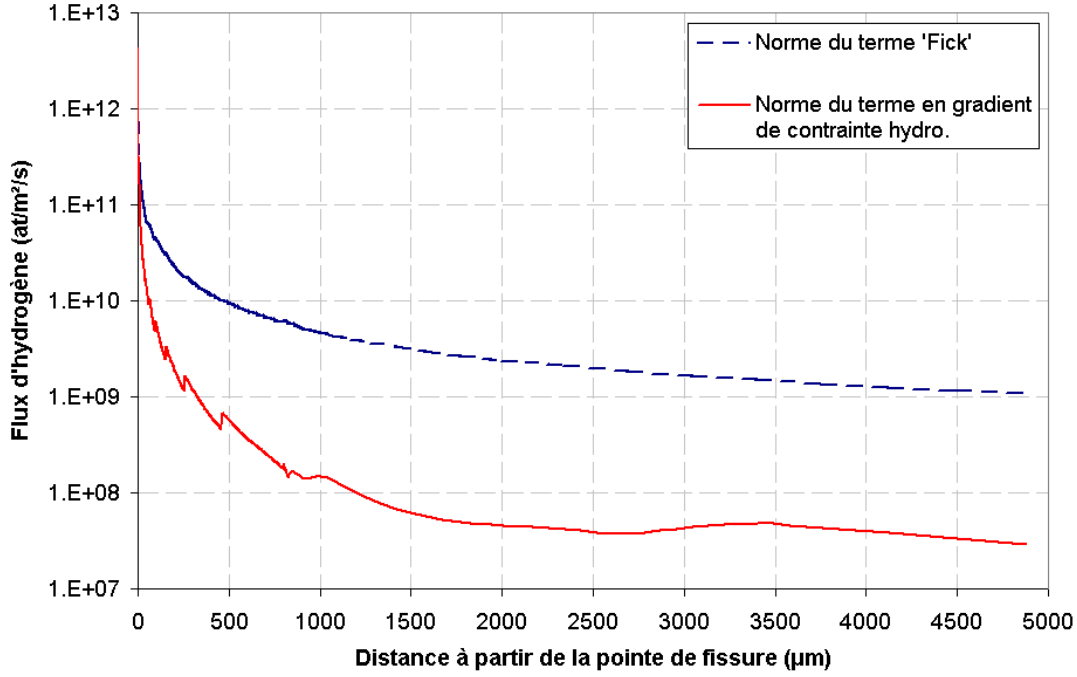


FIGURE 6.3 – Evolution de la norme du terme (1) (terme dit « Fick ») et de la norme du terme (2) (terme dit « en gradient de pression hydrostatique ») en fonction de la distance le long de la ligne de symétrie du modèle à partir de la pointe de la fissure (sur quelques mm), à $t = 1419$ h.

6.3 Etude de la contribution des différents termes de l'équation de diffusion

Dans ce paragraphe, nous allons étudier l'importance des deux termes de l'expression du flux d'hydrogène $\vec{J}_m$. Pour rappel, le flux d'hydrogène s'exprime par la relation :

$$\vec{J}_m = \underbrace{-D_L \vec{\nabla} C_L}_{(1)} + \underbrace{\frac{D_L C_L \bar{V}_H}{RT} \vec{\nabla} \sigma_h}_{(2)}.$$

Le terme (1) représente l'influence du gradient de concentration d'hydrogène diffusible ; il s'agit du terme présent dans la loi de Fick. Le terme (2) représente l'influence du gradient de contrainte hydrostatique sur la diffusion de l'hydrogène.

L'étude de Scheider et al [24] et celle plus récente de Raykar et al [163], portant sur la modélisation de la propagation des fissures assistée par l'hydrogène à l'aide d'un modèle de zone cohésive, modélisent la diffusion de l'hydrogène par une loi de Fick, et ne prennent pas en compte

le terme (2). Pour la simulation présentée à la section 6.1, nous allons comparer les valeurs des termes (1) et (2), et évaluer leur contribution respective au flux d'hydrogène.

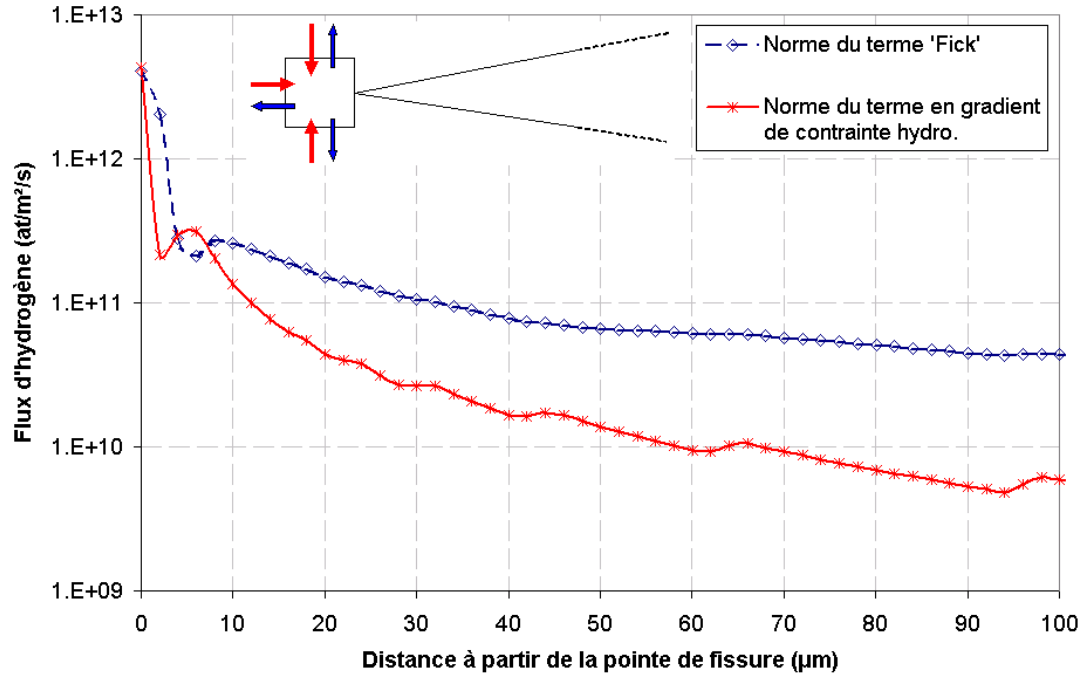


FIGURE 6.4 – Evolution de la norme du terme (1) (terme dit « Fick ») et de la norme du terme (2) (terme dit « en gradient de pression hydrostatique ») en fonction de la distance le long de la ligne de symétrie du modèle à partir de la pointe de la fissure (sur quelques micromètres), à $t = 1419$ h.

La figure 6.3 présente l'évolution des normes des deux termes de l'équation du flux d'hydrogène le long de la ligne de symétrie du modèle, sur une longueur d'environ 5 mm à partir de la pointe de la fissure, à $t = 1419$ h. On remarque que, lorsqu'on s'éloigne suffisamment de la pointe de la fissure (à partir d'environ $500 \mu\text{m}$), la contribution du terme en gradient de contrainte hydrostatique est inférieure de plus d'un ordre de grandeur au terme en gradient de concentration. Afin d'étudier plus en détail la zone en fond de fissure, la figure 6.3 présente l'évolution des normes des deux termes de l'équation du flux d'hydrogène le long de la ligne de symétrie du modèle, sur une longueur d'environ $35 \mu\text{m}$ à partir de la pointe de la fissure, à $t = 1419$ h. On remarque que la contribution du terme faisant intervenir le gradient de contrainte hydrostatique devient de plus en plus petit par rapport au terme en gradient de concentration d'hydrogène, au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la pointe de la fissure. En revanche, au niveau de la pointe de la fissure, le terme en gradient de contrainte hydrostatique est du même ordre de grandeur

que le terme en gradient de concentration d'hydrogène diffusible. Autour de 5-6 μm , le terme (2) est même supérieur au terme (1), ce qui correspond au pic de contrainte hydrostatique observé précédemment sur la figure 6.1. Ces éléments indiquent que la contribution du terme en gradient de contrainte hydrostatique est comparable à celle du terme en gradient de concentration d'hydrogène diffusible dans la zone d'intérêt très proche de la pointe de la fissure (10 μm environ).

Pour conclure, la simulation de diffusion présentée montre que le terme faisant intervenir le gradient de contrainte hydrostatique est du même ordre de grandeur que le terme issu de la loi de Fick dans la zone d'une dizaine de micromètres en fond de fissure. Par conséquent, l'hypothèse qui consiste à négliger l'influence du gradient de contrainte hydrostatique sur la diffusion de l'hydrogène, et qui est fréquemment admise dans la littérature, ne semble pas justifiée dès lors qu'il y a de forts gradients de contraintes, c'est-à-dire en fond de fissure. En particulier, si l'on souhaite étudier la propagation des fissures assistée par l'hydrogène, il semble pertinent de prendre en compte ce terme supplémentaire, dont l'influence au niveau de la pointe de fissure n'est pas négligeable.

Chapitre 7

Propagation de fissure assistée par l'hydrogène sous chargement monotone

L'ÉTUDE PRÉSENTÉE AU CHAPITRE PRÉCÉDENT a permis de valider qualitativement l'implémentation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène dans le cœur du matériau. L'étude que nous présentons maintenant s'appuie sur les travaux de Scheider et al [24], complétés récemment par Brocks et al [124]. Elle vise à évaluer la capacité du modèle construit à prédire la propagation des fissures sous chargement monotone dans l'hydrogène gazeux. Scheider et al [24] ont utilisé un modèle de zone cohésive muni d'une loi de traction-séparation influencée par l'hydrogène, et une loi de Fick pour décrire l'amorçage et la propagation des fissures dans une éprouvette CT sous chargement monotone sur des échantillons d'acier chargés cathodiquement en hydrogène. Ces auteurs ont réalisé des essais de fissuration sous chargement monotone d'éprouvettes d'un acier faiblement allié sous air, et chargées cathodiquement en hydrogène au cours des essais, pour différentes vitesses de déplacement de traverse.

7.1 Mise en données

Conformément à l'article de Scheider et al [24], le matériau simulé est un acier de construction, à haute résistance et faiblement allié, de dénomination européenne FeE 690T, dont la limite d'élasticité conventionnelle $\sigma_{y,0,2\%}$ est 695 MPa [164]. Son comportement plastique est représenté par un modèle de plasticité de Von Mises à écrouissage isotrope. La courbe de traction de cet acier est représentée sur la figure 7.1. La courbe en pointillés représente les données d'entrée du modèle Abaqus. On fait l'hypothèse que la loi de comportement élastoplastique du matériau est

indépendante de la concentration en hydrogène.

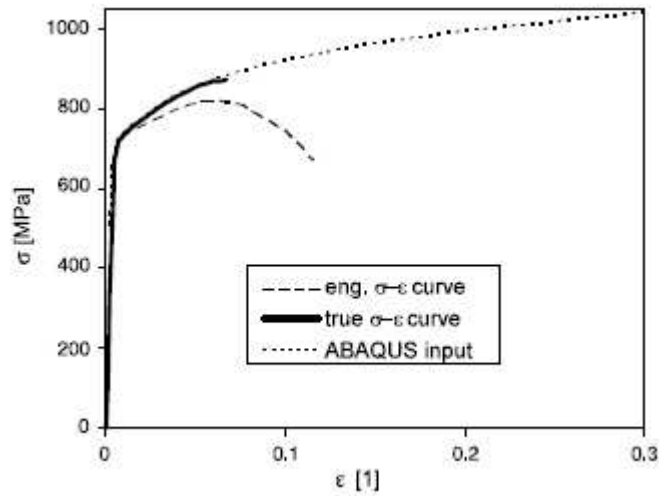


FIGURE 7.1 – Comportement en traction de l'acier FeE 690T [164]. Courbe noire : courbe contrainte vraie - déformation vraie. Courbe en « longs » pointillés : courbe contrainte nominale - déformation nominale. Courbe en pointillés : courbe de traction d'entrée du modèle Abaqus.

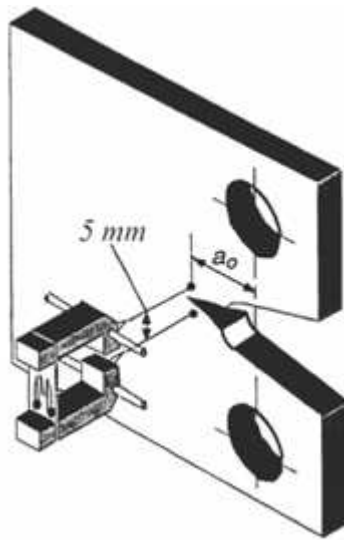


FIGURE 7.2 – Schéma de la configuration expérimentale pour la mesure du δ_5 sur une éprouvette Compact Tension [165]. La distance a_0 représente la longueur initiale de fissure.

Les auteurs [24] ont utilisé une loi de traction-séparation développée par Scheider [166], dont

les paramètres ont été identifiés à partir de la courbe R-CTOD obtenue sous air sur éprouvette CT, représentant l'évolution de δ_5 en fonction de l'avancée de la fissure Δa . La quantité δ_5 représente le déplacement de deux points situés à 2,5 mm de part et d'autre de la pointe de la fissure initiale dans l'éprouvette CT [167]. La figure 7.2 montre la configuration expérimentale permettant la mesure du δ_5 sur une éprouvette CT pré-entaillée.

La forme de la loi de traction-séparation développée dans notre travail étant différente, les paramètres utilisés pour nos simulations ne correspondent pas aux valeurs identifiées par Scheider et al. Les paramètres choisis sont les suivants :

$$\begin{aligned} k_n &= 10^7 \text{ MPa MPa} \\ m_m &= 450 \text{ J/m}^2 \\ C_m &= 50 \text{ J/m}^2 \\ n_m &= 1. \end{aligned} \tag{7.1}$$

Ces paramètres déterminent l'évolution de la contribution monotone D_m à la variable d'endommagement du modèle. Les paramètres de la contribution cyclique D_c sont tels que D_c n'évolue pas au cours du chargement (on s'intéresse à un chargement monotone). Les paramètres choisis entraînent une énergie de séparation de 500 J/m^2 , du même ordre de grandeur que celle utilisée par Olden et al [71] (210 J/m^2) et une ouverture critique (correspondant à la rupture de l'élément) de $0,8 \text{ } \mu\text{m}$. A l'instar de Bouvard et al [23], on choisit pour la rigidité initiale en traction k_n la valeur très élevée de 10^7 MPa , afin d'éviter d'introduire dans le modèle une souplesse artificielle trop importante. L'exposant n_m est fixé arbitrairement à 1. Les paramètres C_m et m_m , qui contrôlent l'énergie de séparation sous chargement monotone (cf. relation 3.11, partie II), sont choisis de manière à limiter la contrainte cohésive maximale à 1370 MPa , ce qui limite la déformation plastique dans la zone plastifiée en fond de fissure à environ 30 %. Pour représenter l'influence de l'hydrogène sur l'énergie de séparation (ce qui correspond au principe du mécanisme HEDE, présenté dans la section 1.5, partie I), le taux de recouvrement en hydrogène θ , calculé à partir de la concentration totale en hydrogène, influence certains paramètres de la TSL, comme présenté dans la section 3.1.2 de la partie II. En comparaison, Scheider et al [24], en s'inspirant également des travaux de Serebrinsky et al [17] et de Liang et Sofronis [168], ont supposé que les contraintes cohésives diminuent linéairement avec la concentration en hydrogène.

En ce qui concerne la diffusion de l'hydrogène dans le cœur du matériau, deux équations de diffusion ont été testées. Tout d'abord, à l'instar des travaux de Scheider et al [24], des simulations de propagation de fissure ont été réalisées avec une loi de Fick, sans piégeage de l'hydrogène, avec un coefficient de diffusion de l'hydrogène de $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, ce qui correspond à la valeur donnée par la littérature pour les aciers martensitiques [25, 28]. Par ailleurs, la valeur

utilisée par Scheider et al [24] est du même ordre de grandeur. Ensuite, des simulations ont été réalisées avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène (rappelée dans le chapitre 6), introduisant ainsi l'effet du gradient de contrainte hydrostatique et du piégeage.

Initialement, la concentration d'hydrogène est nulle dans tout le matériau (éprouvette non préchargée). Dès le début des simulations, on impose une concentration d'hydrogène constante de $2,08 \times 10^{22}$ at/ m^3 en fond de fissure, déterminée par la loi de Sieverts pour 100 bars d' H_2 à 300 K, sur quelques nœuds en fond de fissure (cf. section 4.3.3). Lorsqu'un élément cohésif est rompu, la diffusion de l'hydrogène est instantanée dans cet élément, permettant le déplacement de la condition aux limites avec l'avancée de la fissure.

Pour récapituler, la mise en données des simulations de propagation de fissures sous chargement monotone en présence d'hydrogène reprend certains éléments des travaux de Scheider et al [24], dont la loi de comportement élastoplastique, indépendante de la concentration en hydrogène. A l'instar de leurs travaux, la présence d'hydrogène entraîne la diminution des contraintes cohésives à ouverture critique fixée. On modélise ainsi le principe du mécanisme HEDE.

Une concentration constante en pointe de fissure représente la pénétration d'hydrogène en pointe de fissure d'une éprouvette CT en atmosphère d'hydrogène gazeux. Deux équations de diffusion sont testées : une loi de Fick sans piégeage (à l'instar de [24]), et l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène proposée par Krom et al [14].

En revanche, la loi de traction-séparation utilisée pour les simulations est celle développée dans la partie II. L'énergie de séparation est environ 60 fois plus faible que celle utilisée dans les simulations de Scheider et al [24]. Par ailleurs, les conditions de chargement en hydrogène sont différentes. Il est donc difficile d'effectuer une comparaison quantitative des résultats de Scheider et al avec nos simulations. En revanche, une comparaison qualitative va permettre de valider l'implémentation du modèle de zone cohésive avec une loi de traction-séparation influencée par l'hydrogène.

7.2 Simulation des courbes R-CTOD avec et sans H_2

A la manière de Scheider et al [24], on simule la propagation des fissures sous chargement monotone dans une éprouvette CT 40 en l'absence d' H_2 et dans de l'hydrogène gazeux à 100 bars, en faisant varier la vitesse de chargement sous hydrogène (0,1 $\mu m/h$, 10 $\mu m/h$ et 100 $\mu m/h$). Deux séries de simulations sont réalisées, avec une loi de Fick, et avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène. Les résultats (δ_5 en fonction de la longueur de fissure Δa) sont présentés sur la figure 7.3.

Sur la figure 7.3, on observe l'influence de la présence d'hydrogène en pointe de fissure

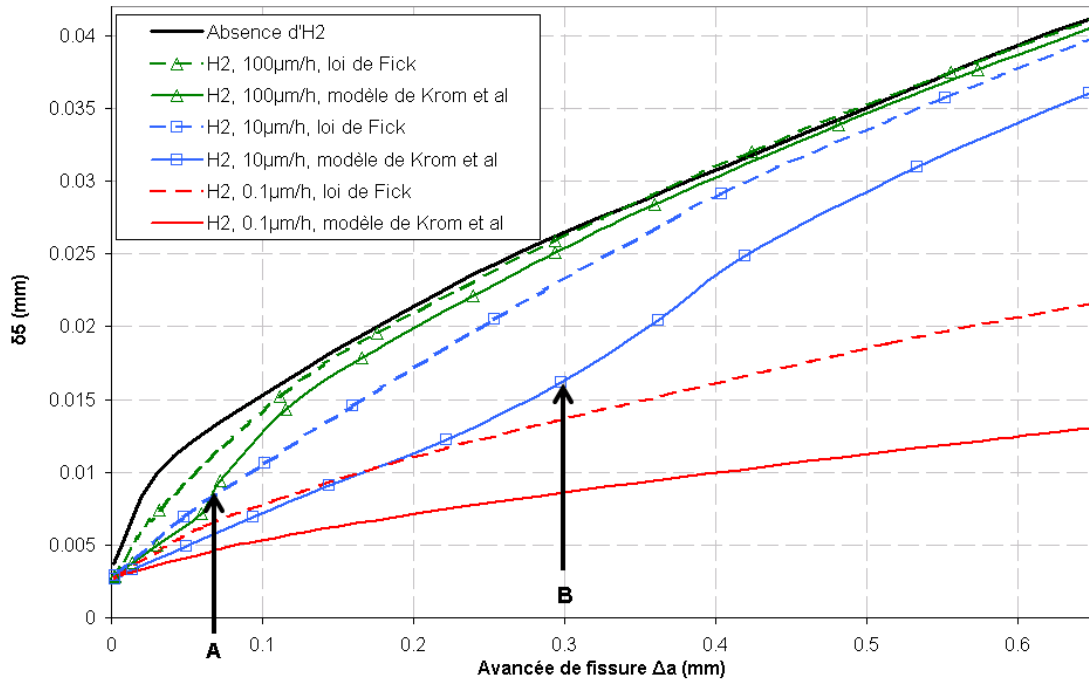


FIGURE 7.3 – Courbes R-CTOD simulées en l’absence d’hydrogène (courbe noire) et sous H_2 gazeux à 100 bars, pour différentes vitesses de chargement ($0,1 \mu\text{m/h}$, $10 \mu\text{m/h}$ et $100 \mu\text{m/h}$), en utilisant une loi de Fick (courbes en pointillés) et avec le modèle de diffusion couplée de Krom et al [14] (courbes continues). Le point A correspond à une longueur de fissure de $70 \mu\text{m}$ et le point B à une longueur de fissure de $300 \mu\text{m}$.

sur les courbes R-CTOD. Tout d’abord, on remarque que, pour une valeur de δ_5 donnée, la longueur de fissure est plus grande en présence d’ H_2 , ce qui est cohérent avec l’effet délétère de l’hydrogène sur la résistance à la fissuration des aciers. De plus, plus la vitesse de déplacement de la traverse est lente, plus cet effet est marqué, pour les simulations avec la loi de Fick comme pour les simulations avec l’équation de diffusion couplée. En effet, lorsque la vitesse de chargement mécanique diminue, l’hydrogène dispose de plus de temps pour diffuser. Ces observations sont cohérentes avec les remarques émises dans [24] avec une loi de Fick. Ces éléments indiquent que l’influence de l’hydrogène sur la TSL permet de représenter qualitativement l’influence néfaste de l’hydrogène sur la résistance à la fissuration.

Comparons maintenant les courbes R-CTOD obtenues dans l’hydrogène pour une même vitesse de chargement, avec une loi de Fick et avec le modèle de Krom et al [14]. On observe que l’utilisation de l’équation de diffusion couplée entraîne une plus grande longueur de fissure que pour la loi de Fick, à δ_5 donné, et ce pour les trois vitesses de chargement simulées. Plus

la vitesse de déplacement de la traverse est faible, plus cette différence est nette. Ainsi, pour la vitesse de $100 \mu\text{m/h}$, la différence entre les deux types de loi de diffusion est quasiment nulle à partir $0,4 \text{ mm}$ d'avancée de fissure. Un décalage entre les deux courbes est visible au début de la propagation de la fissure, puis la courbe pour le modèle couplé rejoint celle simulée avec la loi de Fick à partir d'environ $70 \mu\text{m}$. Le même phénomène est visible pour une vitesse 10 fois plus lente ($10 \mu\text{m/h}$). Initialement, la pente de la courbe pour le modèle couplé est plus faible, puis cette dernière augmente aux alentours de $0,3 \text{ mm}$ de longueur de fissure pour se rapprocher légèrement de la courbe R-CTOD pour la loi de Fick. Pour la vitesse la plus faible, la longueur de fissure n'est pas assez élevée pour voir si ce phénomène se produit également, mais on peut supposer qu'il se produit pour une longueur de fissure plus grande.

L'utilisation du modèle de diffusion couplée de l'hydrogène apporte deux éléments supplémentaires par rapport à la loi de Fick :

- l'influence du gradient de contrainte hydrostatique sur la diffusion de l'hydrogène, supposée interstitielle ;
- le piégeage de l'hydrogène au niveau des dislocations, les populations d'hydrogène diffusible et piégé étant supposées être en équilibre à chaque instant en tout point du matériau.

Nous allons tenter d'expliquer la contribution de chacun de ces éléments dans la différence notable entre les courbes en pointillés et les courbes continues de la figure 7.3.

7.3 Evolution des profils du taux de recouvrement en hydrogène

La figure 7.4 présente les profils de taux de recouvrement θ , simulés à l'instant de la rupture du premier élément cohésif, pour les deux types de loi de diffusion (modèle de Krom et al et loi de Fick), pour deux vitesses de chargement ($10 \mu\text{m/h}$ et $100 \mu\text{m/h}$). Pour les deux modèles de diffusion, ces courbes révèlent que la zone influencée par l'hydrogène est plus étendue pour la vitesse de $10 \mu\text{m/h}$ (environ $50 \mu\text{m}$) qu'à $100 \mu\text{m/h}$ (environ $150 \mu\text{m}$). L'hydrogène dispose en effet de plus de temps pour diffuser avant l'amorçage de la fissure lorsque la vitesse de chargement est plus lente. Par ailleurs, à vitesse de chargement donnée, le taux de recouvrement est plus élevé pour le modèle couplé que pour la loi de Fick sur la quasi-totalité de la zone affectée par l'hydrogène. Dans la zone à fort gradient de contraintes en fond de fissure, le terme en gradient de contrainte hydrostatique de l'équation de diffusion de l'hydrogène s'oppose au terme en gradient de concentration d'hydrogène diffusible, ce qui a pour effet d'augmenter la concentration d'hydrogène dans cette zone. On remarque également que le taux de recouvrement atteint un maximum local à environ $10 \mu\text{m}$ du fond de fissure pour la vitesse de $100 \mu\text{m/h}$ et situé à environ $15 \mu\text{m}$ de la pointe de la fissure pour la vitesse de $10 \mu\text{m/h}$. Ce maximum correspond au pic de contrainte hydrostatique au moment de la rupture du premier élément cohésif. La valeur

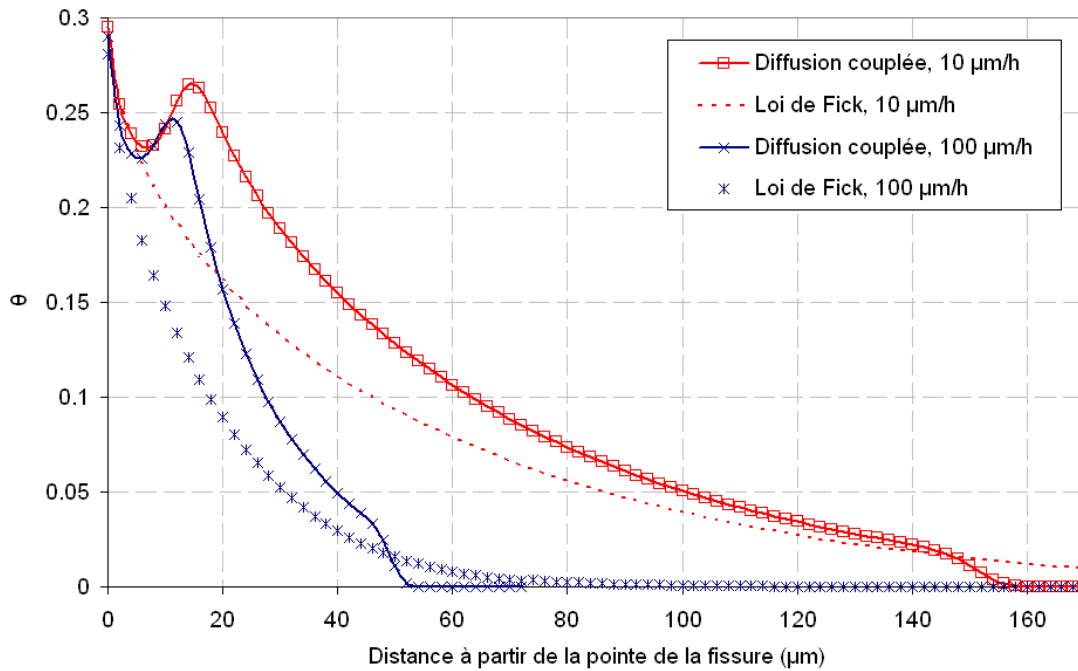


FIGURE 7.4 – Comparaison des profils du taux de recouvrement θ simulés pour les deux types de loi de diffusion (modèle de Krom et al et loi de Fick), pour deux vitesses de chargement ($10 \mu\text{m/h}$ et $100 \mu\text{m/h}$), à l’instant de la rupture du premier élément cohésif.

du taux de recouvrement au pic varie également selon la vitesse de chargement ; en effet, plus cette dernière est lente, plus l’hydrogène a le temps de diffuser vers les zones à forte contrainte hydrostatique. On remarque également que le taux de recouvrement est maximal en fond de fissure et est indépendant du modèle de diffusion et de la vitesse de chargement.

Pour conclure, l’analyse de la figure 7.4 montre que pour chacune des vitesses de chargement ($10 \mu\text{m/h}$ et $100 \mu\text{m/h}$), la zone affectée par l’hydrogène est quasiment de la même longueur pour la loi de Fick et l’équation de diffusion couplée de l’hydrogène ; en revanche, pour une vitesse donnée, la concentration totale en hydrogène est plus élevée dans cette zone lorsqu’on utilise le modèle de diffusion couplée, d’où une valeur de θ plus élevée. Par ailleurs, plus la vitesse de chargement est faible, plus la zone affectée par l’hydrogène est étendue, car l’hydrogène dispose de plus de temps pour diffuser par les sites interstitiels.

Nous allons maintenant étudier les profils de taux de recouvrement θ une fois la zone initiale affectée par l’hydrogène rompue (points A et B sur la figure 7.3) aux vitesses de 10 et 100 $\mu\text{m/h}$, et les comparer aux profils au moment de l’amorçage de la fissure. De plus, pour mieux comprendre le rôle des deux populations d’hydrogène (réticulaire et piégé), nous allons étudier

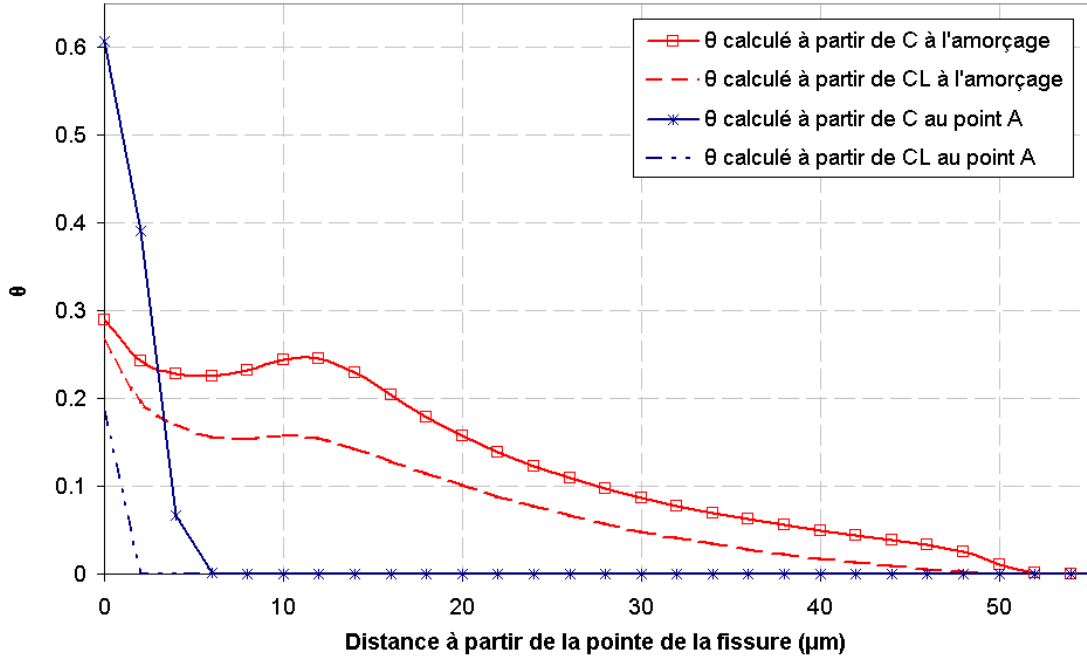


FIGURE 7.5 – Comparaison des profils du taux de recouvrement θ (calculé à partir de la concentration totale en hydrogène C et à partir de la concentration en hydrogène diffusible C_L) pour le modèle de diffusion couplée, pour la vitesse de $100 \mu\text{m/h}$, à l'instant de la rupture du premier élément cohésif et au point A (cf. figure 7.3).

le profil du taux de recouvrement θ calculé selon la relation 1.2 (partie I), uniquement à partir de la concentration d'hydrogène diffusible. En effet, Brocks et al [124] calculent le taux de recouvrement à partir de la concentration d'hydrogène interstitiel, tandis que Olden et al [71] le calculent à partir de la concentration totale $C = C_L + C_T$. Les figures 7.5 et 7.6 montrent ces différents profils pour les deux vitesses de chargement ($10 \mu\text{m/h}$ et $100 \mu\text{m/h}$).

Sur la figure 7.5, à l'amorçage de la fissuration, la comparaison des profils de θ calculés avec les concentrations d'hydrogène totale C et diffusible C_L montre que la « contribution » de l'hydrogène diffusible est majoritaire. Lorsque la fissure s'est propagée de $70 \mu\text{m}$, on observe des profils totalement différents. La fissure s'étant propagée rapidement, la zone du trajet de fissure initialement affectée par l'hydrogène avant l'amorçage de la fissure est rompue, et la diffusion réticulaire de l'hydrogène n'a pas le temps de se faire, étant donnée la vitesse de chargement élevée. La zone affectée par l'hydrogène est d'environ $5 \mu\text{m}$ en fond de fissure. Les courbes à $\Delta a = 70 \mu\text{m}$ révèlent une forte contribution du piégeage de l'hydrogène dans le calcul de θ , ce qui est en accord avec les travaux de Krom et al [14], qui ont montré qu'en augmentant

la vitesse de chargement monotone, le piégeage de l'hydrogène était favorisé au détriment du remplissage des sites interstitiels. Dans ce cas, le choix du calcul du taux de recouvrement à partir de la concentration totale en hydrogène ou de la concentration d'hydrogène réticulaire revêt une importance non négligeable.

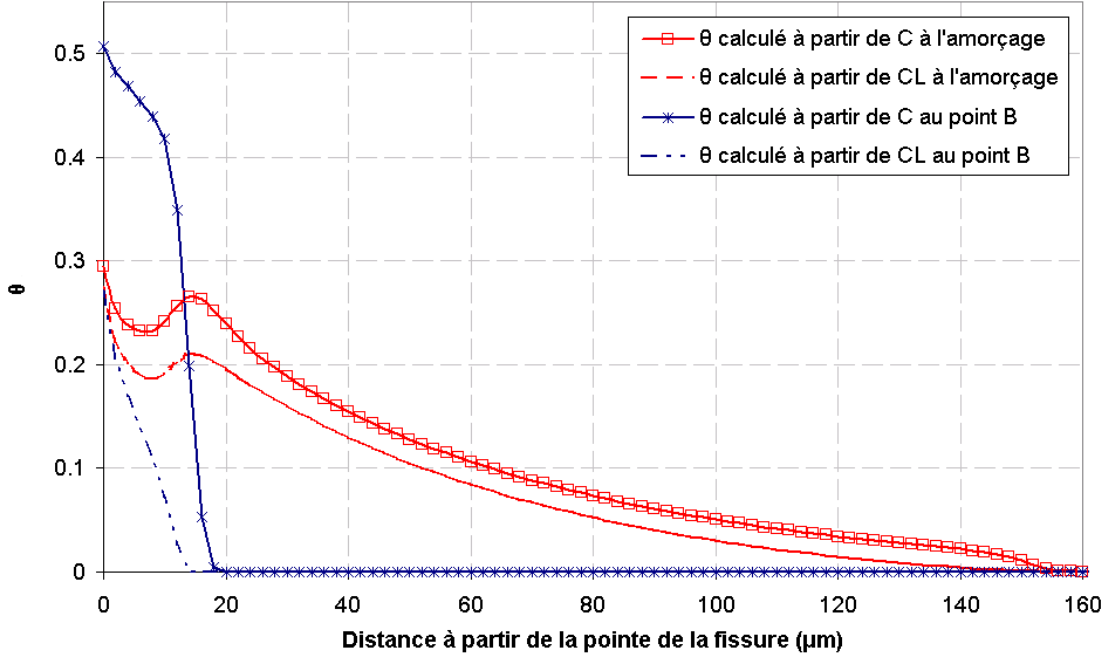


FIGURE 7.6 – Comparaison des profils du taux de recouvrement θ (calculé à partir de la concentration totale en hydrogène C et à partir de la concentration en hydrogène diffusible C_L) pour le modèle de diffusion couplée, pour la vitesse de $10 \mu\text{m/h}$, à l'instant de la rupture du premier élément cohésif et au point B (cf. figure 7.3).

La figure 7.6 présente les profils de taux de recouvrement (calculé avec C et C_L) pour la vitesse de $10 \mu\text{m/h}$ à l'amorçage de la fissure et au point B (cf. figure 7.3). On observe une forte contribution de l'hydrogène diffusible à l'amorçage de la fissure. Au point B ($\Delta a = 150 \mu\text{m}$), la zone initialement affectée par l'hydrogène est rompue, et la zone de diffusion de l'hydrogène est d'environ $20 \mu\text{m}$, plus grande qu'à la vitesse de $100 \mu\text{m/h}$ car la vitesse d'avancée de fissure est plus lente et permet à l'hydrogène de diffuser plus loin dans le matériau. Pour les profils au point B, on observe que la contribution de l'hydrogène piégé en pointe de fissure est également importante, mais moindre que pour la vitesse plus élevée de $100 \mu\text{m/h}$.

Par conséquent, plus on diminue la vitesse de chargement, plus la contribution de l'hydrogène diffusible est grande, moins on notera de différence entre les profils de θ calculé avec C et C_L .

En revanche, lorsque les vitesses de chargement sont élevées, le piégeage de l'hydrogène joue un rôle majeur [14], et le choix de C ou C_L pour le calcul du taux de recouvrement θ a une influence majeure sur la diminution d'énergie de séparation dans les éléments cohésifs.

Jusqu'à présent, nous avons étudié l'influence de l'hydrogène sur le comportement des éléments cohésifs. Nous allons maintenant étudier l'influence de l'hydrogène sur le comportement du cœur du matériau.

7.4 Influence de l'hydrogène sur la plasticité

La figure 7.7 présente les cartographies simulées de déformation plastique équivalente à l'instant de la rupture de l'élément cohésif situé en fond de fissure initial, en l'absence d'hydrogène (a), et dans l'hydrogène gazeux à 100 bars pour une vitesse de chargement de $0,1 \mu\text{m/h}$ avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène (b).

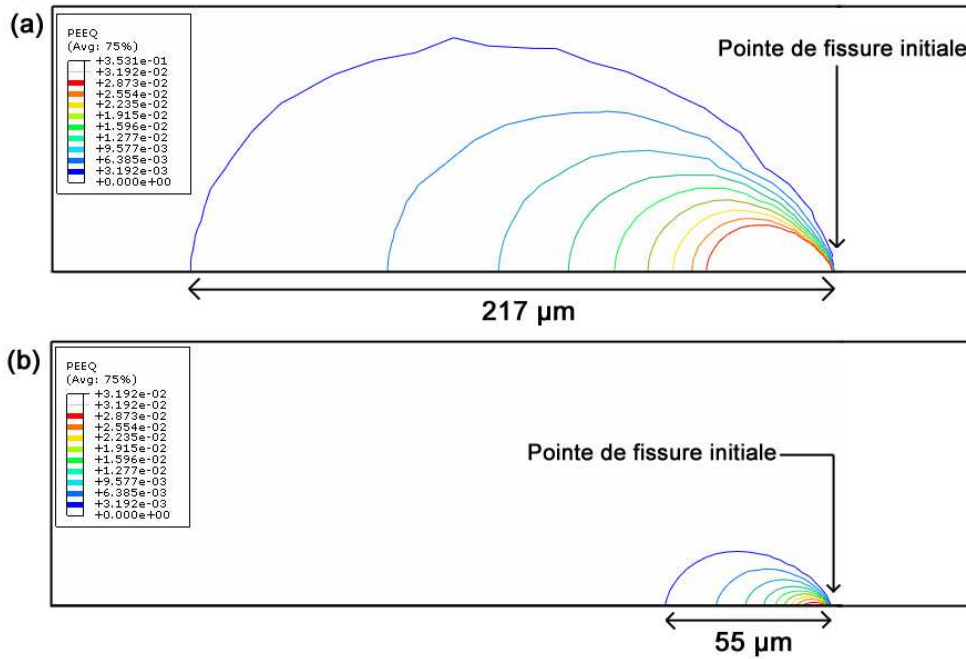


FIGURE 7.7 – Cartographies simulées de déformation plastique équivalente ϵ_p à l'instant de la rupture de l'élément cohésif situé en fond de fissure initial, (a) en l'absence d'hydrogène, et (b) dans l'hydrogène gazeux à 100 bars pour une vitesse de chargement de $0,1 \mu\text{m/h}$ avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène

Sur la figure 7.7, on observe que, comparativement à la cartographie en l'absence d'hydrogène, la présence d'hydrogène entraîne une déformation plastique plus localisée en pointe de fissure

(cartographie (b)). Par ailleurs, la déformation plastique équivalente ϵ_p est plus faible en présence d'hydrogène (environ 3 %, contre environ 35 % en l'absence d'hydrogène). Ce phénomène est dû à l'influence de l'hydrogène sur les paramètres de la loi de traction-séparation. En effet, plus la concentration locale en hydrogène est élevée, plus le taux de recouvrement en hydrogène est élevé, ce qui a pour effet de diminuer la contrainte cohésive normale T_n , entraînant une déformation plastique plus faible du cœur du matériau. Cette diminution de la déformation plastique en pointe de fissure est en accord avec l'observation d'une diminution du CTOD en présence d'hydrogène [169]. Des mesures de champ de déformation en pointe de fissure pourraient permettre d'étudier ce phénomène.

7.5 Bilan

Dans cette partie, nous avons étudié la capacité du modèle construit à prédire la propagation des fissures sous chargement monotone dans un acier soumis à de l'hydrogène gazeux à haute pression, pour plusieurs vitesses de chargement. Pour ce faire, les courbes R-CTOD et les profils de taux de recouvrement ont été simulés et comparés pour une loi de Fick et pour le modèle de diffusion couplée de Krom et al [14]. Les contributions des populations d'hydrogène diffusible et piégé ont été étudiées pour deux vitesses de chargement. En premier lieu, on a montré que le modèle construit est capable de représenter au moins qualitativement l'influence néfaste de l'hydrogène sur la résistance à la fissuration sous chargement monotone. Ensuite, on a montré que l'utilisation du modèle de diffusion couplée de l'hydrogène a tendance à accentuer l'effet de l'hydrogène. L'étude des profils du taux de recouvrement θ a montré que la contribution du piégeage de l'hydrogène est non négligeable pour les vitesses de chargement les plus élevées. Ainsi, le choix du calcul du taux de recouvrement à partir de la concentration totale en hydrogène ou à partir de la concentration d'hydrogène interstitiel implique des différences notables pour les plus fortes vitesses. Par ailleurs, la présence d'hydrogène entraîne une localisation et une diminution de la déformation plastique équivalente en pointe de fissure. Après cette série de simulations, on peut conclure que le modèle de zone cohésive, muni de la loi de traction-séparation influencée par l'hydrogène développée dans la partie II, est capable de représenter le mécanisme HEDE (cf. section 1.5, partie I) sous chargement monotone.

Chapitre 8

Simulations de la propagation des fissures sous chargement cyclique

USQU'À PRÉSENT, nous avons étudié les capacités du modèle construit dans la partie II sous chargement statique (validation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène) et à prédire la propagation des fissures sous chargement monotone en atmosphère d' H_2 (validation de l'implémentation de l'influence du taux de recouvrement θ sur l'énergie de séparation du modèle cohésif). Ces deux études ont montré que le modèle donne des résultats cohérents avec la littérature. L'objectif de cette section est d'étudier l'aptitude du modèle à prédire la propagation des fissures sous chargement cyclique en l'absence d' H_2 dans l'acier 15-5PH. Cette étude va nous permettre de tester la loi de traction-séparation développée (cf. section 3.1) sous chargement cyclique. Pour les deux rapports de charge de la campagne expérimentale ($R = K_{min}/K_{max} = 0,1$ et $0,7$) et plusieurs valeurs de ΔK , la vitesse d'avancée de la fissure da/dN (en m/cycle) en fonction du nombre de cycles N est relevée. Les courbes de propagation obtenues (da/dN en fonction de ΔK) sont comparées à celles obtenues expérimentalement au laboratoire sous air par Hamon [9] sur l'acier 15-5PH.

8.1 Mise en données

Le matériau étudié est un acier inoxydable martensitique 15-5PH, présenté dans la section 5.1. Son comportement élastoplastique est représenté par une plasticité de Von Mises et un écrouissage cinématique non-linéaire, dont les paramètres sont présentés dans le tableau 5.2 de cette partie.

Le modèle Abaqus utilisé représente une demi-éprouvette CT 40, comme présenté en détails dans la section 4.3 de la partie II. Les conditions aux limites sont également présentées dans

cette section. Le comportement des éléments cohésifs placés sur le trajet de fissure est régi par la loi de traction-séparation présentée dans la partie II, qui permet de décrire l'endommagement des éléments cohésifs au cours du chargement cyclique. Ainsi, le comportement du volume du matériau est donné, et ce sont les paramètres de la loi de traction-séparation (évolution de l'endommagement monotone et de l'endommagement cyclique) qui contrôlent la vitesse d'avancée de la fissure. L'influence et l'identification de chacun des paramètres de la loi de traction-séparation sera étudiée plus loin. Par ailleurs, on s'intéresse dans un premier temps à la propagation des fissures de fatigue en l'absence d'hydrogène ; la concentration d'hydrogène est donc égale à zéro en tout point de l'éprouvette à tout instant.

8.2 Principe des simulations

Par souci de réduction du temps de calcul, le choix a été fait de réaliser des simulations selon le principe suivant : pour chaque valeur de ΔK et de rapport de charge R , on détermine la valeur moyenne et l'amplitude de la force à appliquer à l'éprouvette CT, puis on simule la propagation de la fissure sous chargement cyclique à charge imposée, jusqu'à ce que la pointe de la fissure sorte de la zone du maillage raffinée à $2 \mu m$ (cf. section 4.3.2), où le calcul est arrêté depuis la subroutine UEL. La courbe donnant l'évolution de la longueur de fissure simulée Δa en fonction du nombre de cycles est ensuite étudiée, et la vitesse da/dN est relevée. Ainsi, chaque simulation permet d'obtenir un point $(da/dN, \Delta K)$ de la courbe de propagation de fatigue, pour un rapport de charge donné.

En accord avec la norme ASTM-E647 [135], l'amplitude de force imposée à l'éprouvette CT est déterminée par la relation suivante :

$$\Delta F = \frac{B\sqrt{W}\Delta K}{f(\alpha)}, \quad (8.1)$$

où F est une force, B est l'épaisseur de l'éprouvette CT 40 modélisée (soit $8 mm$ dans notre cas), $W = 40 mm$, a est la longueur de la fissure mesurée à partir de l'axe passant par le centre du trou de la goupille et α représente le rapport a/W . La fonction $f(\alpha)$, qui dépend uniquement de la longueur de la fissure et des dimensions de l'éprouvette CT, est donnée par la relation [135] :

$$f(\alpha) = \frac{(2 + \alpha)}{(1 - \alpha)^{3/2}} (0,886 + 4,64\alpha - 13,32\alpha^2 + 14,72\alpha^3 - 5,6\alpha^4). \quad (8.2)$$

Cette expression n'est valable que pour un rapport $\alpha = a/W$ supérieur ou égal à 0,2 [135]. Notre modèle comporte une préfissure à $a = 13,33 mm$, donnant un rapport α d'environ $0,33 > 0,2$. A partir de la variation de la force appliquée ΔF et du rapport de charge R , on détermine la force moyenne F_{sta} (cf. figure 8.1). Les valeurs de ΔF et de F_{sta} nous permettent ensuite de

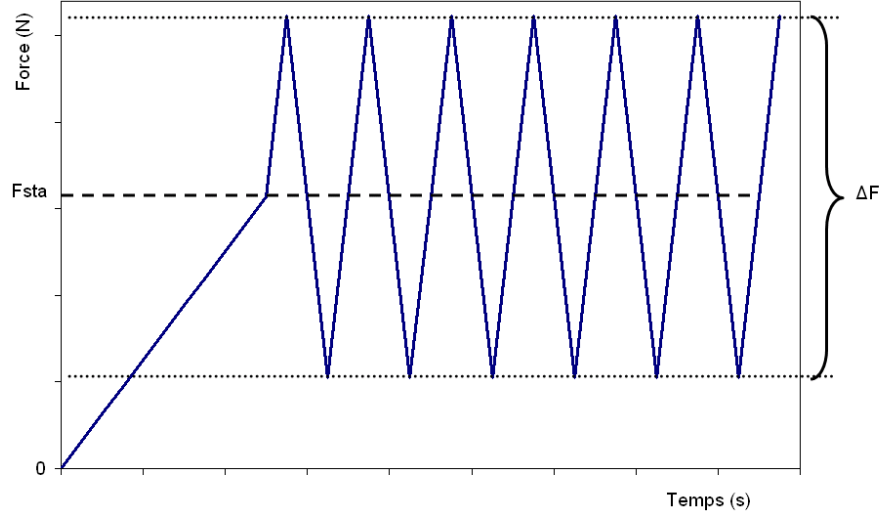


FIGURE 8.1 – Schéma de l'évolution de la force imposée en fonction du temps

déterminer la pression à imposer sur le quart supérieur du trou de la goupille (cf. section 4.3, partie II). En accord avec la figure 8.1, l'amplitude imposée est un signal triangulaire. En l'absence d'hydrogène, étant donnée la formulation de la loi de traction-séparation dans un cadre non-visqueux, la fréquence et la forme du signal imposé dans les simulations n'a pas d'influence sur les vitesses de propagation des fissures ; la fréquence est donc fixée arbitrairement à 5 Hz. A la température ambiante, cette observation est en accord avec les observations expérimentales. Pour permettre de décrire avec suffisamment de précision les cycles de chargement, l'incrément de temps de simulation est limité à 1/12 de la période du chargement cyclique.

Endommagement cyclique et zone plastique

Le choix a été fait de limiter l'évolution de l'endommagement cyclique D_c des éléments cohésifs à la zone plastique en fond de fissure, empêchant par conséquent l'endommagement cyclique des éléments cohésifs sur le trajet de fissure situés en dehors de la zone plastique. Ce choix est justifié par le fait que l'on s'intéresse au couplage entre l'endommagement et la plasticité cyclique. En pratique, cette condition intervient dans le calcul de la fonction seuil f_c et de l'endommagement cyclique D_c sous la forme d'une fonction de Heaviside :

$$f_c = \int_0^t \langle \dot{Y} \rangle (1 - D_c)^{n_c} H(|\dot{\epsilon}_{p,\text{bulk}}|) d\tau - (C_c + m_c D_c) = 0. \quad (8.3)$$

Lorsque le seuil est atteint ($f_c = 0$), l'évolution de l'endommagement cyclique est déter-

minée par :

$$\dot{D}_c = \frac{k_n}{m_c} (1 - D_c)^{n_c} \langle \dot{\delta}_n \rangle \frac{\langle \delta_n \rangle}{\delta_0} H(|\dot{\epsilon}_{p,\text{bulk}}|). \quad (8.4)$$

L'introduction du terme $H(|\dot{\epsilon}_{p,\text{bulk}}|)$ restreint l'évolution de D_c aux cas où la déformation plastique équivalente $\epsilon_{p,\text{bulk}}$ de l'élément de « bulk » adjacent évolue dans le temps (l'élément cohésif est alors situé dans la zone plastique). H est la fonction de Heaviside définie par :

$$\forall x \in \mathbb{R}, H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (8.5)$$

En outre, un critère de rupture spécifique des éléments cohésifs est employé. En accord avec la condition supplémentaire présentée précédemment, on suppose que la rupture d'un élément cohésif suffisamment endommagé a lieu, soit lorsque la variable d'endommagement D atteint la valeur critique de 0,999 (l'élément cohésif est alors presque complètement dégradé), soit lorsque l'élément a déjà subi un endommagement cyclique conséquent ($D_c > 0,6$, par exemple) et que l'endommagement cyclique D_c n'évolue plus car il n'y a plus d'évolution de la déformation plastique dans l'élément de « bulk » adjacent. Cette condition permet de ne pas rompre un élément cohésif au cours d'un nombre déraisonnable de cycles parce que l'endommagement cyclique D_c n'évolue plus.

8.3 Simulation des courbes de propagation sous chargement cyclique

Pour permettre de post-traiter les séries de simulations réalisées, les quantités qui nous intéressent (coordonnées des nœuds des éléments cohésifs rompus et temps simulé, ainsi que les évolutions des endommagements D_m et D_c) sont écrites à chaque incrément de temps de calcul dans un fichier texte. L'exploitation des données de ce fichier en cours ou à la fin de chaque simulation permet de tracer l'évolution de la longueur de la fissure Δa en fonction du nombre de cycles N et d'étudier le rôle des contributions monotone D_m et cyclique D_c le long du trajet de fissure à mesure que la fissure avance. A partir des courbes de l'évolution de Δa en fonction du nombre de cycles N , on détermine la vitesse de propagation de fissure da/dN correspondant à la valeur de ΔK choisie, que l'on peut alors confronter aux valeurs expérimentales. L'influence des paramètres de la loi de traction-séparation est étudiée dans le paragraphe suivant.

8.3.1 Influence et identification des paramètres de la loi de traction-séparation

L'identification des paramètres de la loi de traction-séparation a été réalisée à partir des vitesses expérimentales de propagation de fissure de fatigue sous air dans l'acier inoxydable martensitique 15-5PH (cf. chapitre 5, partie III). Idéalement, cette identification devrait être faite à partir des vitesses de propagation en environnement inerte. Ici, dans le domaine de vitesse concerné, l'influence de l'environnement est faible, notamment au regard des effets de l'hydrogène. Les paramètres suivants ont été identifiés :

$$\begin{aligned}
 k_n &= 10^7 \text{ MPa} \\
 m_m &= 450 \text{ J/m}^2 \\
 C_m &= 20 \text{ J/m}^2 \\
 m_c &= 60000 \text{ J/m}^2 \\
 C_c &= 500 \text{ J/m}^2 \\
 n_m &= 2,6 \\
 n_c &= 1.
 \end{aligned} \tag{8.1}$$

Ces paramètres ont été déterminés à partir d'un unique couple $(\Delta K, da/dN)$ relevé expérimentalement. Nous allons présenter la méthode d'identification et l'influence des différents paramètres de la loi de traction-séparation.

Rigidité initiale en traction k_n

La rigidité initiale en traction k_n doit être choisie très élevée, afin d'éviter d'introduire une souplesse artificielle trop forte dans le modèle. Par conséquent, à l'instar des travaux de Bouvard et al [23], on choisit pour k_n la valeur très élevée de 10^7 MPa.

Paramètres contrôlant l'évolution de D_m

Les valeurs des paramètres m_m , C_m et n_m contrôlent l'endommagement monotone D_m . En se remémorant la figure 3.3, la loi de traction-séparation est limitée par une enveloppe d'allure exponentielle due à la définition de la variable d'endommagement D comme le maximum des contributions D_m et D_c (cf. équation 3.4, partie II) et à l'évolution de la contribution D_m (cf. équation 3.10, partie II). Par conséquent, l'énergie de séparation sous chargement cyclique, représentée par l'aire sous la TSL, est limitée par l'aire sous l'enveloppe monotone, c'est-à-dire par l'énergie de séparation sous chargement monotone, déterminée par les paramètres m_m , C_m et n_m .

Cette énergie doit être choisie suffisamment élevée pour que l'énergie de séparation sous chargement cyclique permette d'atteindre les ordres de grandeur des vitesses de propagation da/dN expérimentales. En ce qui concerne la valeur de C_m , qui représente un seuil initial d'endommagement monotone, un rapide calcul montre que ce paramètre peut être exprimé en fonction de la contrainte cohésive normale à l'amorçage de l'endommagement monotone $T_{n,am}$ par la relation :

$$C_m = \frac{1}{2} \frac{T_{n,am}^2}{k_n}. \quad (8.2)$$

Dans notre étude, la valeur de C_m a été choisie en première approximation de telle sorte que la contrainte cohésive normale $T_{n,am}$ à l'amorçage de l'endommagement monotone soit plus faible que la limite d'élasticité σ_y ($= 750$ MPa) du cœur du matériau. Le calcul de C_m avec $T_{n,am} = 750$ MPa à l'aide de la relation 8.2 donne la valeur de $28 J/m^2$. Par conséquent, on a choisi la valeur de $20 J/m^2$ pour C_m en première approximation.

Les valeurs des paramètres m_m et n_m (compris entre 1 et 3 exclu) contrôlent l'énergie de séparation sous chargement monotone (cf. section 3.1.2) ; plus m_m et n_m sont élevés, plus cette énergie est élevée. Dans notre étude, on s'intéresse à la propagation des fissures sous chargement cyclique. De plus, l'énergie de séparation est limitée par l'aire sous la loi de traction-séparation, représentée par l'énergie de séparation monotone. Ne disposant pas de données expérimentales sur la propagation des fissures sous chargement monotone dans l'acier inoxydable martensitique 15-5PH, les paramètres de l'évolution de l'endommagement monotone D_m sont donc choisis de telle sorte que l'énergie de séparation monotone soit suffisamment élevée pour atteindre les vitesses de propagation expérimentales sous chargement cyclique. A k_n fixé, plus la valeur du paramètre m_m est élevée, plus la valeur maximale de la contrainte cohésive normale T_n , notée T_{max} , est grande, et plus le cœur du matériau subit de déformation plastique. Il est donc important de limiter la valeur de T_{max} pour éviter que les éléments de « bulk » ne subissent une déformation plastique trop importante. Quant à l'exposant réel n_m , il contrôle l'allure de l'adoucissement de la TSL sans modifier significativement la valeur de T_{max} . Le choix de la valeur de $450 J/m^2$ pour m_m et de la valeur de 2,6 pour l'exposant n_m permettent d'obtenir une énergie de séparation monotone suffisamment élevée, tout en limitant la déformation plastique équivalente dans les éléments de « bulk » à 100%. Pour un chargement monotone, un calcul préliminaire a permis de déterminer que, lorsque la variable d'endommagement D atteint sa valeur critique de 0,999 (cf. section 8.2), l'énergie dissipée vaut environ $29 kJ/m^2$. Cette valeur est du même ordre de grandeur que celle identifiée par Scheider et al [24] ($32 kJ/m^2$) à partir d'un essai de fissuration sous chargement monotone, réalisé dans l'air sur un acier à haute résistance faiblement allié.

Paramètres contrôlant l'évolution de D_c

Nous allons maintenant présenter l'identification des paramètres « cycliques » de la loi de traction-séparation (m_c , C_c et l'exposant n_c). C_c est choisi assez élevé pour que l'endommagement cyclique D_c n'évolue qu'à partir du début du chargement cyclique; des simulations préliminaires montrent que la valeur de 500 J/m^2 convient. La valeur de l'énergie par unité de surface m_c contrôle l'évolution de l'endommagement D_c , et donc la cinétique de dégradation de la rigidité des éléments cohésifs sous chargement cyclique et par conséquent la propagation des fissures de fatigue. A partir d'un unique couple de données expérimentales (ΔK , da/dN), en ayant déterminé au préalable les paramètres C_m , m_m , n_m , k_n et C_c , on détermine la valeur de m_c , soit 60 kJ/m^2 , qui permet d'obtenir la vitesse de propagation relevée expérimentalement. En première approche, l'exposant n_c est choisi égal à 1. Une étude paramétrique a montré que pour les paramètres de TSL choisis, la valeur de n_c a peu d'influence sur les résultats. Il est à noter que l'énergie de séparation sous chargement cyclique est limitée par l'aire sous l'enveloppe d'allure exponentielle de la TSL, *i.e.* par l'énergie de séparation monotone (29 kJ/m^2 environ). La littérature [169] fournit des valeurs de l'énergie dissipée dans la zone en fond de fissure lors de la propagation des fissures de fatigue; en revanche, ces valeurs ne distinguent pas l'énergie de séparation des autres phénomènes dissipatifs (plasticité) [19]. Par conséquent, on peut seulement conclure que l'énergie dissipée dans les éléments cohésifs sous chargement cyclique, qui est limitée par l'énergie de séparation monotone, est très inférieure aux ordres de grandeur des valeurs de l'énergie dissipée lors de la propagation des fissures de fatigue (de 1000 à 2000 kJ/m^2 en environnement inerte), estimées en fonction du niveau de ΔK dans [169].

8.3.2 Evolution de la longueur de fissure au cours du chargement

La figure 8.2 présente l'évolution de la longueur de la fissure Δa (en mm) en fonction du nombre de cycles N , pour plusieurs simulations à deux rapports de charge ($R = 0,1$ et $0,7$) et différentes valeurs initiales de ΔK (30 et $40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). Ces courbes ont été obtenues pour les paramètres de la loi de traction-séparation identifiés dans la section 8.3.1.

On observe qu'une valeur de ΔK plus élevée entraîne une propagation de fissure plus rapide. L'étude des courbes de la figure 8.2 montre que plusieurs éléments cohésifs peuvent rompre selon le niveau de facteur d'intensité de contraintes K_{max} atteint lors de la montée en charge initiale (partie monotone du chargement et premier quart de cycle); du point de vue du modèle, ce phénomène résulte de l'endommagement monotone D_m , qui atteint immédiatement la valeur critique proche de 1 pour laquelle il y a rupture de l'élément. Plus la valeur de l'exposant n_m est faible, plus le nombre d'éléments cohésifs rompus lors de la montée en charge initiale sera grand. Par ailleurs, la comparaison des courbes donnant l'évolution de la longueur de fissure Δa en

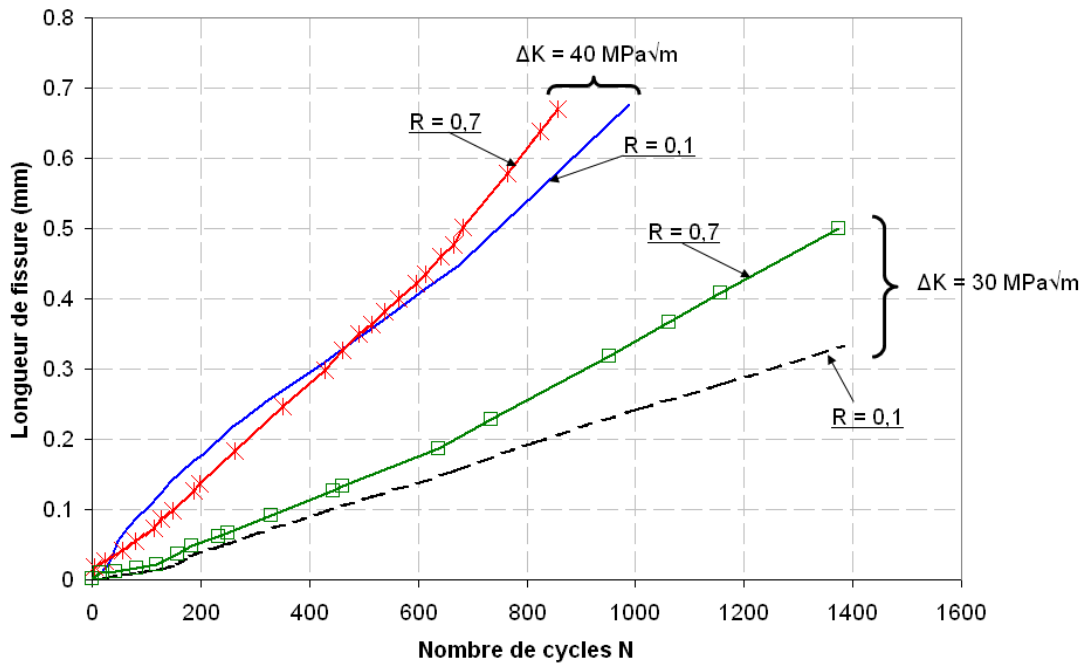


FIGURE 8.2 – Evolution de la longueur de fissure simulée Δa (en mm) en fonction du nombre de cycles N , pour les rapports de charge $R = 0,1$ et $0,7$ et deux valeurs de ΔK initiales ($30 \text{ MPa} \sqrt{m}$ et $40 \text{ MPa} \sqrt{m}$)

fonction du nombre de cycles N à ΔK initial fixé pour les deux rapports de charge $R = 0,1$ et $0,7$ indique une très légère influence du rapport de charge sur les vitesses de propagation (plus marquée pour la valeur de ΔK de $30 \text{ MPa} \sqrt{m}$). Cette faible sensibilité de la vitesse vis-à-vis du rapport de charge résulte du fait que l'endommagement cyclique évolue uniquement dans la zone plastifiée cyclique (cf. paragraphe 8.2) et que la taille de cette zone dépend uniquement de la valeur de ΔK .

Afin de visualiser les rôles des endommagements monotone et cyclique lors de la propagation de la fissure, la figure 8.3 présente l'évolution des endommagements monotone D_m et cyclique D_c en fonction de la distance à partir de la pointe de la fissure initiale, pour une simulation à $R = 0,1$ et pour un ΔK de $20 \text{ MPa} \sqrt{m}$, à différents nombres de cycles N . Après la montée en charge initiale (partie monotone du chargement et premier quart de cycle, courbes (a)), l'endommagement monotone D_m a évolué dans plusieurs éléments cohésifs situés en fond de fissure initiale jusqu'à une valeur d'environ $0,3$ en fond de fissure, tandis que la contribution cyclique D_c est nulle sur tout le trajet de fissure. La zone affectée par l'endommagement monotone (la « process zone » monotone), d'environ $240 \mu m$, est plus grande que le rayon de la zone plastifiée

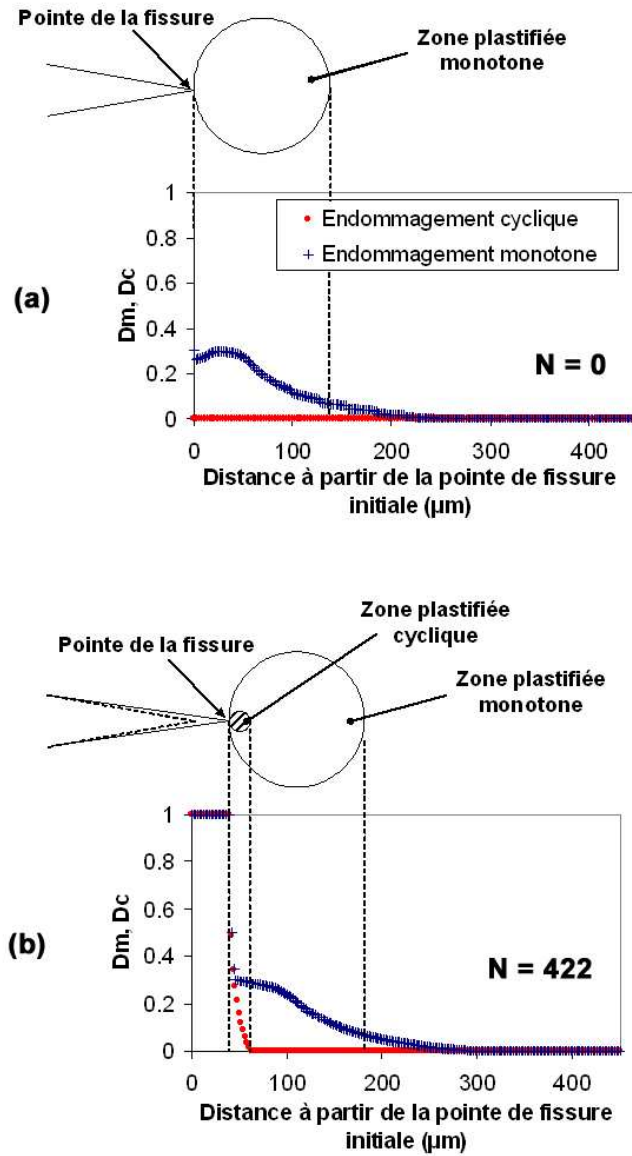


FIGURE 8.3 – Profils de l'endommagement monotone D_m et de l'endommagement cyclique D_c en fonction de la distance le long du trajet de fissure à partir de la pointe de fissure initiale, pour $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ à $R = 0,1$, pour plusieurs nombres de cycles N : (a) $N = 0$ (fin de la montée en charge initiale) et (b) $N = 422$.

monotone $r_{ZP,m}$, qui peut être évalué par la formule analytique d'Irwin en contraintes planes :

$$r_{ZP,m} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_{max}}{\sigma_y} \right)^2. \quad (8.3)$$

Pour le rapport de charge ($R = 0, 1$) et le niveau de ΔK ($= 20 \text{ MPa}\sqrt{m}$) étudiés, la relation précédente donne un rayon de zone plastifiée monotone d'environ $140 \mu m$. Cette différence de taille est due au choix de la valeur du paramètre C_m , qui représente un seuil d'endommagement monotone (cf. section 8.3.1). Pour ce niveau de facteur d'intensité de contrainte K , aucun élément cohésif n'est rompu à la fin de la montée en charge initiale. Au bout de 422 cycles (courbes (b)), la fissure s'est propagée et plusieurs éléments cohésifs ont été rompus. L'endommagement monotone D_m affecte une zone de la même taille qu'à la fin de la montée en charge initiale. De plus, une « process zone » cyclique d'environ $30 \mu m$ est endommagée cycliquement, ce qui correspond au rayon de la zone plastifiée cyclique $r_{ZP,cyc}$ pour le niveau de δK et le rapport de charge étudiés, estimé par la relation suivante :

$$r_{ZP,cyc} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\Delta K}{2\sigma_y} \right)^2. \quad (8.4)$$

Cette étude confirme que l'évolution de l'endommagement cyclique est restreinte à la zone plastifiée cyclique.

8.3.3 Simulation des courbes de propagation de fatigue

Pour chaque valeur de ΔK simulée à $R = 0, 1$ et $R = 0, 7$, on détermine la vitesse da/dN à partir de la courbe donnant l'évolution de la longueur de fissure en fonction du nombre de cycles une fois la vitesse de propagation stabilisée. Cette vitesse de propagation est ensuite reportée dans un graphe da/dN en fonction de ΔK , ce qui nous permet de construire les courbes de propagation simulées pour les deux rapports de charge. La figure 8.4 présente ces courbes de propagation. On rappelle que ces vitesses ont été obtenues avec les paramètres de la TSL identifiés précédemment à partir d'un unique couple $(\Delta K, da/dN)$ à $R = 0, 7$.

A première vue, on observe que le modèle construit est capable de prédire les ordres de grandeur des vitesses de propagation, ainsi que l'exposant de Paris des courbes de propagation de fissure de fatigue expérimentale sous air pour l'acier inoxydable martensitique 15-5PH pour $R = 0, 7$ et $R = 0, 1$, pour les valeurs de ΔK comprises entre 10 et $40 \text{ MPa}\sqrt{m}$. On observe que le rapport de charge n'a que peu d'influence sur les vitesses de propagation, ce qui est cohérent avec la construction du modèle. Pour que le modèle soit apte à prédire l'influence du rapport de charge sur les vitesses de propagation en fatigue dans divers matériaux, il serait nécessaire de modéliser le phénomène de fermeture de fissure.

De plus, le modèle construit ne permet pas de prédire le seuil de propagation des fissures de fatigue (cela ne fait pas partie des objectifs de notre étude). L'introduction d'un seuil en contrainte cohésive dans l'évolution de l'endommagement cyclique, à l'instar des travaux de Bouvard et al [23], pourrait permettre de prédire le seuil de propagation des fissures de fatigue.

Pour les fortes valeurs de ΔK , le rayon de la zone plastifiée initiale est plus élevé que la taille de la zone de maillage raffinée à $2\mu m$. Par conséquent, les vitesses de propagation n'ont pas pu être relevées avec le maillage réalisé. Dans notre étude, on s'intéresse aux vitesses de propagation de fatigue à faible ΔK ($\leq 20 \text{ MPa}\sqrt{m}$) en présence d'hydrogène (cf. chapitre 5, partie III).

8.4 Bilan sous chargement cyclique

Pour conclure, le modèle construit utilise un modèle de zone cohésive avec une loi de traction-séparation spécifique pour modéliser l'endommagement sous chargement cyclique et une loi élastoplastique pour le comportement du cœur du matériau. On a montré qu'il est possible d'identifier les paramètres de la TSL à partir d'un seul couple (ΔK , da/dN) expérimental pour un rapport de charge donné et de reproduire ensuite la courbe de propagation de fatigue pour deux rapport de charge différents. Les paramètres de l'endommagement monotone pourront être identifiés plus rigoureusement à l'aide de données sur la fissuration de l'acier inoxydable 15-5PH

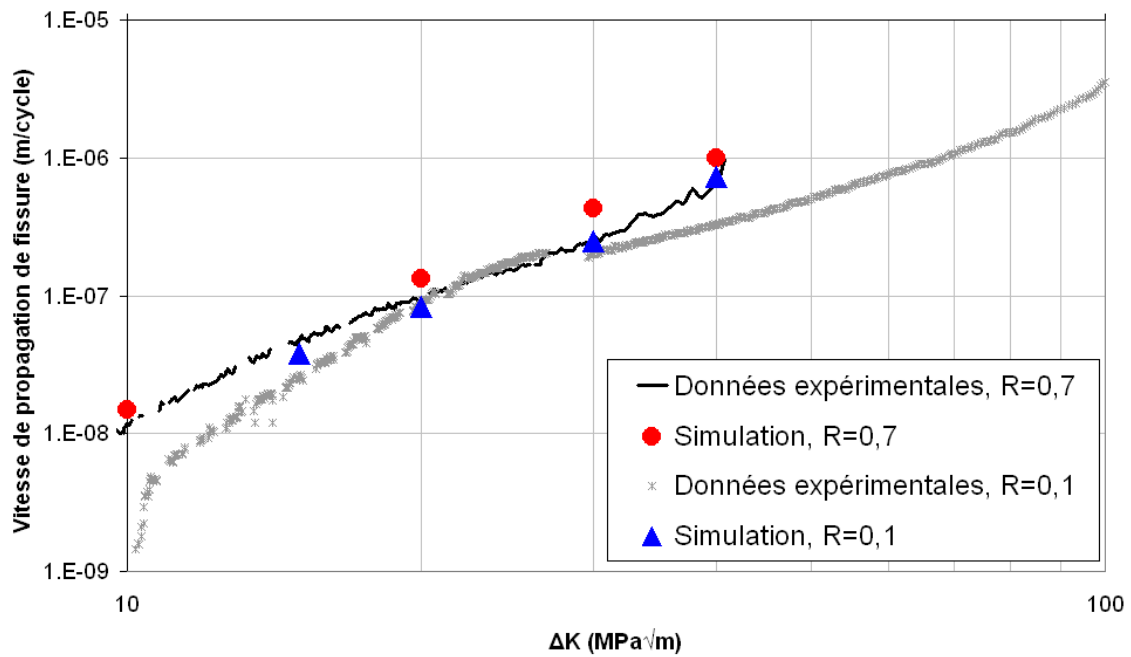


FIGURE 8.4 – Courbes simulées de l'évolution de la vitesse de propagation de fissure da/dN (en m/cycle) en fonction de l'amplitude du facteur d'intensité de contraintes ΔK (en $\text{MPa}\sqrt{m}$), pour deux rapports de charge ($R = 0,1$ et $0,7$), comparées aux courbes de propagation obtenues sous air pour un acier inoxydable martensitique 15-5PH [9]

sous chargement monotone. De plus, le rôle des contributions monotone et cyclique a été étudié; tandis qu'une zone de l'ordre de grandeur de la zone plastique monotone est affectée par l'endommagement D_m , la propagation de la fissure sous chargement cyclique est contrôlée par l'endommagement cyclique D_c , qui évolue uniquement dans la zone plastique cyclique. Intrinsèquement, le modèle construit ne prédit qu'une faible influence du rapport de charge sur les vitesses de propagation da/dN à ΔK fixé. En effet, le modèle construit ne tient pas compte du phénomène de fermeture de fissure.

Chapitre 9

Simulations de la propagation des fissures de fatigue sous H_2

ETTE SECTION présente les simulations de la propagation des fissures de fatigue dans l'acier inoxydable martensitique 15-5PH en atmosphère d'hydrogène gazeux. L'objectif est de présenter les premiers résultats, et d'analyser qualitativement les phénomènes à l'œuvre. Les paramètres de la loi de traction-séparation, identifiés dans la section précédente à partir de la courbe de propagation dans l'acier 15-5PH sous air, sont utilisés pour ces simulations. L'objectif de cette dernière section est de confronter les vitesses de propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène simulées aux courbes de propagation de fissure de fatigue pour l'acier inoxydable martensitique 15-5PH, obtenues expérimentalement pour un rapport de charge $R = 0,7$ sous hydrogène gazeux. L'influence de la fréquence (20 Hz et 0,2 Hz), du niveau de ΔK (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$) et du niveau de pression (0,09 MPa et 9 MPa d' H_2) sera étudiée. Les influences respectives de l'hydrogène réticulaire et de l'hydrogène piégé seront plus particulièrement examinées. Cette confrontation nous permettra de discerner les forces et les limitations du modèle que nous avons construit.

9.1 Principe des simulations

Le principe des simulations est identique aux simulations sous chargement cyclique en l'absence d'hydrogène (cf. sections 8.1 et 8.2) : 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 cyclique du matériau est modélisé par une loi élastoplastique à écrouissage cinématique non-linéaire, supposée insensible à la

présence d'hydrogène. Pour représenter l'atmosphère d'hydrogène gazeux dans laquelle est plongée l'éprouvette, une concentration d'hydrogène constante est imposée sur quelques micromètres en fond de fissure (cf. section 4.3.3), à l'instar de ce qui a été fait sous chargement statique (cf. chapitre 6) et sous chargement monotone (cf. chapitre 7). Cette concentration est déterminée par la loi de Sieverts (cf. section 1.3.2), en fonction de la pression d'hydrogène gazeux et de la température.

Afin de confronter le modèle aux résultats de la campagne expérimentale (cf. section 5), plusieurs simulations sont réalisées avec un rapport de charge R de 0,7. Pour étudier l'effet du niveau de chargement, la propagation de fissure de fatigue dans l'hydrogène à 9 MPa est simulée pour trois valeurs de ΔK initiaux (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$). Pour des raisons de taille de maille, les valeurs de ΔK inférieures à 10 MPa $\sqrt{m}$ ne seront pas étudiées. Pour étudier l'influence de la pression d'hydrogène gazeux, on simule également la propagation de fissure sous chargement cyclique pour une pression d'hydrogène plus faible (0,09 MPa), et pour un niveau de ΔK de 10 MPa $\sqrt{m}$. En outre, l'influence de la fréquence de chargement (20 Hz et 0,2 Hz) est étudiée pour un niveau de ΔK de 10 MPa $\sqrt{m}$ à la pression d' H_2 de 0,09 MPa. Afin de bien comprendre le rôle des deux populations d'hydrogène (réticulaire et piégé) dans l'effet néfaste de l'hydrogène sur les vitesses de propagation de fatigue, les profils du taux de recouvrement en hydrogène θ le long du trajet de fissure, calculé avec la concentration totale en hydrogène $C = C_L + C_T$, et calculé avec la concentration en hydrogène réticulaire C_L (qui sera noté θ_L) seront analysés.

9.2 Vitesses de propagation de fissure de fatigue sous H_2

La figure 9.1 présente les courbes donnant l'évolution de la longueur de fissure Δa en fonction du nombre de cycles N , pour les simulations aux pressions de 0,09 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 $\sqrt{m}$). Ces courbes sont comparées à celles simulées en l'absence d'hydrogène pour les niveaux de ΔK de 10 et 20 MPa $\sqrt{m}$ à un rapport de charge de 0,7.

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. De plus, on remarque qu'en présence d'hydrogène, plus le niveau de ΔK est élevé, plus l'avancée de fissure lors de la montée en charge initiale (partie monotone du chargement et premier quart de cycle) est grande. Par ailleurs, on remarque que plus le niveau de ΔK est élevé, plus la vitesse de propagation de la fissure sous chargement cyclique est rapide.

A partir des courbes de la figure 9.1, les vitesses de propagation de fissure da/dN sont estimées (une fois la propagation de la fissure stabilisée) pour les trois niveaux de ΔK initiaux

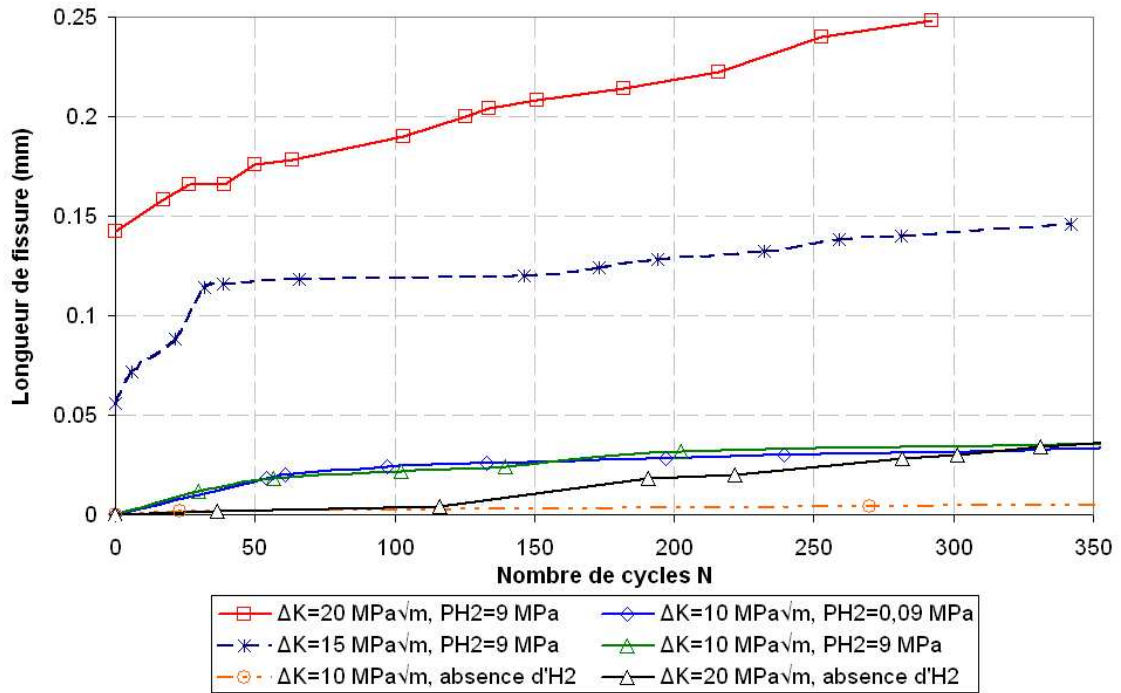


FIGURE 9.1 – Evolution de la longueur de fissure Δa (en mm) en fonction du nombre de cycles N , pour des simulations de propagation de fissure de fatigue en présence d'hydrogène à un rapport de charge $R = 0,7$, à la fréquence cyclique de 20 Hz et pour différentes pressions d'hydrogène (0,09 MPa et 9 MPa) et différents niveaux de ΔK (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$). Ces courbes sont comparées à celles simulées en l'absence d'hydrogène.

étudiés (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$) à la fréquence de 20 Hz et pour une pression d' H_2 de 9 MPa. La figure 9.2 présente la comparaison de la courbe de propagation obtenue (vitesse de propagation da/dN en fonction du niveau de ΔK), que l'on compare aux courbes obtenues expérimentalement dans l'hydrogène gazeux à 0,09 et 9 MPa à la fréquence de 20 Hz [170] et dans l'air [9] pour l'acier inoxydable martensitique 15-5PH, et à la courbe de propagation simulée en l'absence d'hydrogène (cf. chapitre 8).

On remarque que, dans l'hydrogène gazeux à 9 MPa et pour la fréquence de 20 Hz, le modèle prédit une augmentation (d'un facteur 2,5) des vitesses de propagation de fissure de fatigue pour les niveaux de ΔK initiaux de 10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$ (il est à noter que la pente de la courbe de propagation semble inchangée en présence d'hydrogène). Par ailleurs, la figure 9.1 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' H_2) pour un ΔK de 10 MPa $\sqrt{m}$; on peut donc supposer que la courbe de propagation simulée pour la pression d' H_2 de 0,09 MPa sera très

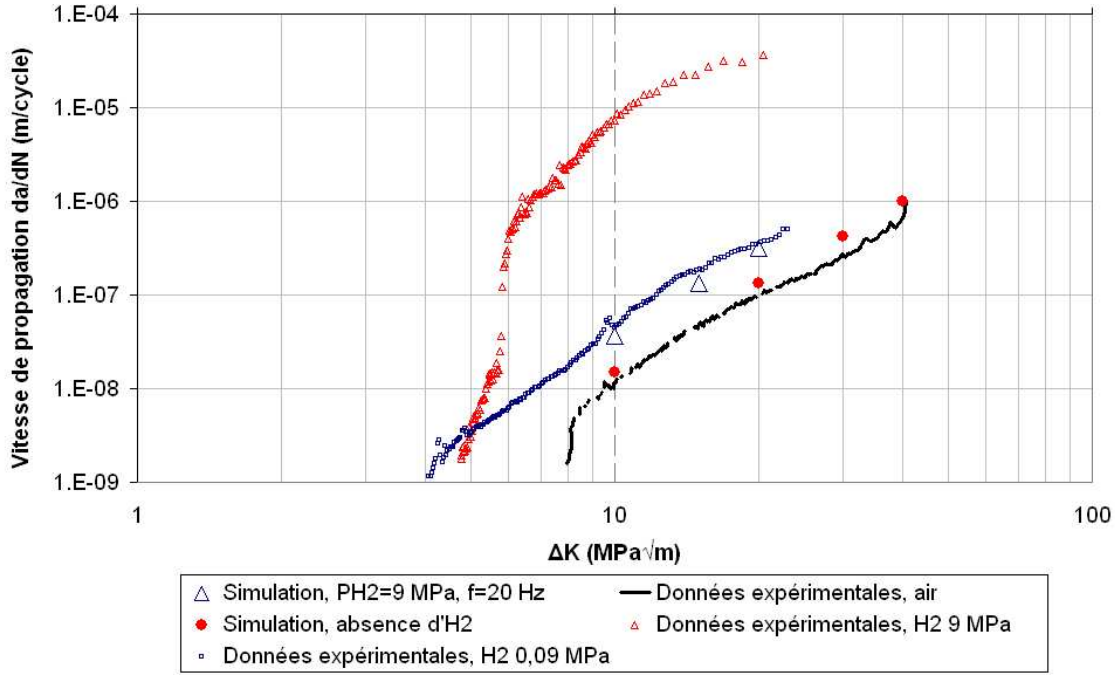


FIGURE 9.2 – Courbe de propagation de fissure de fatigue en présence d’hydrogène, simulée pour un rapport de charge $R = 0,7$ à la fréquence de 20 Hz pour une pression d’ H_2 de 9 MPa, comparée aux courbes de propagation obtenues sous air [9] et sous H_2 à 0,09 et 9 MPa (cf. chapitre 5) pour un acier inoxydable martensitique 15-5PH, et simulée en l’absence d’hydrogène.

proche de celle obtenue pour la pression de 9 MPa. Si l’on compare la courbe de propagation simulée en présence d’hydrogène à la fréquence de 20 Hz à la courbe expérimentale sous H_2 à 0,09 MPa, on remarque tout d’abord que l’augmentation de vitesse relevée dans les simulations due à la présence d’hydrogène est plus faible que celle observée expérimentalement pour la pression de 0,09 MPa (facteur 3,7 environ), tout en restant du même ordre de grandeur. Il faut ici rappeler que, pour déterminer le taux de recouvrement en hydrogène θ (cf. section 2.1.5, partie I), nous avons choisi pour la différence d’énergie libre entre la surface et le cœur du matériau Δg_b^0 la valeur de 36 kJ/mol (cf. section 1.3.1, partie I). Le choix de cette valeur détermine la sensibilité des paramètres de la loi de traction-séparation vis-à-vis de la concentration en hydrogène, et a par conséquent une influence sur l’augmentation de vitesse relevée en présence d’hydrogène.

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 est incapable de prédire les vitesses de propagation expérimentales obtenues à haute pression (9 MPa) et haute fréquence (20 Hz)

relevées pour des niveaux de ΔK supérieurs à $6 \text{ MPa}\sqrt{m}$. Ce constat suggère que les ingrédients mis en œuvre dans le modèle développé ne suffisent pas pour prédire l'augmentation brutale de vitesse sous 9 MPa d'hydrogène. Pour mieux comprendre ces observations, nous allons étudier l'influence de la pression d' H_2 , du niveau de ΔK et de la fréquence du chargement cyclique sur les profils de concentration d'hydrogène piégé et réticulaire.

9.3 Discussion

9.3.1 Influence de la pression d' H_2

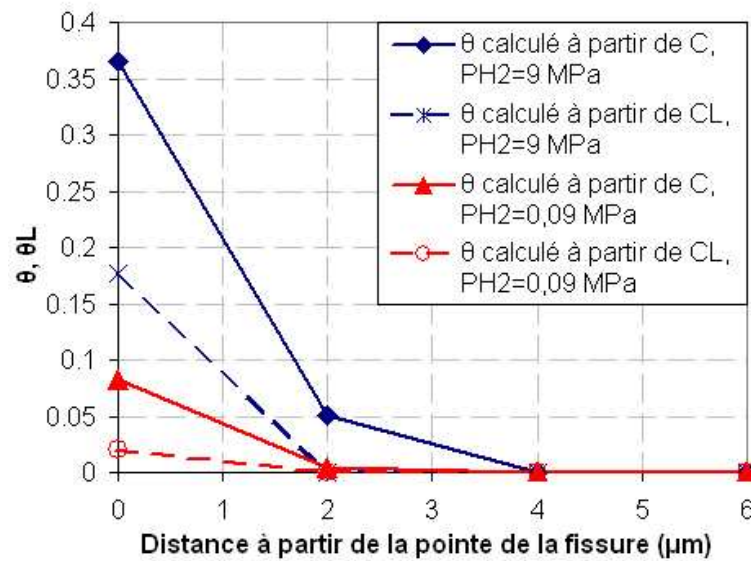


FIGURE 9.3 – Evolution du taux de recouvrement en hydrogène θ , calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz et pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$, pour deux pressions d' H_2 (0,09 MPa et 9 MPa), en fonction de la distance à partir du fond de fissure, après 250 cycles de chargement

Sur la figure 9.1, si l'on compare les courbes obtenues pour un niveau de ΔK initial de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ pour les pressions d' H_2 de 0,09 MPa et 9 MPa, on note que, pour la fréquence de chargement de 20 Hz, l'effet de l'hydrogène sur la propagation de la fissure sous chargement cyclique ne semble pas dépendre de la pression d'hydrogène gazeux. Pour mieux comprendre ce phénomène, nous allons étudier le profil du taux de recouvrement en hydrogène θ le long du trajet de fissure, calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C (noté θ) et à

partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L (noté θ_L), pour la fréquence de 20 Hz et pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$, pour deux pressions d'hydrogène gazeux (0,09 MPa et 9 MPa) (cf. figure 9.3), après 250 cycles. D'après la figure 9.1, ce nombre de cycles de chargement correspond à une longueur de fissure d'environ $30 \mu m$ pour les deux niveaux de pression. L'étude de ces profils va nous permettre de comprendre le rôle des populations d'hydrogène réticulaire et d'hydrogène piégé pour les deux pressions d' H_2 étudiées.

L'étude de la figure 9.3 révèle que, dans la zone de quelques micromètres affectée par l'hydrogène en fond de fissure, les taux de recouvrement θ et θ_L sont plus élevés pour la pression de 9 MPa que pour la pression de 0,09 MPa d' H_2 . D'après la loi de Sieverts, la concentration d'hydrogène absorbé est proportionnelle à la racine carrée de la pression d'hydrogène gazeux ; par conséquent, à la pression de 9 MPa, la concentration d'hydrogène imposée en fond de fissure est 10 fois plus élevée que pour la pression de 0,09 MPa. On retrouve cette différence de condition aux limites dans le rapport entre les taux de recouvrement θ_L en fond de fissure aux deux pressions d' H_2 . De plus, on remarque une contribution importante de l'hydrogène piégé dans le calcul du taux de recouvrement. Par ailleurs, pour ce niveau de ΔK et cette fréquence de chargement (20 Hz), on observe que l'hydrogène, qui diffuse par les sites interstitiels, affecte une zone de $4 \mu m$ en fond de fissure (correspondant à la taille de deux éléments de la modélisation éléments finis) pour la pression d' H_2 de 9 MPa. Pour la plus faible pression, seul l'élément cohésif en fond de fissure ($2 \mu m$) est significativement influencé par la présence d'hydrogène. D'après la théorie d'Oriani [15], l'hydrogène piégé est en équilibre local avec l'hydrogène réticulaire ; ainsi, l'hydrogène ne peut être piégé que dans les zones où l'hydrogène dispose de suffisamment de temps pour diffuser par voie interstitielle.

Pour conclure, plus la pression d' H_2 est élevée, plus le taux de recouvrement dans l'élément cohésif situé en fond de fissure est élevé. La contribution de l'hydrogène piégé dans le calcul du taux de recouvrement en hydrogène est significative. Pour le niveau de ΔK initial de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ et la fréquence de 20 Hz, la zone affectée par l'hydrogène en fond de fissure est d'environ $4 \mu m$ pour la haute pression d' H_2 (9 MPa) et d'environ $2 \mu m$ pour la pression de 0,09 MPa. A haute fréquence, la vitesse de propagation de la fissure pour ce niveau de ΔK ($3,7 \times 10^{-2} \mu m/\text{cycle}$ d'après la figure 9.2, correspondant à $0,74 \times \mu m/s$ à la fréquence de 20 Hz) ne laisse pas suffisamment de temps à l'hydrogène pour diffuser par voie interstitielle jusqu'au cœur de la pièce fissurée, avant la rupture de l'élément cohésif en fond de fissure. Par conséquent, la zone cohésive est uniquement affectée par l'hydrogène sur une longueur d'environ 2 à $4 \mu m$ en fond de fissure (même pour un niveau de pression d' H_2 de 9 MPa). Il est à noter que, la distance de pénétration de l'hydrogène dans le matériau par voie interstitielle étant très faible, le terme faisant intervenir le gradient de contrainte hydrostatique dans l'équation de diffusion (cf. section 6.3) n'a ici pas d'influence. Nous allons maintenant nous intéresser à l'influence du

niveau de ΔK sur la diffusion de l'hydrogène en fond de fissure.

9.3.2 Influence du niveau de ΔK

La figure 9.4 présente les profils du taux de recouvrement pour deux valeurs de ΔK (10 et 20 $\text{MPa}\sqrt{m}$), à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz et pour une pression d'hydrogène de 9 MPa, à 250 cycles de chargement.

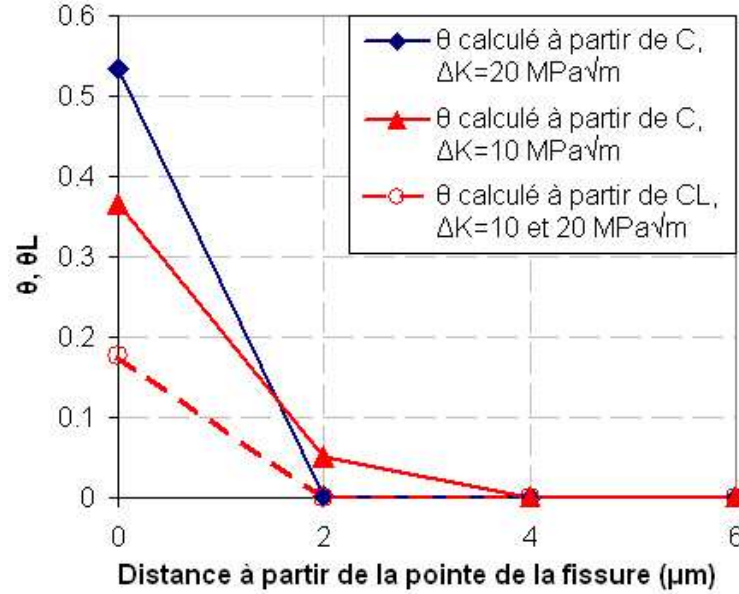


FIGURE 9.4 – Evolution du taux de recouvrement en hydrogène, calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , pour deux niveaux de ΔK (10 et 20 $\text{MPa}\sqrt{m}$), à la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz et pour une pression d' H_2 de 9 MPa, en fonction de la distance à partir du fond de fissure, à 250 cycles.

Tout d'abord, on remarque que la valeur du taux de recouvrement θ_L en fond de fissure est indépendante du niveau de ΔK , car elle dépend de la concentration en hydrogène imposée en fond de fissure, qui dépend elle-même de la pression d' H_2 , fixée à 9 MPa. Ensuite, on peut observer que pour le niveau de ΔK le plus élevé (20 $\text{MPa}\sqrt{m}$), la contribution de l'hydrogène piégé est plus importante que pour un ΔK de 10 $\text{MPa}\sqrt{m}$. Cette contribution plus élevée de l'hydrogène piégé entraîne un taux de recouvrement θ plus élevé en fond de fissure. Ce phénomène est cohérent avec les travaux de Sofronis et McMeeking [13], qui ont montré qu'avec l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène, une augmentation de la vitesse du chargement a pour effet

d'augmenter la contribution de l'hydrogène piégé. En ce qui concerne la distance de pénétration de l'hydrogène dans le matériau, pour le niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$, l'hydrogène affecte une distance d'environ deux éléments en fond de fissure, soit $4 \mu m$. En revanche, seul l'élément cohésif situé en fond de fissure est affecté significativement par l'hydrogène pour le ΔK plus élevé de $20 \text{ MPa}\sqrt{m}$. On peut expliquer cette différence en comparant les vitesses de propagation aux deux niveaux de ΔK . A la fréquence de chargement cyclique de 20 Hz, sous une pression d'hydrogène de 9 MPa et pour un ΔK de $20 \text{ MPa}\sqrt{m}$, la fissure se propage à la vitesse de $0,313 \mu m/\text{cycle}$ (cf. figure 9.2), ce qui correspond à une vitesse de $6,26 \mu m/s$. Cette vitesse, environ huit fois plus élevée que la vitesse de propagation pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ à fréquence et pression d' H_2 identiques ($0,74 \mu m/s$, cf. paragraphe précédent), laisse encore moins de temps à l'hydrogène pour diffuser par voie interstitielle que pour un ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$. En conséquence, seul l'élément cohésif en fond de fissure est affecté par l'hydrogène. Ainsi, on peut conclure que plus le niveau de ΔK est élevé, plus la contribution de l'hydrogène piégé dans les dislocations est importante. En outre, pour la fréquence élevée de 20 Hz, un niveau plus élevé de ΔK entraîne une vitesse de propagation de fissure de fatigue plus rapide, ce qui diminue la zone de diffusion interstitielle de l'hydrogène absorbé en pointe de fissure, limitée au premier élément cohésif non rompu.

Jusqu'à maintenant, nous nous sommes intéressés à l'effet de l'hydrogène à haute fréquence de chargement cyclique. Nous allons maintenant étudier la capacité du modèle à prédire les effets de fréquence.

9.3.3 Influence de la fréquence du chargement cyclique

Rappelons que la campagne expérimentale de fissuration de fatigue sous H_2 sur l'acier inoxydable martensitique 15-5PH a montré qu'une diminution de la fréquence du chargement cyclique entraîne une augmentation de la vitesse de propagation de fissure (cf. chapitre 5). Pour étudier l'effet d'une diminution de la fréquence cyclique à pression d' H_2 et niveau de ΔK fixés, une simulation de propagation de fissure de fatigue a été réalisée pour une fréquence de chargement cyclique de 0,2 Hz pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ et une pression d'hydrogène gazeux de 0,09 MPa. Pour cause de divergence numérique, la vitesse de propagation de fissure n'a pas pu être relevée. Malgré tout, l'étude des profils du taux de recouvrement θ peut permettre de comprendre l'effet d'une diminution de la fréquence sur la diffusion de l'hydrogène en pointe de fissure. La figure 9.5 présente les profils du taux de recouvrement en hydrogène θ le long du trajet de fissure, calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , pour deux fréquences de chargement cyclique (0,2 et 20 Hz) pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{m}$ et une pression d'hydrogène gazeux de 0,09 MPa. Ces profils correspondent à une longueur de fissure de $30 \mu m$, ce qui correspond à 142 cycles de

chargement pour la fréquence de 0,2 Hz et à 250 cycles pour la simulation à haute fréquence (20 Hz).

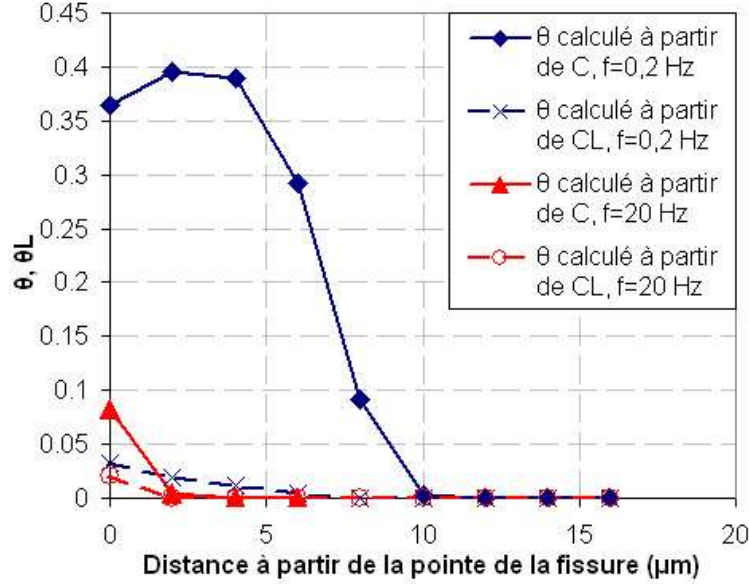


FIGURE 9.5 – Evolution du taux de recouvrement en hydrogène θ , calculé à partir de la concentration en hydrogène totale C et à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L , pour deux fréquences de chargement cyclique (0,2 et 20 Hz) pour un niveau de ΔK de $10 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ et une pression d' H_2 de 0,09 MPa, en fonction de la distance à partir du fond de fissure. Les profils sont comparés pour une même longueur de fissure ($30 \mu\text{m}$), ce qui correspond à 142 cycles de chargement pour la fréquence de 0,2 Hz et à 250 cycles pour la simulation à haute fréquence (20 Hz).

La figure 9.5 révèle qu'à la fréquence de 0,2 Hz, la zone affectée par l'hydrogène est plus grande ($10 \mu\text{m}$) qu'à la fréquence de 20 Hz (taille d'un élément, soit $2 \mu\text{m}$). Cette plus grande distance de pénétration de l'hydrogène résulte du temps plus long dont dispose l'hydrogène pour diffuser par voie interstitielle dans le matériau. Dans le chapitre 5, la distance de pénétration de l'hydrogène dans le matériau par diffusion interstitielle en fonction de la fréquence du chargement a été évaluée par la relation 5.2. Pour la fréquence de 20 Hz et en supposant un coefficient de diffusion de l'hydrogène de $10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ [25,28], cette formule donne une distance de pénétration de l'hydrogène dans le matériau de $0,63 \mu\text{m}$. Pour la faible fréquence de 0,2 Hz, la distance de pénétration de l'hydrogène est évaluée à $6,3 \mu\text{m}$. On retrouve ces ordres de grandeur dans nos simulations. Par ailleurs, on remarque que, dans la zone affectée par l'hydrogène, le taux de recouvrement θ est beaucoup plus élevé dans la zone affectée pour la faible fréquence de

chargement cyclique que pour la fréquence de 20 Hz. De plus, la contribution de l'hydrogène piégé est déterminante dans le calcul du taux de recouvrement. En revanche, il semble que, même pour la fréquence de 0,2 Hz, le terme faisant intervenir le gradient de contrainte hydrostatique ne joue pas un rôle significatif dans la diffusion de l'hydrogène. En effet, la forme du profil du taux de recouvrement calculé à partir de la concentration en hydrogène réticulaire C_L pour la fréquence de 0,2 Hz (cf. figure 9.5) ne révèle pas de pic de concentration, qui correspondrait à une zone de forte contrainte hydrostatique. En se souvenant de la figure 7.4, on avait montré que, sous chargement monotone, le pic de concentration en hydrogène réticulaire était situé à environ 10-15 μm du fond de fissure initial, c'est-à-dire en-dehors de la zone affectée par l'hydrogène sous chargement cyclique à basse fréquence (0,2 Hz) (cf. figure 9.5). Par conséquent, pour la fréquence de 0,2 Hz et le niveau de pression (0,09 MPa) et de ΔK (10 MPa $\sqrt{m}$) étudiés, il semblerait que le terme faisant intervenir le gradient de contrainte hydrostatique n'apporte aucune contribution.

Pour conclure, pour la faible fréquence de chargement cyclique (0,2 Hz), on observe que l'hydrogène dispose de plus de temps pour diffuser par voie interstitielle, ce qui implique que la zone affectée par l'hydrogène est plus étendue (10 μm). De plus, l'étude des rôles des deux populations d'hydrogène permet de mettre en évidence, par le truchement de la relation d'équilibre d'Oriani [15], la forte contribution de l'hydrogène piégé. Le fait que l'hydrogène affecte une zone en fond de fissure plus étendue à faible fréquence laisse penser que le modèle permet de prédire un effet de la fréquence sur les vitesses de propagation.

9.4 Bilan : capacités et limitations du modèle

Pour conclure, rappelons les différents ingrédients du modèle que nous avons construit. Un modèle de zone cohésive, avec une loi de traction-séparation adaptée aux chargements cycliques et influencée par l'hydrogène, modélise le principe du mécanisme HEDE (diminution de l'énergie de cohésion du réseau métallique en présence d'hydrogène). La diffusion de l'hydrogène dans le cœur du matériau se fait uniquement par diffusion interstitielle ; elle est sensible à la contrainte hydrostatique et l'hydrogène peut être piégé dans les dislocations (on fait l'hypothèse d'un équilibre local entre l'hydrogène réticulaire et l'hydrogène piégé). Enfin, le comportement cyclique du cœur du matériau est régi par une loi élastoplastique, supposée insensible à la présence d'hydrogène.

Tout d'abord, le modèle de zone cohésive avec la TSL développée permet de prédire qualitativement l'influence néfaste de l'hydrogène sur les vitesses de propagation des fissures de fatigue, ce qui valide l'implémentation du mécanisme HEDE. Une augmentation des vitesses de propagation, d'un rapport 2,5 et indépendante de la pression d' H_2 entre 0,09 et 9 MPa, a été observée pour des niveaux de ΔK initiaux de 10 à 20 MPa $\sqrt{m}$. Ces observations sont cohé-

rentes avec l'effet de l'hydrogène à faible pression (0,09 MPa) sur les vitesses de propagation expérimentales, mais ne permet pas de rendre compte de la perte drastique de résistance à la fissuration observée à haute pression. Ensuite, on a observé qu'à haute fréquence de chargement cyclique (20 Hz), et pour différents niveaux de ΔK (10, 15 et 20 MPa $\sqrt{m}$) et de pression (0,09 et 9 MPa d' H_2), l'hydrogène n'a le temps de diffuser par les sites interstitiels que sur une distance d'environ 2 à 4 μm en pointe de fissure. Pour une fréquence de chargement 100 fois plus faible (0,2 Hz), l'hydrogène affecte une zone d'environ 10 μm le long du trajet de fissure, ce qui laisse supposer des vitesses de propagation plus élevées à faible fréquence. Par ailleurs, le modèle ne prédit pas d'influence du niveau de pression d'hydrogène gazeux sur les vitesses de propagation de fissure de fatigue à haute fréquence pour les niveaux de ΔK étudiés ; cela suggère que l'augmentation brutale des vitesses de propagation à haute pression (9 MPa) n'est pas directement liée à la concentration d'hydrogène en surface, mais semble dépendre de la distance de pénétration de l'hydrogène dans le matériau. En outre, le modèle est incapable de prédire les vitesses de propagation de fissure très élevées relevées expérimentalement pour des niveaux de ΔK supérieurs à 6 MPa $\sqrt{m}$ pour une pression de 9 MPa d' H_2 . Cette observation indique que les ingrédients du modèle (notamment la diffusion interstitielle de l'hydrogène) ne sont pas suffisants pour expliquer cette augmentation brutale de vitesse, ce qui appuie l'idée de l'existence d'un autre mécanisme de transport de l'hydrogène. Il pourrait s'agir du transport par les dislocations mobiles. La modélisation à une échelle plus fine de la théorie HELP, couplée avec le transport de l'hydrogène par les dislocations mobiles, pourrait permettre d'étudier les distances de pénétration de l'hydrogène par ce phénomène pour les forts niveaux de ΔK et les fortes pressions d' H_2 . Les contributions respectives de la diffusion interstitielle et du transport par les dislocations mobiles de l'hydrogène pourraient alors être examinées, en fonction du niveau de ΔK , du niveau de pression d'hydrogène gazeux et de la fréquence du chargement cyclique.

Conclusion et perspectives

AFIN DE FAIRE LE BILAN du travail réalisé, commençons par rappeler le cahier des charges de cette étude. Une campagne expérimentale menée à l'Institut PPRIME a montré l'effet néfaste de l'hydrogène gazeux sur la résistance à la fissuration en fatigue d'un acier inoxydable martensitique 15-5PH. L'étude expérimentale suggère, en accord avec le consensus se dégageant de la littérature actuelle, que cette perte de résistance à la fissuration résulte de l'action conjointe de plusieurs mécanismes proposés pour expliquer la fragilisation par l'hydrogène (HEDE, HELP et AIDE dans nos conditions expérimentales). L'examen des surfaces de rupture montre une influence de la pression d'hydrogène, de la fréquence du chargement cyclique et du niveau de ΔK sur le mode de rupture (intergranulaire, quasi-clivage). L'effet aggravant de l'augmentation de la pression d'hydrogène, de l'augmentation du niveau de ΔK et d'une baisse de la fréquence de chargement sur la tenue en fatigue de l'acier inoxydable 15-5PH met en évidence la nécessité de disposer d'un outil permettant d'analyser la compétition entre les cinétiques de propagation des fissures sous chargement cyclique et de diffusion de l'hydrogène en fond de fissure (par diffusion réticulaire influencée par la contrainte hydrostatique, ou transport par les dislocations mobiles) et son piégeage. Ces observations révèlent le besoin de modéliser ces différents phénomènes, afin de mieux comprendre leurs interactions.

Le modèle construit utilise les ingrédients suivants. Une approche de la zone cohésive avec une loi de traction-séparation spécifique est utilisée pour décrire l'endommagement progressif du matériau sous chargement cyclique. En outre, les contraintes cohésives sont réduites en présence d'hydrogène, en accord avec la théorie HEDE, à travers l'influence du taux de recouvrement en hydrogène sur l'énergie de séparation. L'absorption de l'hydrogène en fond de fissure est représentée par une condition aux limites de concentration d'hydrogène constante, calculée à partir de la pression d' H_2 et de la température par la loi de Sieverts. La diffusion réticulaire de l'hydrogène dans le matériau est représentée par une équation de diffusion couplée, qui distingue deux populations d'hydrogène (réticulaire et piégé), et qui suppose que la diffusion de l'hydrogène dissous est influencée par le champ de contrainte hydrostatique. Les populations d'hydrogène piégé et réticulaire sont supposées être localement en équilibre. De plus, seul le piégeage de l'hydrogène dans les dislocations est pris en compte. Ces différents ingrédients ont été implémentés dans Abaqus à l'aide de plusieurs sous-routines Fortran.

Une première étude a permis de valider qualitativement l'implémentation de l'équation de diffusion couplée de l'hydrogène sous chargement statique (cf. chapitre 6). L'influence du champ de contrainte hydrostatique et du niveau de déformation plastique sur les concentrations d'hydrogène piégé et diffusible a été comparée à la littérature. Ensuite, on a simulé la propagation de fissure sous chargement monotone en présence d'hydrogène (cf. chapitre 7), dans un acier dont le comportement est modélisé par une loi de comportement élastoplastique, montrant ainsi que la loi de traction-séparation développée permet de décrire l'avancée d'une fissure sous char-

gement monotone, et que la présence d'hydrogène entraîne comme attendu une dégradation de la résistance à la fissuration du matériau modélisé. Par ailleurs, en accord avec les résultats de la littérature, une vitesse de chargement monotone plus lente permet à l'hydrogène de pénétrer plus en profondeur dans le matériau, entraînant une résistance à la fissuration plus faible. La contribution des deux populations d'hydrogène a été étudiée ; il apparaît que la concentration d'hydrogène piégé ne peut être négligée par rapport à la concentration d'hydrogène diffusible pour les fortes vitesses de chargement. Ainsi, le choix de déterminer le taux de recouvrement en hydrogène à partir de la concentration en hydrogène réticulaire ou à partir de la concentration totale en hydrogène est déterminant.

Ensuite, le modèle construit a été testé sous chargement cyclique en l'absence d'hydrogène (cf. chapitre 8). Des simulations de propagation de fissure de fatigue ont permis de montrer l'aptitude de la loi de traction-séparation développée à décrire l'endommagement progressif du matériau sous chargement cyclique dans le domaine de vitesses de propagation moyennes et rapides. L'endommagement cyclique a été restreint à la zone plastifiée cyclique. Les paramètres de la loi de traction-séparation ont été identifiés à partir d'un couple $(\Delta K, da/dN)$ de la courbe expérimentale de propagation de fissure de fatigue obtenue pour un acier inoxydable martensitique 15-5PH sous air, pour un rapport de charge R de 0,1. Ensuite, pour chaque valeur de ΔK et chaque rapport de charge R (0,1 et 0,7), une simulation a été réalisée et la vitesse de propagation de la fissure a été relevée, permettant ainsi de construire les courbes de propagation da/dN en fonction de ΔK . De plus, on a relevé une légère influence du rapport de charge sur les courbes de propagation. La comparaison des courbes de propagation simulées avec les courbes expérimentales sous air a montré que le modèle de zone cohésive avec la loi de traction-séparation développée est capable de prédire les vitesses de propagation de fatigue sous air dans l'acier 15-5PH, pour des niveaux de ΔK entre 10 et 40 $\text{MPa}\sqrt{m}$.

Enfin, le modèle a été confronté aux résultats de la campagne expérimentale sur l'acier inoxydable martensitique 15-5PH sous hydrogène gazeux. Les paramètres de la loi de traction-séparation ont été identifiés à partir des courbes de propagation expérimentales sous air. L'évolution de la longueur de fissure en fonction du nombre de cycles a été étudiée pour deux valeurs de la pression d' H_2 (0,9 bar et 90 bar), deux fréquences de chargement (0,2 Hz et 20 Hz) et différents niveaux de ΔK (10, 15 et 20 $\text{MPa}\sqrt{m}$). On a montré que le modèle de zone cohésive avec la TSL développée permet de prédire qualitativement l'influence néfaste de l'hydrogène sur les vitesses de propagation des fissures de fatigue, ce qui valide l'implémentation du mécanisme HEDE. Une augmentation des vitesses de propagation, d'un rapport 2,5 par rapport à l'absence d' H_2 et indépendante de la pression d' H_2 entre 0,09 et 9 MPa, a été observée pour des niveaux de ΔK de 10 à 20 $\text{MPa}\sqrt{m}$. Ces observations sont cohérentes avec l'effet de l'hydrogène à faible pression (0,09 MPa) sur les vitesses de propagation expérimentales. Ensuite, on a observé qu'à

haute fréquence de chargement cyclique, la distance de pénétration de l'hydrogène par diffusion interstitielle dans la zone en fond de fissure est d'environ $2\ \mu m$ (soit la taille d'un élément). Pour une fréquence de chargement 100 fois plus faible (0,2 Hz), l'hydrogène affecte la zone cohésive sur une longueur d'environ $10\ \mu m$ le long du trajet de fissure, ce qui laisse supposer des vitesses de propagation plus élevées à faible fréquence (des simulations à faible fréquence devront le confirmer). Par contre, le modèle ne peut pas prédire les vitesses de propagation de fissure très élevées relevées expérimentalement pour des niveaux de ΔK supérieurs à $6\ \text{MPa}\sqrt{m}$ pour une pression de 9 MPa d' H_2 . Cette observation indique que les ingrédients du modèle (notamment la diffusion interstitielle de l'hydrogène) ne sont pas suffisants pour expliquer cette augmentation brutale de vitesse, ce qui appuie l'idée de l'existence d'un autre mécanisme de transport de l'hydrogène et/ou d'endommagement. Il pourrait s'agir du transport par les dislocations mobiles.

Le travail présenté ici constitue le premier jalon de l'Institut PPRIME dans ce domaine. 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, par exemple via la dépendance de la limite d'élasticité vis-à-vis de la concentration d'hydrogène, en surface (AIDE) ou dans le volume du matériau (HELP) [58]. Pour cela, il sera sans doute nécessaire de considérer une échelle de modélisation plus fine de la déformation en pointe de fissure (plasticité cristalline, approche de la Dynamique des Dislocations Discrètes, au moins sur des microstructures simples). Des simulations pourraient alors permettre d'étudier la compétition entre les mécanismes HELP et HEDE, en fonction de la pression d'hydrogène et de la fréquence du chargement cyclique. En outre, on pourrait se diriger vers un modèle multi-échelles, à l'instar de [171], comprenant plusieurs niveaux de modélisation : calculs atomistiques, approche de la Dynamique des Dislocations Discrètes, plasticité cristalline, et modèle de type « Mécanique des Milieux Continus ».

En ce qui concerne la loi de traction-séparation développée, sa formulation pourra être améliorée ; par exemple, l'endommagement cyclique des éléments cohésifs pourrait être déterminé à partir de la déformation plastique du cœur du matériau, ce qui permettrait de lier l'énergie de création de surface (dissipée dans les éléments cohésifs) et les énergies mises en jeu dans le cœur du matériau. Bouvard et al [23] ont également évoqué cette perspective. Par ailleurs, à l'instar des travaux de Laverne et al [109], il serait intéressant d'étudier la capacité du modèle de zone cohésive avec la TSL développée à prédire les effets de surcharge.

Concernant l'étude expérimentale, des essais de fissuration de fatigue sur l'acier inoxydable martensitique 15-5PH devront être réalisés sous vide, afin de permettre l'identification des pa-

ramètres de la loi de traction-séparation à partir des courbes de propagation en environnement inerte. Il serait également intéressant de réaliser un essai de fissuration sous chargement cyclique en hydrogène gazeux en diminuant et en maintenant une fréquence basse (typiquement 0,2 Hz ou moins) pendant une durée plus longue, afin d'étudier si la vitesse de propagation da/dN atteint un plateau de saturation.

Annexes

Annexe A

Détermination de l'intervalle de définition de l'exposant n_c

CETTE ANNEXE présente les étapes de calcul justifiant du choix de l'intervalle $[1,3[$ pour l'exposant n_c . Pour justifier l'intervalle de définition de l'exposant n_c , nous allons montrer que pour n_c en-dehors de l'intervalle $[1,3[$, la contrainte cohésive normale T_n ne tend pas vers 0 lorsque l'ouverture normale δ_n imposée tend vers l'infini.

Supposons que n_c est un exposant réel strictement positif. Plaçons-nous dans le cas d'un chargement de traction monotone, c'est-à-dire pour lequel $\dot{\delta}_n > 0$ et $\delta_n > 0$ à chaque instant. Lorsque le seuil cyclique $f_c = 0$ est atteint, l'évolution de D_c est déterminée par la relation 3.8. Cette relation peut être écrite :

$$\begin{aligned}\dot{D}_c &= \frac{k_n}{m_c} (1 - D_c)^{n_c} \dot{\delta}_n \frac{\delta_n}{\delta_0} \\ \Leftrightarrow \frac{\dot{D}_c}{(1 - D_c)^{n_c}} &= \frac{k_n}{m_c} \dot{\delta}_n \frac{\delta_n}{\delta_0} \\ \Leftrightarrow \int_0^t \frac{\dot{D}_c}{(1 - D_c)^{n_c}} d\tau &= \int_0^t \frac{k_n}{m_c} \dot{\delta}_n \frac{\delta_n}{\delta_0} d\tau.\end{aligned}$$

Si $n_c = 1$, on obtient après intégration et application des conditions aux limites la relation :

$$1 - D_c = \exp \left(-\frac{k_n}{2m_c \delta_0} \delta_n^2 \right). \quad (\text{A.1})$$

Lorsque n_c est différent de 1, on obtient la relation :

$$1 - D_c = \left[\frac{k_n(n_c - 1)}{2m_c} \frac{\delta_n^2}{\delta_0} + 1 \right]^{1/(1-n_c)}. \quad (\text{A.2})$$

En tenant compte des relations A.1 et A.2, et en supposant que la variable D_c est la plus grande des deux variables D_c et D_m tout au long du chargement, l'expression de la contrainte cohésive normale (cf. équation 3.3a) devient :

$$\begin{aligned} T_n &= k_n(1 - D_c)\delta_n \\ \Leftrightarrow T_n &= k_n \exp\left(-\frac{k_n}{2m_c\delta_0}\delta_n^2\right)\delta_n, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

dans le cas où $n_c = 1$, et

$$T_n = k_n \left[\frac{k_n(n_c - 1)}{2m_c} \frac{\delta_n^2}{\delta_0} + 1 \right]^{1/(1-n_c)} \delta_n \quad (\text{A.4})$$

dans le cas où $n_c \neq 1$. La limite de T_n lorsque δ_n tend vers l'infini peut alors être calculée. Si $n_c = 1$, alors :

$$\begin{aligned} \lim_{\delta_n \rightarrow \infty} T_n &= \lim_{\delta_n \rightarrow \infty} k_n \exp\left(-\frac{k_n}{2m_c\delta_0}\delta_n^2\right)\delta_n \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

La contrainte cohésive normale tend bien vers 0 lorsque l'ouverture normale tend vers l'infini. Si $n_c \neq 1$, on obtient :

$$\begin{aligned} \lim_{\delta_n \rightarrow \infty} T_n &= \lim_{\delta_n \rightarrow \infty} k_n \left[\frac{k_n(n_c - 1)}{2m_c} \frac{\delta_n^2}{\delta_0} + 1 \right]^{1/(1-n_c)} \delta_n \\ &\simeq \lim_{\delta_n \rightarrow \infty} \left(\frac{k_n(n_c - 1)}{2m_c\delta_0} \right)^{1/(1-n_c)} \delta_n^{\frac{3-n_c}{1-n_c}}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

L'étude de la limite de T_n montre qu'une valeur de l'exposant n_c strictement inférieure à 1 ou supérieure ou égale à 3 implique que la contrainte cohésive T_n ne tend pas vers 0 lorsque l'ouverture normale tend vers l'infini ; afin d'éviter cette situation, la valeur de l'exposant doit être restreinte à l'intervalle $[1,3[$.

Annexe B

Calcul de l'énergie de séparation



ÉNERGIE DE SÉPARATION E_{rupt} , c'est-à-dire l'énergie dissipée par unité de surface par endommagement à la rupture de l'élément, est définie par :

$$E_{rupt} = \int_0^\infty Y \dot{D} d\tau. \quad (\text{B.1})$$

En pratique, la TSL est « limitée » par une enveloppe d'allure exponentielle, due à l'évolution de l'endommagement D_m (cf. figure 3.3). Par conséquent, l'énergie de séparation est au maximum égale à l'aire sous cette enveloppe, que l'on peut appeler énergie de séparation monotone ($E_{rupt,m}$), calculée par :

$$E_{rupt,m} = \int_0^\infty Y \dot{D}_m d\tau. \quad (\text{B.2})$$

Par intégration par parties, on montre que cette énergie peut être exprimée par la relation :

$$E_{rupt,m} = \int_0^\infty \dot{Y}(1 - D_m) d\tau. \quad (\text{B.3})$$

Pour simplifier les calculs, calculons l'énergie dissipée au cours d'un chargement monotone de traction. L'énergie de séparation $E_{rupt,m}$ peut être décomposée comme :

$$\begin{aligned} E_{rupt,m} &= \int_0^{t_1} \dot{Y} d\tau + \int_{t_1}^\infty \dot{Y}(1 - D_m) d\tau \\ &= C_m + \int_{t_1}^\infty \dot{Y}(1 - D_m) d\tau, \end{aligned}$$

où t_1 représente l'instant où la variable D_m commence à évoluer, ce qui correspond dans ce cas au début de l'endommagement de l'élément. Ici, $Y = Y_{max}$ à tout instant, et en décomposant le produit $\dot{Y}(1 - D_m)$ en $\dot{Y}(1 - D_m)^{n_m} \times (1 - D_m)^{1-n_m}$, on reconnaît la forme de la fonction seuil

f_m (cf. relation 3.9). Dans le cas où $n_m \neq 2$, on trouve :

$$\begin{aligned} E_{rupt,m} &= C_m + \int_{t_1}^{\infty} m_m \dot{D}_m (1 - D_m)^{1-n_m} d\tau \\ &= C_m + \frac{m_m}{n_m - 2} (1 - D_m)^{2-n_m} \Big|_{t_1}^{\infty}. \end{aligned}$$

Deux cas de figure se présentent. Si $1 \leq n_m < 2$, l'énergie de séparation est finie, et vaut :

$$E_{rupt,m} = C_m + \frac{m_m}{2 - n_m}. \quad (\text{B.4})$$

Pour les valeurs de n_m comprises entre dans l'intervalle $[2,3]$, l'énergie de séparation est infinie.

Dans le cas particulier où $n_m = 2$, l'énergie de séparation vaut :

$$\begin{aligned} E_{rupt,m} &= C_m + \int_{t_1}^{\infty} m_m \dot{D}_m \frac{1}{1 - D_m} d\tau \\ &= C_m + m_m \ln(1 - D_m) \Big|_{t_1}^{\infty}. \end{aligned}$$

Après calcul, on trouve que l'énergie de séparation tend vers l'infini lorsque le temps, et donc l'ouverture normale δ_n , tendent vers l'infini.

Cette étude a permis de déterminer l'expression analytique de l'énergie de séparation sous chargement monotone, représentée par l'aire sous la TSL, pour les valeurs de n_m comprises dans l'intervalle $[1,2[$. Dès que l'exposant est supérieur ou égal à 2, l'énergie de séparation tend vers l'infini ; en pratique, l'élément cohésif rompt lorsque la valeur de la variable d'endommagement atteint une valeur proche mais différente de 1. Un raisonnement analogue peut être mené dans le cas où seule la variable D_c évolue.

Annexe C

Calcul de l'épaisseur des éléments cohésifs en contraintes planes

OUS HYPOTHÈSE D'INCOMPRESSIBILITÉ, la déformation hors-plan peut être calculée à partir des déformations dans le plan ϵ_{11} et ϵ_{22} de la manière suivante :

$$\epsilon_{33} \simeq -(\epsilon_{11} + \epsilon_{22}) \quad (\text{C.1})$$

La moyenne des déformations hors-plan est ensuite calculée sur les quatre points d'intégration des éléments du bulk dans la subroutine USDFLD. Cette valeur est ensuite stockée dans une variable commune à toutes les subroutines du modèle, pour être utilisée dans la subroutine UEL pour l'élément cohésif. Une subroutine (nommée CONNECTIVITY), développée à partir du fichier d'entrée du modèle Abaqus (fichier INP), permet de connaître le numéro de l'élément cohésif adjacent à un élément de « bulk », s'il existe, pour un maillage donné.

Annexe D

Résolution numérique du modèle d'écrouissage cinématique linéaire dans la subroutine UMAT

ANS CETTE ANNEXE, on présente la méthode de résolution du système d'équations pour le modèle de plasticité de Von Mises avec un écrouissage cinématique non-linéaire, présenté dans la section 4.2.3 de la partie II. Cet algorithme de résolution est ensuite implémenté dans Abaqus par une subroutine utilisateur UMAT, écrite en Fortran.

Discretisation du système d'équations

Soit un intervalle de temps $[0, T] \subset \mathbb{R}$, et t_n et t_{n+1} deux instants, tels que $t_{n+1} > t_n$. Dans la suite, l'indice $_n$ indiquera que la quantité est calculée à l'instant t_n , tandis que l'omission d'indice signifiera que la quantité est calculée à l'instant t_{n+1} . Dans un calcul éléments finis, connaissant la solution au temps t_n et l'incrément de déformation, il faut déterminer la solution du système d'équations 4.16 à 4.24 à l'instant suivant t_{n+1} .

Pour alléger les notations, nous noterons :

$$\bar{n} = \frac{\bar{\bar{\Sigma}}}{\sqrt{\frac{3}{2} \|\bar{\bar{\Sigma}}\|}}. \quad (D.1)$$

En utilisant un schéma de résolution implicite par souci de stabilité [172], et en se souvenant de la relation 4.18, on peut discrétiser les équations 4.22 et 4.23 sous la forme :

$$\bar{\bar{\epsilon}}_p = \bar{\bar{\epsilon}}_{p,n} + \frac{3}{2} \Delta \lambda \bar{n} \quad (D.2)$$

$$\bar{\bar{X}} = T^\lambda \bar{\bar{X}}_n + C_{cin} T^\lambda \Delta \lambda \bar{n}, \quad (D.3)$$

où $\Delta\lambda$ représente la variation du multiplicateur plastique λ au cours de l'incrément de temps $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, et

$$T^\lambda = \frac{1}{1 + \gamma\Delta\lambda}.$$

En remplaçant le tenseur $\bar{\bar{\epsilon}}_p$ dans l'équation 4.17 par son expression dans l'équation D.2, on obtient la relation suivante :

$$\bar{\bar{\sigma}} = \mathbf{C} : (\bar{\bar{\epsilon}} - \bar{\bar{\epsilon}}_{p,n}) - \mathbf{C} : \frac{3}{2}\Delta\lambda \bar{\bar{n}}. \quad (\text{D.4})$$

En calculant le déviateur de la relation précédente, on trouve :

$$\bar{\bar{s}} = 2G(\bar{\bar{e}} - \bar{\bar{e}}_{p,n}) - 3G\Delta\lambda \bar{\bar{n}}, \quad (\text{D.5})$$

où $\bar{\bar{e}}$ et $\bar{\bar{e}}_p$ sont les déviateurs des tenseurs des déformations $\bar{\bar{\epsilon}}$ et $\bar{\bar{\epsilon}}_p$.

Ensuite, en soustrayant l'équation D.3 à l'équation D.5, on obtient :

$$\bar{\bar{\Sigma}} = \bar{\bar{s}} - \bar{\bar{X}} = 2G(\bar{\bar{e}} - \bar{\bar{e}}_{p,n}) - T^\lambda \bar{\bar{X}}_n - U^\lambda \bar{\bar{n}}, \quad (\text{D.6})$$

où

$$U^\lambda = [3G + C_{cin}T^\lambda]\Delta\lambda.$$

Dans les relations précédentes, G est le module de Coulomb du matériau, et $\Delta\lambda$ est une inconnue, déterminée à l'aide d'une méthode de type prédicteur-correcteur.

Algorithme de résolution

Initialement proposé par Maenchen et Sack [173] et Wilkins [174], puis étudié par Nagtegaal [175] et Simo et Taylor [176], et Simo et Hughes [177], l'algorithme prédicteur-correcteur est constitué de deux étapes. Premièrement, on calcule la solution purement élastique à l'instant t_{n+1} . Ensuite, si la solution élastique viole la condition $f(\bar{\bar{\Sigma}}) \leq 0$, le prédicteur élastique est corrigé par une « correction plastique ».

Décrivons ces deux étapes plus en détail.

1. Prédicteur élastique

Faisons l'hypothèse que la déformation plastique n'évolue pas dans l'intervalle $[t_n, t_{n+1}]$, et notons avec l'exposant TR les valeurs des quantités prédites. On a :

$$\Delta\lambda^{TR} = 0 \quad (\text{D.7})$$

$$\bar{\bar{\epsilon}}_p^{TR} = \bar{\bar{\epsilon}}_{p,n} \quad (\text{D.8})$$

$$\bar{\bar{X}}^{TR} = \bar{\bar{X}}_n \quad (\text{D.9})$$

$$\bar{\bar{\sigma}}^{TR} = \mathbf{C} : (\bar{\bar{\epsilon}} - \bar{\bar{\epsilon}}_{p,n}) \quad (\text{D.10})$$

$$\bar{\bar{\Sigma}}^{TR} = \bar{\bar{s}}^{TR} - \bar{\bar{X}}^{TR} = \bar{\bar{s}}^{TR} - \bar{\bar{X}}_n \quad (\text{D.11})$$

Si la solution ainsi trouvée vérifie la condition $f(\bar{\bar{\Sigma}}) \leq 0$, alors la solution élastique est la solution au temps t_{n+1} , et la deuxième étape de l'algorithme n'est pas nécessaire. Dans le cas contraire, une correction plastique est nécessaire.

2. Correcteur plastique

Dans cette étape, on va s'assurer que la relation $f(\bar{\bar{\Sigma}}) = 0$ est vérifiée, et déterminer l'incrément $\Delta\lambda$ du multiplicateur plastique. En notant $\Delta\bar{\bar{\epsilon}}^{TR}$ l'incrément de déformation imposé pour l'incrément de temps courant, le système constitué des équations D.2 à D.6 peut être réécrit en fonction des quantités calculées pendant l'étape du prédicteur élastique :

$$\bar{\bar{\epsilon}}_p = \bar{\bar{\epsilon}}_p^{TR} + \frac{3}{2}\Delta\lambda \bar{\bar{n}} \quad (\text{D.12})$$

$$\bar{\bar{X}} = T^\lambda \bar{\bar{X}}^{TR} + C_{cin} T^\lambda \Delta\lambda \bar{\bar{n}} \quad (\text{D.13})$$

$$\bar{\bar{\sigma}} = \bar{\bar{\sigma}}^{TR} + \mathbf{C} : (\Delta\bar{\bar{\epsilon}}^{TR} - \frac{3}{2}\Delta\lambda \bar{\bar{n}}) \quad (\text{D.14})$$

$$\bar{\bar{s}} = \bar{\bar{s}}^{TR} - 3G\Delta\lambda \bar{\bar{n}} \quad (\text{D.15})$$

$$\bar{\bar{\Sigma}} = \bar{\bar{s}}^{TR} - T^\lambda \bar{\bar{X}}^{TR} - U^\lambda \bar{\bar{n}} \quad (\text{D.16})$$

On peut remarquer que le tenseur $\bar{\bar{\Sigma}}$ peut être écrit sous la forme :

$$\bar{\bar{\Sigma}} = \bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda - U^\lambda \bar{\bar{n}}, \quad (\text{D.17})$$

où :

$$\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda = \bar{\bar{s}}^{TR} - T^\lambda \bar{\bar{X}}^{TR}. \quad (\text{D.18})$$

Il est à noter que le tenseur $\bar{\bar{\Sigma}}$ est orienté suivant $\bar{\bar{n}}$ (cf. relation D.1). Ainsi, l'équation D.17 indique que $\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda$ est également orienté suivant $\bar{\bar{n}}$, c'est-à-dire que $\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda = \|\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda\| \bar{\bar{n}}$. On peut ainsi écrire la relation suivante entre les normes des tenseurs $\bar{\bar{\Sigma}}$ et $\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda$:

$$\|\bar{\bar{\Sigma}}\| = \|\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda\| - U^\lambda. \quad (\text{D.19})$$

Il est possible de calculer $\Delta\lambda$ à partir d'une unique équation scalaire. En se souvenant de la forme de la surface de charge (cf. équation 4.20), la relation D.19 peut se réécrire sous la forme :

$$\|\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda\| - U^\lambda - \sigma'_y = 0, \quad (\text{D.20})$$

où $\sigma'_y = \frac{2}{3}\sigma_y$. L'expression du tenseur $\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda$ (cf. relation D.18) permet de développer la relation D.20 :

$$\begin{aligned} \|\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda\| &= [\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda : \bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda]^{1/2} \\ &= \left[(\bar{\bar{s}}^{TR} - T^\lambda \bar{\bar{X}}^{TR}) : (\bar{\bar{s}}^{TR} - T^\lambda \bar{\bar{X}}^{TR}) \right]^{1/2} \\ &= \left[(\bar{\bar{s}}^{TR} : \bar{\bar{s}}^{TR}) - 2T^\lambda (\bar{\bar{X}}^{TR} : \bar{\bar{s}}^{TR}) + (T^\lambda)^2 (\bar{\bar{X}}^{TR} : \bar{\bar{X}}^{TR}) \right]^{1/2} \\ &= \left[S_{ss} - 2S_{sX}T^\lambda + S_{XX}(T^\lambda)^2 \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

avec :

$$\begin{cases} S_{ss} = \bar{\bar{s}}^{TR} : \bar{\bar{s}}^{TR} \\ S_{sX} = \bar{\bar{s}}^{TR} : \bar{\bar{X}}^{TR} \\ S_{XX} = \bar{\bar{X}}^{TR} : \bar{\bar{X}}^{TR} \end{cases} \quad (\text{D.22})$$

L'équation D.20, élevée au carré, s'écrit alors :

$$\|\bar{\bar{\Sigma}}_A^\lambda\|^2 - (U^\lambda + \sigma'_y)^2 = 0 \quad (\text{D.23})$$

$$\Leftrightarrow \left[S_{ss} - 2S_{sX}T^\lambda + S_{XX}(T^\lambda)^2 \right] - (U^\lambda + \sigma'_y)^2 = 0. \quad (\text{D.24})$$

Après calcul [132], l'équation précédente s'écrit sous la forme d'un polynôme de degré 4 en $\Delta\lambda$:

$$C_1(\Delta\lambda)^4 + C_2(\Delta\lambda)^3 + C_3(\Delta\lambda)^2 + C_4\Delta\lambda + C_5 = 0, \quad (\text{D.25})$$

avec

$$\begin{cases} C_1 = 4G^2\gamma^2 \\ C_2 = 8G^2\gamma + 4G\gamma C_{cin} + 4\sigma'_y G\gamma^2 \\ C_3 = \gamma^2[\sigma_y'^2 - S_{ss}] + [2G + C_{cin}]^2 + 2\gamma\sigma'_y[4G + C_{cin}] \\ C_4 = 2\gamma[\sigma_y'^2 + S_{sX} - S_{ss}] + 2\sigma'_y[2G + C_{cin}] \\ C_5 = \sigma_y'^2 - S_{ss} + 2S_{sX} - S_{XX} \end{cases} \quad (\text{D.26})$$

Il s'agit maintenant de trouver les racines de ce polynôme, et de sélectionner parmi celles-ci la plus petite racine positive [132]. Pour ce faire, on utilise une succession d'algorithmes de Newton-Raphson et de divisions euclidiennes. La méthode de Newton-Raphson est une

méthode simple qui permet de déterminer une approximation d'un zéro d'une fonction f en se basant sur son développement de Taylor au premier ordre. A partir d'une estimation x_0 appartenant à l'ensemble de définition de la fonction, on construit par récurrence la suite :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

où f' désigne la dérivée de la fonction f . Dans notre cas, la fonction f est le polynôme en $\Delta\lambda$ (cf. équation D.25), continu et dérivable en tout point de $\mathbb{R}$.

L'algorithme implémenté dans l'UMAT est le suivant :

- (a) On choisit une valeur initiale positive et petite pour $\Delta\lambda$: $\Delta\lambda_0 = 10^{-3}$. On applique la méthode de Newton-Raphson au polynôme d'ordre 4 (cf. relation D.25), ce qui permet de trouver une approximation $\Delta\lambda_1$ d'une de ses racines ;
- (b) On effectue la division euclidienne du polynôme par le polynôme d'ordre 1 ($\Delta\lambda - \Delta\lambda_1$). On obtient un polynôme d'ordre 3 en $\Delta\lambda$.
- (c) On recommence les deux étapes précédentes pour le polynôme de degré 3 obtenu, ce qui permet d'obtenir une approximation $\Delta\lambda_2$ d'une seconde racine du polynôme en $\Delta\lambda$ initial. Après division euclidienne par $(\Delta\lambda - \Delta\lambda_2)$, on obtient un polynôme de degré 2.
- (d) Les racines du polynôme de degré 2 fournissent les estimations des deux dernières racines du polynôme de degré 4 en $\Delta\lambda$.
- (e) On sélectionne la plus petite racine positive parmi les estimations des racines du polynôme, déterminant ainsi l'évolution du multiplicateur plastique λ au cours de l'incrément de temps de calcul courant.

Connaissant $\Delta\lambda$, les valeurs des tenseurs $\bar{\sigma}$, $\bar{\epsilon}_p$ et $\bar{X}$ à la fin de l'incrément sont déterminées par les relations D.12 à D.16.

Bibliographie

- [1] A. BRASS, J. CHÊNE et L. COUDREUSE, « Fragilisation des aciers par l'hydrogène : étude et prévention », *Les techniques de l'ingénieur*, vol. 175, p. 1–24, 2000.
- [2] I. MORO, L. BRIOTTET, P. LEMOINE, E. ANDRIEU, C. BLANC et G. ODEMER, « Hydrogen embrittlement susceptibility of a high strength steel X80 », *Materials Science and Engineering : A*, vol. 527, no. 27-28, p. 7252–7260, 2010.
- [3] G. SCHUSTER et C. ALTSTETTER, « Fatigue of stainless steel in hydrogen », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 14, no. 10, p. 2085–2090, 1983.
- [4] Y. MURAKAMI, T. KANEZAKI, Y. MINE et S. MATSUOKA, « Hydrogen embrittlement mechanism in fatigue of austenitic stainless steels », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 39, no. 6, p. 1327–1339, 2008.
- [5] Y. DING, L. TSAY, M. CHIANG et C. CHEN, « Gaseous hydrogen embrittlement of PH 13-8 Mo steel », *Journal of Nuclear Materials*, vol. 385, no. 3, p. 538–544, 2009.
- [6] N. NANNINGA, A. SLIFKA, Y. LEVY et C. WHITE, « A review of fatigue crack growth for pipeline steels exposed to hydrogen », *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, vol. 115, no. 6, p. 437–452, 2010.
- [7] T. KANEZAKI, C. NARAZAKI, Y. MINE, S. MATSUOKA et Y. MURAKAMI, « Effects of hydrogen on fatigue crack growth behavior of austenitic stainless steels », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 10, p. 2604–2619, 2008.
- [8] Y. MINE, C. NARAZAKI, K. MURAKAMI, S. MATSUOKA et Y. MURAKAMI, « Hydrogen transport in solution-treated and pre-strained austenitic stainless steels and its role in hydrogen-enhanced fatigue crack growth », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 2, p. 1097–1107, 2009.
- [9] F. HAMON, *Modélisation du comportement mécanique en fissuration d'alliages aéronautiques*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, 2010.

- [10] C. MURRAY, « Hydrogen embrittlement of 15-5 PH stainless steels », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 12, no. 12, p. 2138–2141, 1981.
- [11] Y. KONDO, M. KUBOTA et K. SHIMADA, « Hydrogen enhanced crack propagation of SCM440H low-alloy steel under long-term varying load », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 77, no. 11, p. 1963–1974, 2010.
- [12] C. MCMAHON, « Hydrogen-induced intergranular fracture of steels », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 68, no. 6, p. 773–788, 2001.
- [13] P. SOFRONIS et R. MCMEEKING, « Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 37, no. 3, p. 317–350, 1989.
- [14] A. KROM, R. KOERS et A. BAKKER, « Hydrogen transport near a blunting crack tip », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 47, no. 4, p. 971–992, 1999.
- [15] R. ORIANI et P. JOSEPHIC, « Equilibrium aspects of hydrogen-induced cracking of steels », *Acta Metallurgica*, vol. 22, no. 9, p. 1065–1074, 1974.
- [16] A. TAHA et P. SOFRONIS, « A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 68, no. 6, p. 803–837, 2001.
- [17] S. SEREBRINSKY, E. CARTER et 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.
- [18] S. LYNCH, « Progress towards understanding mechanisms of hydrogen embrittlement and stress corrosion cracking (paper no. 489) », in *Proceedings of Corrosion 2007*, (Houston, TX), NACE International, 2007.
- [19] 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.
- [20] A. DE-ANDRÉS, J. PEREZ et M. ORTIZ, « Elastoplastic finite element analysis of three-dimensional fatigue crack growth in aluminum shafts subjected to axial loading », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 36, no. 15, p. 2231–2258, 1999.
- [21] O. NGUYEN, E. REPETTO, M. ORTIZ et R. RADOVITZKY, « A cohesive model of fatigue crack growth », *International Journal of Fracture*, vol. 110, no. 4, p. 351–369, 2001.
- [22] B. YANG, S. MALL et K. RAVI-CHANDAR, « A cohesive zone model for fatigue crack growth in quasibrittle materials », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 38, no. 22, p. 3927–3944, 2001.
- [23] J. BOUVARD, J. CHABOCHE, F. FEYEL et F. GALLERNEAU, « 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.

-
- [24] I. SCHEIDER, M. PFUFF et W. DIETZEL, « Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 75, no. 15, p. 4283–4291, 2008.
- [25] V. OLDEN, C. THAULOW et 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.
- [26] J. CHÊNE et A. BRASS, « Interaction hydrogène-métal en relation avec le processus de corrosion sous contrainte », in *Corrosion sous contrainte* (D. D. et R. Oltra. Les Editions de PHYSIQUE, éd.), p. 159–210, 1992.
- [27] D. JIANG et E. CARTER, « Diffusion of interstitial hydrogen into and through BCC Fe from first principles », *Physical Review B*, vol. 70, no. 6, p. 64–102, 2004.
- [28] C. SAN MARCHI et B. SOMERDAY, « Technical reference on hydrogen compatibility of materials », *Austenitic Stainless Steels Type*, vol. 304, 2008.
- [29] T. YAMAZAKI, T. IKESHOJI, A. SUZUMURA et T. NAITO, « Effect of oxide film on the reduction of hydrogen permeation rate in stainless steel », *JSME International Journal Series A*, vol. 49, no. 1, p. 58–62, 2006.
- [30] J. HIRTH, « Effects of hydrogen on the properties of iron and steel », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 11, p. 861–890, 1980.
- [31] M. GAO et R. WEI, « A « hydrogen partitioning » model for hydrogen assisted crack growth », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 16, no. 11, p. 2039–2050, 1985.
- [32] W. GERBERICH, T. LIVNE, X. CHEN et M. KACZOROWSKI, « Crack growth from internal hydrogen - Temperature and microstructural effects in 4340 steel », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 19, no. 5, p. 1319–1334, 1988.
- [33] A. FINNEFROCK, *Time-resolved measurements of the underpotential deposition of copper onto platinum (111) in the presence of chloride*. Thèse de doctorat, Cornell University, 1998.
- [34] J. CHÊNE, « Contribution à l'étude de la diffusion de l'hydrogène cathodique dans le fer Armco », *Métaux, Corrosion, Industrie*, no. 623-624, p. 262–279, 1977.
- [35] A. SIEVERTS et W. KRUMBHAAR, « Über die Löslichkeit von Gasen in Metallen und Legierungen », *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft*, vol. 43, no. 1, p. 893–900, 1910.
- [36] P. ATKINS et J. DE PAULA, *Atkins' Physical Chemistry, Ninth Edition*. Eds. Oxford University Press, 2009.

- [37] B. FOSSET, J.-B. BAUDIN, F. LAHITÈTE et V. PRÉVOST, *Chimie tout-en-un PC-PC**. Dunod, 2009.
- [38] J. GEORGIEV et L. ANESTIEV, « Influence of the surface processes on the hydrogen permeation through ferritic steel and amorphous Fe40Ni40Mo4B16 alloy specimens », *Journal of nuclear materials*, vol. 249, no. 2-3, p. 133–141, 1997.
- [39] P. TISON, « Influence de l'hydrogène sur le comportement des métaux », *Rapport CEA R-5240, Service de documentation du CEA, Saclay (Eds.)*, 1984.
- [40] J. LI, R. ORIANI et L. DARKEN, « The thermodynamics of stressed solids », *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, vol. 49, p. 271–290, 1966.
- [41] P. BASTIEN et P. AZOU, « Influence de l'amplitude et de la vitesse des déformations plastiques sur la ségrégation de l'hydrogène dans le fer et les aciers », *Compte-rendus de l'Académie des Sciences*, vol. 232, p. 1845–1848, 1951.
- [42] D. BLAVETTE, E. CADEL, A. FRACZKIEWICZ et A. MENAND, « Three-dimensional atomic-scale imaging of impurity segregation to line defects », *Science*, vol. 286, no. 5448, p. 2317–2319, 1999.
- [43] J. TIEN, R. RICHARDS, O. BUCK et H. MARCUS, « Model of dislocation sweep-in of hydrogen during fatigue crack growth », *Scripta Metallurgica*, vol. 9, p. 1097–1101, 1975.
- [44] F. FUJITA in *Fracture of Solids*, p. 657–670, Interscience Publishers, 1963.
- [45] N. SAINTIER, T. AWANE, J. OLIVE, S. MATSUOKA et Y. MURAKAMI, « Analyses of hydrogen distribution around fatigue crack on type 304 stainless steel using secondary ion mass spectrometry », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 14, p. 8630–8640, 2011.
- [46] J. TIEN, A. THOMPSON, I. BERNSTEIN et R. RICHARDS, « Hydrogen transport by dislocations », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 7, no. 6, p. 821–829, 1976.
- [47] B. NORMAND, N. PÉBÈRE, C. RICHARD, M. WERY *et al.*, *Prévention et lutte contre la corrosion : une approche scientifique et technique*. Lausanne : Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 2004.
- [48] A. BRASS, J. CHÊNE et L. COUDREUSE, « Fragilisation des aciers par l'hydrogène : mécanismes », *Les techniques de l'ingénieur, M*, vol. 176, p. 1–12, 2000.
- [49] G. PRESSOUYRE, « A classification of hydrogen traps in steel », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 10, no. 10, p. 1571–1573, 1979.
- [50] I. MORO, *Fragilisation par l'hydrogène gazeux d'un acier ferrito-perlitique de grade API X80*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

-
- [51] A. KUMNICK et H. JOHNSON, « Deep trapping states for hydrogen in deformed iron », *Acta Metallurgica*, vol. 28, no. 1, p. 33–39, 1980.
- [52] R. ORIANI, « The diffusion and trapping of hydrogen in steel », *Acta Metallurgica*, vol. 18, no. 1, p. 147–157, 1970.
- [53] W. JOHNSON, « On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids », *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 23, no. 156-163, p. 168–179, 1874.
- [54] A. TROIANO, « The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals (1959 Edward De Mille Campbell Memorial Lecture) », *Trans ASM*, vol. 52, p. 54–80, 1960.
- [55] N. J. PETCH, « XXX. The lowering of fracture-stress due to surface adsorption », *Philosophical Magazine*, vol. 1, no. 4, p. 331–337, 1956.
- [56] D. TROMANS, « On surface energy and the hydrogen embrittlement of iron and steels », *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 42, no. 6, p. 2043–2049, 1994.
- [57] C. BEACHEM, « A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen embrittlement) », *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 3, p. 441–455, 1972.
- [58] 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*, vol. 20, no. 6, p. 857–872, 2001.
- [59] A. BARNOUSH et H. VEHOFF, « Electrochemical nanoindentation : A new approach to probe hydrogen/deformation interaction », *Scripta Materialia*, vol. 55, no. 2, p. 195–198, 2006.
- [60] T. TABATA et H. BIRNBAUM, « Direct observations of hydrogen enhanced crack propagation in iron », *Scripta Metallurgica*, vol. 18, no. 3, p. 231–236, 1984.
- [61] I. ROBERTSON et H. BIRNBAUM, « An HVEM study of hydrogen effects on the deformation and fracture of nickel », *Acta Metallurgica*, vol. 34, no. 3, p. 353–366, 1986.
- [62] D. SHIH, I. ROBERTSON et H. BIRNBAUM, « Hydrogen embrittlement of α titanium : In situ TEM studies », *Acta Metallurgica*, vol. 36, no. 1, p. 111–124, 1988.
- [63] H. BIRNBAUM et P. SOFRONIS, « Hydrogen-enhanced localized plasticity - a mechanism for hydrogen-related fracture », *Materials Science and Engineering : A*, vol. 176, no. 1-2, p. 191–202, 1994.
- [64] P. FERREIRA, I. ROBERTSON et H. BIRNBAUM, « Hydrogen effects on the interaction between dislocations », *Acta Materialia*, vol. 46, no. 5, p. 1749–1757, 1998.

- [65] P. SOFRONIS et I. M. ROBERTSON, « Transmission electron microscopy observations and micromechanical/continuum models for the effect of hydrogen on the mechanical behaviour of metals », *Philosophical Magazine A*, vol. 82, no. 17-18, p. 3405–3413, 2002.
- [66] I. ROBERTSON, « The effect of hydrogen on dislocation dynamics », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 68, no. 6, p. 671–692, 2001.
- [67] P. FERREIRA, I. ROBERTSON et H. BIRNBAUM, « Influence of hydrogen on the stacking-fault energy of an austenitic stainless steel », in *Materials Science Forum*, vol. 207, p. 93–96, 1996.
- [68] P. FERREIRA, I. ROBERTSON et H. BIRNBAUM, « Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum », *Acta Materialia*, vol. 47, no. 10, p. 2991–2998, 1999.
- [69] S. LYNCH, « Mechanisms of hydrogen-assisted cracking », in *Proceedings of Metals Forum*, vol. 2, p. 189–200, 1979.
- [70] S. LYNCH, « Mechanisms of hydrogen assisted cracking - A review », in *Proc. of the International Conference on Hydrogen Effects on Material Behavior and Corrosion Deformation Interactions*, (Moran, WY), p. 449–466, 2003.
- [71] V. OLDEN, C. THAULOW, R. JOHNSEN, E. ØSTBY et T. BERSTAD, « Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25%Cr duplex stainless steel », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 75, no. 8, p. 2333–2351, 2008.
- [72] A. GURSON, « 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*, no. 99, p. 2–15, 1977.
- [73] J. LEMAITRE, « Continuous damage mechanics model for ductile fracture », *Transactions of the ASME. Journal of Engineering Materials and Technology*, vol. 107, no. 1, p. 83–89, 1985.
- [74] N. BONORA, « A nonlinear CDM model for ductile failure », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 58, no. 1-2, p. 11–28, 1997.
- [75] F. HAMON, G. HÉNAFF, D. HALM, M. GUEGUEN et T. BILLAudeau, « A damage model for fatigue crack propagation from moderate to high ΔK levels », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 35, no. 2, p. 160–172, 2012.
- [76] N. MOËS, J. DOLBOW et T. BELYTSCHKO, « A finite element method for crack growth without remeshing », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 46, no. 1, p. 131–150, 1999.

-
- [77] T. ELGUEDJ, A. GRAVOUIL et A. COMBESURE, « Appropriate extended functions for X-FEM simulation of plastic fracture mechanics », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 195, no. 7-8, p. 501–515, 2006.
 - [78] D. DUGDALE, « Yielding of steel sheets containing slits », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 8, no. 2, p. 100–104, 1960.
 - [79] G. BARENBLATT, « The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture », *Advances in Applied Mechanics*, vol. 7, p. 55–129, Elsevier, 1962.
 - [80] R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI, S. MATSUMOTO et N. MIYAZAKI, « Atomistic simulations of hydrogen embrittlement », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 23, p. 9576 – 9584, 2009.
 - [81] 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*, vol. 66, no. 9, p. 698 – 701, 2012.
 - [82] A. NEEDLEMAN, « A continuum model for void nucleation by inclusion debonding », *Journal of Applied Mechanics*, vol. 54, no. 3, p. 525–531, 1987.
 - [83] A. HILLERBORG, M. MODEER et P. PETERSSON, « Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements », *Cement and Concrete Research*, vol. 6, no. 6, p. 773–781, 1976.
 - [84] P. PETERSSON, *Crack growth and development of fracture zones in plain concrete and similar materials*. Div. of building materials, Lund inst. of technology [Avd. för byggnadsmateriallära, Tekn. högstsk.], 1981.
 - [85] A. CARPINTERI, *Mechanical damage and crack growth in concrete : plastic collapse to brittle fracture*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, Pays-Bas, 1986.
 - [86] G. CAMACHO et M. ORTIZ, « Computational modelling of impact damage in brittle materials », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 33, no. 20-22, p. 2899–2938, 1996.
 - [87] B. YANG, S. MALL et K. RAVI-CHANDAR, « A cohesive zone model for fatigue crack growth in quasibrittle materials », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 38, no. 22-23, p. 3927–3944, 2001.
 - [88] P. RAHULKUMAR, A. JAGOTA, S. BENNISON et S. SAIGAL, « Cohesive element modeling of viscoelastic fracture : application to peel testing of polymers », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 37, no. 13, p. 1873–1897, 2000.
 - [89] S. SONG, G. PAULINO et W. BUTTLAR, « A bilinear cohesive zone model tailored for fracture of asphalt concrete considering viscoelastic bulk material », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 73, no. 18, p. 2829–2848, 2006.

- [90] A. CORIGLIANO, M. RICCI et R. CONTRO, « Rate dependent delamination in polymer-matrix composites », in *Proceedings of the Fifth International Conference on Computational Plasticity*, CIMNE Barcelona.
- [91] V. OLDEN, C. THAULOW, R. JOHNSEN et E. ØSTBY, « Cohesive zone modeling of hydrogen-induced stress cracking in 25% Cr duplex stainless steel », *Scripta Materialia*, vol. 57, no. 7, p. 615–618, 2007.
- [92] V. OLDEN, C. THAULOW, R. JOHNSEN, E. ØSTBY et T. BERSTAD, « 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*, vol. 76, no. 7, p. 827–844, 2009.
- [93] I. SCHEIDER et W. BROCKS, « Cohesive elements for thin-walled structures », *Computational Materials Science*, vol. 37, no. 1-2, p. 101–109, 2006.
- [94] N. CHANDRA et C. SHET, « Analysis of energy balance when using cohesive zone models to simulate fracture processes », *Journal of engineering materials and technology - Transactions of the ASME*, vol. 124, no. 4, p. 440–450, 2002.
- [95] G. CAMACHO et M. ORTIZ, « Computational modelling of impact damage in brittle materials », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 33, no. 20, p. 2899–2938, 1996.
- [96] V. TVERGAARD et J. HUTCHINSON, « The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 40, no. 6, p. 1377–1397, 1992.
- [97] V. TVERGAARD, « Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal », *Materials Science and Engineering : A*, vol. 125, no. 2, p. 203–213, 1990.
- [98] X. XU et A. NEEDLEMAN, « Void nucleation by inclusion debonding in a crystal matrix », *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 1, no. 2, p. 111–132, 1993.
- [99] I. SCHEIDER et W. BROCKS, « The effect of the traction separation law on the results of cohesive zone crack propagation analyses », *Key Engineering Materials*, vol. 251, p. 313–318, 2003.
- [100] P. ZHANG, M. KARIMPOUR, D. BALINT, J. LIN et D. FARRUGIA, « A controlled Poisson Voronoi tessellation for grain and cohesive boundary generation applied to crystal plasticity analysis », *Computational Materials Science*, 2012 [sous presse].
- [101] J. A. BOMIDI, N. WEINZAPFEL, C.-P. WANG et F. SADEGHI, « Experimental and numerical investigation of fatigue of thin tensile specimen », *International Journal of Fatigue*, 2012 [sous presse].

-
- [102] M. SAMIMI, J. van DOMMELEN et M. GEERS, « A three-dimensional self-adaptive cohesive zone model for interfacial delamination », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 200, no. 49-52, p. 3540–3553, 2011.
- [103] M. TIJSSENS, B. SLUYS et E. Van der GIESSEN, « Numerical simulation of quasi-brittle fracture using damaging cohesive surfaces », *European Journal of Mechanics Series A Solids*, vol. 19, no. 5, p. 761–780, 2000.
- [104] N. BLAL, L. DARIDON, Y. MONERIE et S. PAGANO, « Criteria on the artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone », *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 339, no. 12, p. 789–795, 2011.
- [105] G. HÉNAFF et J. PETIT, « Multi-fissuration et rupture dynamique des matériaux hétérogènes », in *Comptes rendus des journées CSMA - Multi fissurations, Fragmentation et Méthodes particulières*, 2006.
- [106] S. MAITI et P. GEUBELLE, « A cohesive model for fatigue failure of polymers », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 72, no. 5, p. 691–708, 2005.
- [107] P. HARPER et S. HALLETT, « A fatigue degradation law for cohesive interface elements-development and application to composite materials », *International Journal of Fatigue*, vol. 32, no. 11, p. 1774–1787, 2010.
- [108] T. SIEGMUND, « A numerical study of transient fatigue crack growth by use of an irreversible cohesive zone model », *International Journal of Fatigue*, vol. 26, no. 9, p. 929–939, 2004.
- [109] J. LAVERNE, E. LORENTZ et J. MARIGO, « Un modèle cohésif pour la fatigue, effet de surcharge et fissuration tridimensionnelle », in *Proceedings du 19ème Congrès Français de Mécanique*, 2009.
- [110] A. URAL, V. KRISHNAN et K. PAPOULIA, « A cohesive zone model for fatigue crack growth allowing for crack retardation », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 46, no. 11-12, p. 2453–2462, 2009.
- [111] D. JHA et A. BANERJEE, « A cohesive model for fatigue failure in complex stress-states », *International Journal of Fatigue*, vol. 36, no. 1, p. 155–162, 2011.
- [112] A. BANERJEE et R. MANIVASAGAM, « Triaxiality dependent cohesive zone model », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 76, no. 12, p. 1761–1770, 2009.
- [113] A. JAUBERT et J. MARIGO, « Justification of Paris-type fatigue laws from cohesive forces model via a variational approach », *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 18, no. 1, p. 23–45, 2006.

- [114] A. TURON, P. CAMANHO, J. COSTA et C. DÁVILA, « A damage model for the simulation of delamination in advanced composites under variable-mode loading », *Mechanics of Materials*, vol. 38, no. 11, p. 1072–1089, 2006.
- [115] Q. NGUYEN, P. GERMAIN et P. SUQUET, « Continuum thermodynamics », *Journal of Applied Science*, vol. 50, p. 1010–1020, 1983.
- [116] J. LEMAITRE et J. CHABOCHE, *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, 2ème éd., 1988.
- [117] V. TVERGAARD et J. HUTCHINSON, « The influence of plasticity on mixed mode interface toughness », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 41, no. 6, p. 1119–1135, 1993.
- [118] P. LADEVÈZE, O. ALLIX, L. GORNET, D. LÉVÊQUE et L. PERRET, « A computational damage mechanics approach for laminates : identification and comparison with experimental results », *Studies in Applied Mechanics*, vol. 46, p. 481–500, 1998.
- [119] N. JANSSON et R. LARSSON, « A damage model for simulation of mixed-mode delamination growth », *Composite structures*, vol. 53, no. 4, p. 409–417, 2001.
- [120] G. ALFANO et M. CRISFIELD, « Finite element interface models for the delamination analysis of laminated composites : mechanical and computational issues », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 50, no. 7, p. 1701–1736, 2001.
- [121] A. Van der VEN et G. CEDER, « Impurity-induced Van der Waals transition during decohesion », *Physical Review B*, vol. 67, p. 060101, 2003.
- [122] E. HONDROS et M. SEAH, « The theory of grain boundary segregation in terms of surface adsorption analogues », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 8, no. 9, p. 1363–1371, 1977.
- [123] V. OLDEN, A. ALVARO et O. M. AKSELSSEN, « Hydrogen diffusion and hydrogen influenced critical stress intensity in an API X70 pipeline steel welded joint – Experiments and FE simulations », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 15, p. 11474–11486, 2012.
- [124] W. BROCKS, R. FALKENBERG et I. SCHEIDER, « Coupling aspects in the simulation of hydrogen-induced stress-corrosion cracking », *Procedia IUTAM*, vol. 3, p. 11–24, 2012. IUTAM Symposium on Linking Scales in Computations : From Microstructure to Macro-scale Properties.
- [125] R. FALKENBERG, W. BROCKS, W. DIETZEL et I. SCHNEIDER, « Simulation of stress-corrosion cracking by the cohesive model », *Key Engineering Materials*, vol. 417, p. 329–332, 2010.

-
- [126] P. HOLOBUT, « Fatigue crack growth model for a thin steel plate containing hydrogen », *International Journal of Fatigue*, vol. 32, no. 12, p. 1895–1903, 2010.
- [127] J. MAZARS, « A description of micro- and macroscale damage of concrete structures », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 25, no. 5-6, p. 729–737, 1986.
- [128] J. MARIGO, « Etude numérique de l'endommagement », *EDF - Bulletin de la Direction des Etudes et Recherches, Série C - Mathématiques, Informatique*, vol. 2, p. 27–48, 1982.
- [129] H. JOHNSON et R. LIN, « Hydrogen deuterium trapping in iron », in *Hydrogen Effects in Metal* (I. BERNSTEIN et A. THOMPSON, édés), p. 3–23, 1981.
- [130] D. HIBBITT, B. KARLSSON et P. SORESENSEN, « ABAQUS/Standard User's Manual, Version 6.7, ABAQUS », *Inc., Pawtucket, RI*, 2007.
- [131] E. BRANDIS et G. BROOKS, édés, *Smithells metals reference book*. Butterworths, London, 7ème éd., 1992.
- [132] F. AURICCHIO et R. TAYLOR, « Two material models for cyclic plasticity : nonlinear kinematic hardening and generalized plasticity », *International Journal of Plasticity*, vol. 11, no. 1, p. 65–98, 1995.
- [133] P. ARMSTRONG et C. FREDERICK, « A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect », *Materials at High Temperatures*, vol. 24, p. 1–26, 1966.
- [134] E. DE SOUZA NETO, D. PERIAE et D. OWEN, *Computational methods for plasticity : theory and applications*. Wiley, 2008.
- [135] *ASTM E647-05 Standard Test Method for Measurement of Fatigue Crack Growth Rates*. ASTM International, 2008.
- [136] R. MCCLUNG et H. SEHITOGLU, « On the finite element analysis of fatigue crack closure - 1. Basic modeling issues », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 33, no. 2, p. 237–252, 1989.
- [137] S. FEIH, « Development of a user element in ABAQUS for modelling of cohesive laws in composite structures », Rap. tech. Risø-R-1501(EN), Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, 2005.
- [138] S. POMMIER et R. HAMAM, « Incremental model for fatigue crack growth based on a displacement partitioning hypothesis of mode I elastic-plastic displacement fields », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 30, no. 7, p. 582–598, 2007.
- [139] S. CASTAGNET, J. GRANDIDIER, M. COMYN et G. BENOIT, « Hydrogen influence on the tensile properties of mono and multi-layer polymers for gas distribution », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 14, p. 7633–7640, 2010.

- [140] Z. SUN, G. BENOIT, C. MORICONI, F. HAMON, D. HALM, F. HAMON et G. HÉNAFF, « Fatigue crack propagation under gaseous hydrogen in a precipitation-hardened martensitic stainless steel », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 14, p. 8641–8644, 2011.
- [141] A. STEWART, « The influence of environment and stress ratio on fatigue crack growth at near threshold stress intensities in low-alloy steels », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 13, no. 3, p. 463–473, 1980.
- [142] R. COOKE, P. IRVING, G. BOOTH et C. BEEVERS, « The slow fatigue crack growth and threshold behaviour of a medium carbon alloy steel in air and vacuum », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 7, no. 1, p. 69–72, 1975.
- [143] J. FRANDBSEN et H. MARCUS, « The correlation between grain size and plastic zone size for environmental hydrogen assisted fatigue crack propagation », *Scripta Metallurgica*, vol. 9, no. 10, p. 1089–1094, 1975.
- [144] G. HÉNAFF, J. PETIT et B. BOUCHET, « Environmental influence on the near-threshold fatigue crack propagation behaviour of a high-strength steel », *International Journal of Fatigue*, vol. 14, no. 4, p. 211–218, 1992.
- [145] H. CIALONE et J. HOLBROOK, « Effects of gaseous hydrogen on fatigue crack growth in pipeline steel », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 16, no. 1, p. 115–122, 1985.
- [146] H. CIALONE et J. HOLBROOK, « Sensitivity of steels to degradation in gaseous hydrogen », *Hydrogen Embrittlement : Prevention and Control, ASTM STP*, vol. 962, p. 134–152, 1988.
- [147] R. WALTER et W. CHANDLER, « Cyclic-load crack growth in ASME SA-105 grade II steel in high-pressure hydrogen at ambient temperature », *Effect of Hydrogen on Behavior of Materials*, p. 273–286, 1976. Proceedings of the International Conference, Moran, Wyo, USA.
- [148] T. MICHLER et J. NAUMANN, « Influence of high pressure hydrogen on the tensile and fatigue properties of a high strength Cu-Al-Ni-Fe alloy », *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 20, p. 11373–11377, 2010.
- [149] K. NIBUR, B. SOMERDAY, C. MARCHI, D. BALCH, J. FOULK III, M. DADFARNIA, P. SOFRONIS et G. HAYDEN, « Measurement and interpretation of threshold stress intensity factors for steels in high-pressure hydrogen gas », rap. tech., Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 2010.
- [150] G. HÉNAFF et J. PETIT, « Environmentally-assisted fatigue crack propagation : some critical issues », in *Fatigue*, vol. 96, p. 715–20, 1996.

-
- [151] P. LIAW, S. HUDAK et J. DONALD, « Influence of gaseous environments on rates of near-threshold fatigue crack propagation in NiCrMoV steel », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 13, no. 9, p. 1633–1645, 1982.
- [152] P. LIAW, « Mechanisms of near-threshold fatigue crack growth in a low alloy steel », *Acta Metallurgica*, vol. 33, no. 8, p. 1489–1502, 1985.
- [153] S. MATSUOKA, H. TANAKA, N. HOMMA et Y. MURAKAMI, « Influence of hydrogen and frequency on fatigue crack growth behavior of Cr-Mo steel », *International Journal of Fracture*, vol. 168, no. 1, p. 101–112, 2011.
- [154] W. CLARK, *Proceedings of the Second International Congress in Hydrogen in Metals*. I.M. Bernstein and A.W. Thompson, eds., ASM, Materials Park, OH, 1977.
- [155] S. LYNCH et N. RYAN, *Proceedings of the Second International Congress in Hydrogen in Metals (Paper 3D 12)*. C.D. Beachem, ed., ASM, Materials Park, OH, 1977.
- [156] A. MACADRE, H. YANO, S. MATSUOKA et J. FURTADO, « The effect of hydrogen on the fatigue life of Ni-Cr-Mo steel envisaged for use as a storage cylinder for a 70 MPa hydrogen station », *International Journal of Fatigue*, vol. 33, no. 12, p. 1608–1619, 2011.
- [157] H. NELSON, *Effect of Hydrogen on Behavior of Materials*. A.W. Thompson and I.M. Bernstein, eds., The Metallurgical Society of AIME, Moran, WY, 1975.
- [158] P. FASSINA, F. BRUNELLA, L. LAZZARI, G. RE, L. VERGANI et A. SCIUCCATI, « Fatigue behavior of pipeline steel under hydrogen environment and low temperature », *Procedia Engineering*, vol. 10, p. 3353–3360, 2011.
- [159] A. KROM, H. MAIER, R. KOERS et A. BAKKER, « The effect of strain rate on hydrogen distribution in round tensile specimens », *Materials Science and Engineering : A*, vol. 271, no. 1, p. 22–30, 1999.
- [160] H. KOTAKE, R. MATSUMOTO, S. TAKETOMI et N. MIYAZAKI, « Transient hydrogen diffusion analyses coupled with crack-tip plasticity under cyclic loading », *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, vol. 85, no. 8, p. 540–549, 2008.
- [161] J. WANG, « The thermodynamics aspects of hydrogen induced embrittlement », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 68, no. 6, p. 647–669, 2001.
- [162] R. RICHARDS, S. PURUSHOTHAMAN, J. TIEN, J. FRANSEN et O. BUCK, « Kinetics of environmental fatigue crack growth in a nickel-copper alloy : Part II. In hydrogen », *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 9, no. 8, p. 1107–1111, 1978.
- [163] N. RAYKAR, S. MAITI et R. S. RAMAN, « Modelling of mode-I stable crack growth under hydrogen assisted stress corrosion cracking », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 78, no. 18, p. 3153–3165, 2011.

- [164] W. DIETZEL et M. PFUFF, « The effect of deformation rates on hydrogen embrittlement », *Hydrogen Effects in Materials*, p. 303–311, 1994.
- [165] E. CASTRODEZA, J. RODRIGUES TOUÇA, J. PEREZ IPIÑA et F. BASTIAN, « Determination of CTOD C in fibre metal laminates by ASTM and Schwalbe methods », *Materials Research*, vol. 5, no. 2, p. 119–124, 2002.
- [166] I. SCHEIDER, « Simulation of cup-cone fracture in round bars using the cohesive zone model », in *Proceedings of the First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*, p. 460–462, 2001.
- [167] K. SCHWALBE, « The engineering flaw assessment method (EFAM) », *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, vol. 21, no. 10, p. 1203–1213, 1998.
- [168] Y. LIANG et P. SOFRONIS, « Toward a phenomenological description of hydrogen-induced decohesion at particle/matrix interfaces », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 51, no. 8, p. 1509–1531, 2003.
- [169] D. DAVIDSON et J. LANKFORD, « The effect of water vapor on fatigue crack tip stress and strain range distribution and the energy required for crack propagation in low-carbon steel », *International Journal of Fracture*, vol. 17, no. 3, p. 257–275, 1981.
- [170] Z. SUN, C. MORICONI, G. BENOIT, D. HALM et G. HÉNAFF, « Fatigue crack growth under high pressure of gaseous hydrogen in a 15-5PH martensitic stainless steel : Influence of pressure and loading frequency », *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2012 [sous presse].
- [171] W. CURTIN, V. DESHPANDE, A. NEEDLEMAN, E. V. der GIESSEN et M. WALLIN, « Hybrid discrete dislocation models for fatigue crack growth », *International Journal of Fatigue*, vol. 32, no. 9, p. 1511–1520, 2010.
- [172] M. ORTIZ et E. POPOV, « Accuracy and stability of integration algorithms for elastoplastic constitutive relationships », *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, no. 21, p. 1561–1576, 1985.
- [173] G. MAENCHEN et S. SACK, « The tensor code », in *Methods in Computational Physics*, Vol. 3 (B. ALDER, éd.), p. 181–263, 1964.
- [174] M. WILKINS, « Calculation of elastic plastic flow », in *Methods in Computational Physics*, Vol. 3 (B. ALDER, éd.), p. 211–263, 1964.
- [175] J. NAGTEGAAL, « On the implementation of inelastic constitutive equations with special reference to large deformation problems », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 33, no. 1-3, p. 469–484, 1982.

- [176] J. SIMO et R. TAYLOR, « Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 48, no. 1, p. 101–118, 1985.
- [177] J. SIMO et T. HUGHES, *Elastoplasticity and viscoplasticity : computational aspects*. Stanford Univ., Division of Applied Mechanics, 1988.

Titre : Modélisation de la propagation de fissure de fatigue assistée par l'hydrogène gazeux dans les matériaux métalliques

Présentée par : Clara MORICONI

Directeurs de thèse : Gilbert HENAFF et Damien HALM

Résumé :

De nombreux travaux expérimentaux mettent en évidence que, dans un environnement hydrogénéant, l'hydrogène généré par des réactions en surface puis drainé dans la zone plastifiée modifie les mécanismes de déformation et d'endommagement en pointe de fissure de fatigue dans les métaux, entraînant un abaissement important de leur résistance à la fissuration. L'objectif est de développer un modèle de ces phénomènes complexes dans le cadre de la mécanique de l'endommagement, et de le confronter aux résultats d'essais de propagation de fissure de fatigue sous hydrogène gazeux sur un acier inoxydable martensitique 15-5PH. Un modèle de fissuration utilisant une méthode de zone cohésive a été implémenté dans le code de calcul ABAQUS. Une loi de traction-séparation adaptée aux chargements cycliques, dont les paramètres sont influencés par la concentration en hydrogène, a été développée. De plus, la diffusion de l'hydrogène tient compte de l'influence de la contrainte hydrostatique et du piégeage. Le comportement mécanique du volume du matériau est modélisé par une loi élastoplastique. On montre que le modèle est capable de prédire la propagation monotone en présence d'hydrogène, puis on étudie la capacité du modèle cohésif avec la loi de traction-séparation développée à prédire les courbes de propagation de fatigue pour l'acier 15-5PH sous air. Enfin, les vitesses de propagation de fissure de fatigue simulées en présence d'hydrogène sont comparées à celles obtenues expérimentalement. La capacité du modèle à évaluer les contributions respectives des mécanismes d'endommagement (HELP, HEDE) dans la dégradation de la résistance à la fissuration de l'acier étudié est discutée.

Mots clés : Simulation par ordinateur ; Mécanique de l'endommagement ; Fragilisation par l'hydrogène ; Fatigue ; Transport de l'hydrogène ; Modèle de zone cohésive.

Abstract :

Experimental studies in a hydrogenous environment indicate that hydrogen created by surface reactions, then drained into the plastic zone, leads to a modification of deformation and damage mechanisms at the fatigue crack tip in metals, resulting in a significant decrease of crack propagation resistance. This study aims at building a model of these complex phenomena in the framework of damage mechanics, and to confront it with the results of fatigue crack propagation tests in high pressure hydrogen on a 15-5PH martensitic stainless steel. To do so, a cohesive zone model was implemented in the finite element code ABAQUS. A specific traction-separation law was developed, which is suitable for cyclic loadings, and whose parameters depend on local hydrogen concentration. Furthermore, hydrogen diffusion in the bulk material takes into account the influence of hydrostatic stress and trapping. The mechanical behaviour of the bulk material is elastic-plastic. It is shown that the model can qualitatively predict crack propagation in hydrogen under monotonous loadings; then, the model with the developed traction-separation law is tested under fatigue loading. In particular, the simulated crack propagation curves without hydrogen are compared to the experimental crack propagation curves for the 15-5PH steel in air. Finally, simulated fatigue crack propagation rates in hydrogen are compared to experimental measurements. The model's ability to assess the respective contributions of the different damage mechanisms (HELP, HEDE) in the degradation of the crack resistance of the 15-5PH steel is discussed.

Keywords : Computer simulation; Damage mechanics; Hydrogen embrittlement; Fatigue; Hydrogen transport; Cohesive zone model.