# SSNP 160 – Diffusion d'hydrogène dans un acier élastoplastique

**Résumé :**

Ce test de mécanique quasi-statique non linéaire simule la diffusion d'hydrogène dans un volume homogène d'acier en fonction des déformations plastiques.

La modélisation A est effectuée avec des éléments plans (modélisation mécanique C_PLAN, modélisation thermique PLAN_DIAG).

La modélisation A est effectuée avec des éléments 3D (modélisation mécanique 3D, modélisation thermique 3D_DIAG).

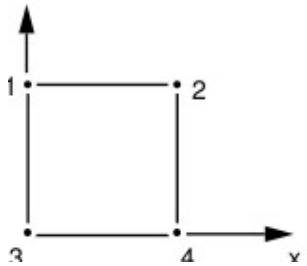


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

# 1 Problème de référence

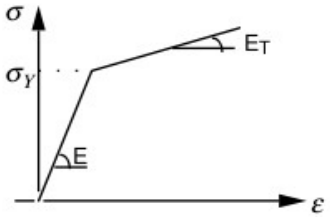
## 1.1 Géométrie

La solution homogène est obtenue sur un élément de volume plan (carré de côté $1$) ou 3D (cube de côté $1$). Les dimensions sont sans influence sur la solution.




## 1.2 Propriétés des matériaux

$E=2.10^7\,Pa$
$\nu=0.3$
$\sigma_y=2.10^8\,Pa$
$E_T=2.10^9\,Pa$




Pour la diffusion, les coefficients matériau sont, pour une température de $T=293\,K$ :
$D_L=1.27\,10^{-8}$
$N_L=5.1\,10^{29}\,m^{-3}$
$K_T=e^{60000./RT}$
$a_1=23.26 \quad a_2=-2.33 \quad a_3=-5.5$
$V_h=2.e-6 \quad R=8.3144\,J/mol/K$

## 1.3 Conditions aux limites et chargements

Côté $1-3$ : $F_x$ imposé
Côté $2-4$ : $u_x=0.$
Point $2$ : $u_y=0.$

Chargement par une force répartie $F_x$ croissante en fonction du temps :

| Instant ( $s$ ) | 0 | $10^7$ | $2.10^7$ |
|---|---|---|---|
| Force $F_x$ | 0 | $\sigma_y$ | $3\,\sigma_y$ |

Discrétisation temporelle :
- 1 pas jusqu'à t= $10^7$
- 100 pas jusqu'à t= $2.10^7$ : pour chaque pas, un calcul mécanique puis un calcul de diffusion.

Les concentrations initiales en $H2$ :
- Dans le réseau cristallin (« lattice ») $C_L(0)=2.08\,10^{21}\,m^{-3}$
- Dans les pièges («traps») $C_T(0)=8.42\,10^{20}\,m^{-3}$



Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

# 2 Solution de référence

## 2.1 Méthode de calcul utilisée pour la solution de référence

Dans le document [1], un modèle de diffusion des atomes d'hydrogène dans les aciers est proposé. Il considère deux types de concentration des atomes d'hydrogène :

- $C_L$ est la concentration dans le réseau cristallin (Lattice)
- $C_T$ est la concentration dans les « pièges » ou lacunes (Traps)

Sans reprendre ici toute la démarche suivie par les auteurs de [1], la formulation proposée pour l'équation de diffusion de $C_L$ est :

$$\frac{C_L+C_T(1-\theta_T)}{C_L}\frac{\partial C_L}{\partial t}-\nabla\cdot(D_L\nabla C_L)+\nabla\cdot\left(\frac{D_L C_L V_H}{RT}\nabla\sigma_H\right)+\theta_T\frac{d N_T}{d\varepsilon_{eq}^p}\frac{d\varepsilon_{eq}^p}{dt}=0 \qquad \textbf{eq1}$$

On constate donc que l'équation de diffusion tient compte du gradient local de la trace des contraintes (contrainte hydrostatique $\sigma_H=1/3tr(\boldsymbol{\sigma})$ ) et de la déformation plastique équivalente de Von Mises.

Les relations définissant les différentes quantités sont :

$\theta_L=\frac{C_L}{N_L}$ est le taux d'occupation des sites du réseau cristallin, avec $N_T$ le nombre de sites par unité de volume. $N_L$ est un constante estimée à $N_L=5{,}1\,10^{29}m^{-3}$ pour le fer $\alpha$ dans [1].

$\theta_T=\frac{C_T}{N_T}$ est le taux d'occupation des sites des pièges, avec $N_T$ la densité des pièges, c'est à dire le nombre de sites correspondant à des pièges par unité de volume.

Contrairement à $N_L$ qui est une constante, $N_T$ est fonction de la déformation plastique suivant l'expression : $\log_{10}(N_T)=a_1-a_2\exp(-a_3\varepsilon_{eq}^p)$ , avec : $a_1=23.26$ , $a_2=2{,}33$ , $a_3=-5{,}5$ [1].

$D_L=1{,}2710^{-8}m^2/s$ $V_H=210^{-6}m^3$ pour le fer $\alpha$ à température ambiante, $R=8{,}3144\,J/mol/K$ est la constante des gaz parfaits, et $T$ la température en $°K$.

Il reste à définir $C_T$ en fonction de $C_L$ : d'après [1] à l'équilibre, ce qui est le cas pour la CSC :

$C_T=\frac{N_T}{1+\frac{1}{K_T\theta_L}}$ , avec $K_T=\exp(-\Delta E_T/RT)=4{,}9710^{10}$ à température ambiante, suivant [1], en prenant $\Delta E_T=-60\,KJ/mol$ .

De façon similaire à la thermique non linéaire,la formulation variationnelle s'écrit alors :

Soit $\Omega$ un ouvert de $R^3$ , de frontière $\Gamma=\Gamma_1\cup\Gamma_2$ .
On doit résoudre l'équation [eq. 1] en $C_L$ sur $\Omega\times]0,t[$ avec les conditions aux limites :



Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\begin{cases} C_L = C_L^d & \text{sur} \quad \Gamma_1 \\ \boldsymbol{J}.\boldsymbol{n} = \phi & \text{sur} \quad \Gamma_2 \end{cases} \qquad \textbf{éq 3}$$

avec $\boldsymbol{J} = -D_L \nabla C_L + \frac{D_L V_H}{RT} C_L \nabla \sigma_H$

et avec des conditions initiales $C_L(t=0)$ (et $C_T(t=0)$ ).

Soit $v$ une fonction suffisamment régulière s'annulant sur $\Gamma_1$, la formulation variationnelle du problème s'écrit :

$$\int_\Omega D^*(C_L)\frac{dC_L}{dt} v\, d\Omega + \int_\Omega D_L \nabla C_L \cdot \nabla v\, d\Omega - \int_\Omega \nabla \boldsymbol{v} \cdot \left( \frac{D_L C_L V_H}{RT} \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right) d\Omega = \int_\Omega r_{vol} v\, d\Omega + \int_{\Gamma_2} \phi v\, d\Gamma_2 \qquad \textbf{éq 4}$$

avec :

$$D^*(C_L) = \frac{C_L + C_T(1-\theta_T)}{C_L} \quad \phi = \left( D_L \nabla \boldsymbol{C_L} - \frac{D_L V_H}{RT} C_L \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right).\boldsymbol{n} \text{ et } r_{vol} = -\theta_T \frac{d N_T}{d \varepsilon_{eq}^p} \frac{d \varepsilon_{eq}^p}{dt} = 0$$

La résolution numérique par éléments finis est donc similaire à celle de la thermique non linéaire, et s'appuie sur une $\theta$ -méthode, modulo deux particularités :

- le terme source $r_{vol}$ est non linéaire, comme dans la modélisation du séchage [R7.01.12], et sera intégré de façon explicite ;
- le terme $\int_\Omega \nabla \boldsymbol{v} \cdot \left( \frac{D_L C_L V_H}{RT} \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right) d\Omega$ est non symétrique, et sera lui aussi reporté au second membre, comme dans [1] et intégré de façon explicite.

Cette discrétisation explicite de ces deux termes n'est pas contraignante : en effet la résolution de l'équation [eq. 4] est effectuée à chaque pas de temps, chaînée avec une résolution mécanique.

Par contre le terme $\int_\Omega \nabla \boldsymbol{v} \cdot \left( \frac{D_L C_L V_H}{RT} \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right) d\Omega$ nécessite d'appliquer un gradient de température $\nabla \boldsymbol{T_{ini}}$ supposé uniforme dans l'élément. Le second membre élémentaire calculé est : $\int_\Omega \nabla \boldsymbol{T_{ini}} K \nabla \boldsymbol{v}\, d\Omega$ où $K$ est le tenseur des conductivités thermiques.

Connaissant les conditions initiales $C_L^0 = C_L(t=0)$ et $C_T^0 = C_T(t=0)$, on calcule $C_{tot}^0 = C_L^0 + C_T^0$.

et on adimensionne l'inconnue (concentration) ; la formulation variationnelle est alors :

$$\int_\Omega D^* \frac{dc_L}{dt} v\, d\Omega + \int_\Omega D_L \nabla c_L \cdot \nabla v\, d\Omega = \int_\Omega \nabla \boldsymbol{v} \cdot \left( \frac{D_L V_H}{RT} c_L \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right) d\Omega + \int_\Omega \bar{r}_{vol} v\, d\Omega + \int_{\Gamma_2} \bar{\phi} v\, d\Gamma_2$$

avec : $c_L = \frac{C_L}{C_{tot}^0}$ $\bar{r}_{vol} = \frac{-\theta_T}{C_{tot}^0} \frac{d N_T}{d \varepsilon_{eq}^p} \frac{d \varepsilon_{eq}^p}{dt}$ et $\bar{\phi} = \left( -D_L \nabla \boldsymbol{c_L} + \frac{D_L V_H}{RT} c_L \nabla \boldsymbol{\sigma_H} \right).\boldsymbol{n}$

Le coefficient de capacité thermique $D^*$ est un champ représenté par une variable de commande (NEUT1) .



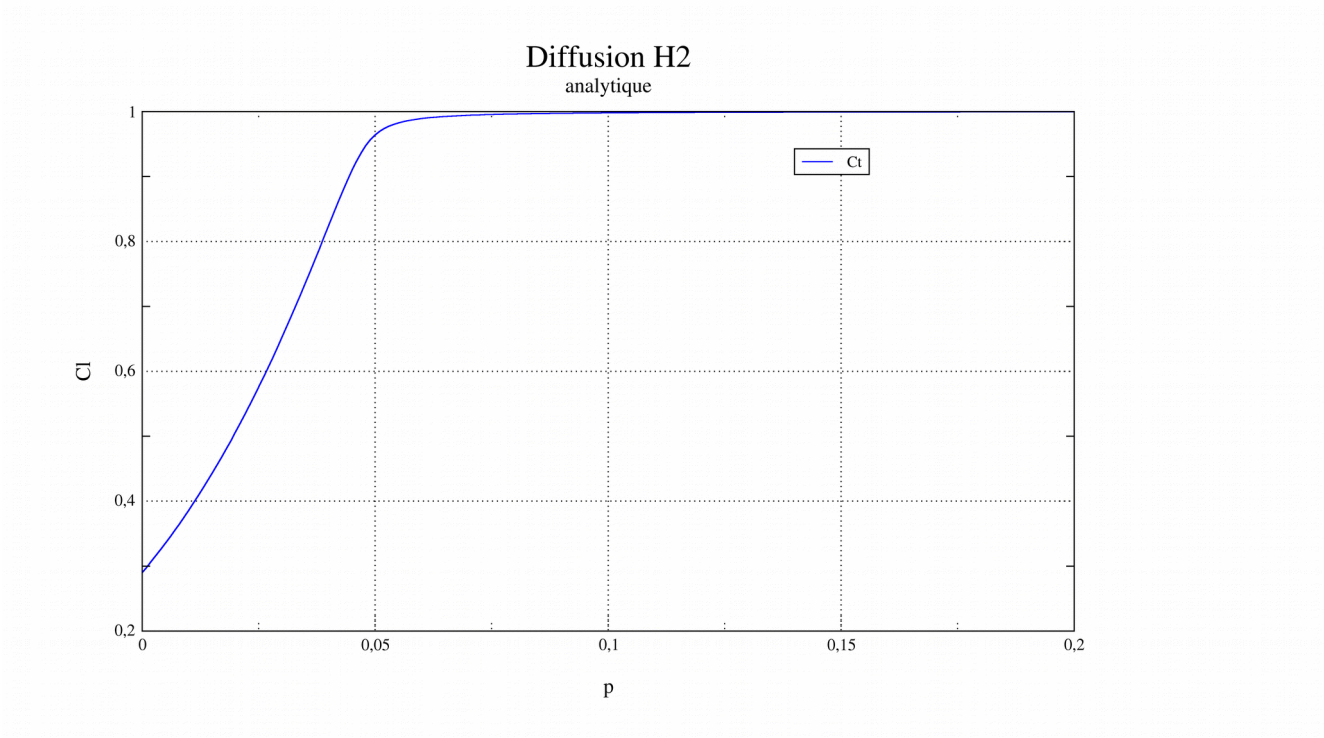
Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Dans un élément de volume isolé ( $\nabla C_L = 0$ sur la frontière ) et chargé de façon à ce que l'état de contraintes et de déformations soit uniforme, la concentration totale $C_{tot} = C_l + C_t$ est constante.

La solution analytique décrite dans [1] est obtenue directement sous forme de l'équation du second degré : $C_T^2 - B C_T + N_T C_{tot} = 0$ , avec $B = N_L / K_T + C_{tot} + N_T$ : un des deux solutions mènerait à des valeurs négatives de $C_L$ , la solution est donc . $C_T = 1/2 (B - \sqrt{B^2 - 4 N_T C_{tot}})$

La représentation de $C_T(\varepsilon_{eq}^p)$ et $C_L(\varepsilon_{eq}^p)$ obtenues analytiquement et numériquement dans [1] est :

## 2.2 Résultats de référence




## 2.3 Incertitude sur la solution

Incertitude inférieure à $1\ \%$ .

## 2.4 Références bibliographiques

1) « Hydrogen transport near a blunting crack tip » A.H.M. Krom, R.W.J.Koers, A.Bakker in « Journal of the Mechanics and Physics of Solids » 45 (1999) 971-992



Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

# 3 Modélisation A

## 3.1 Caractéristiques de la modélisation A

Mécanique : modélisation C_PLAN
Thermique : modélisation PLAN_DIAG

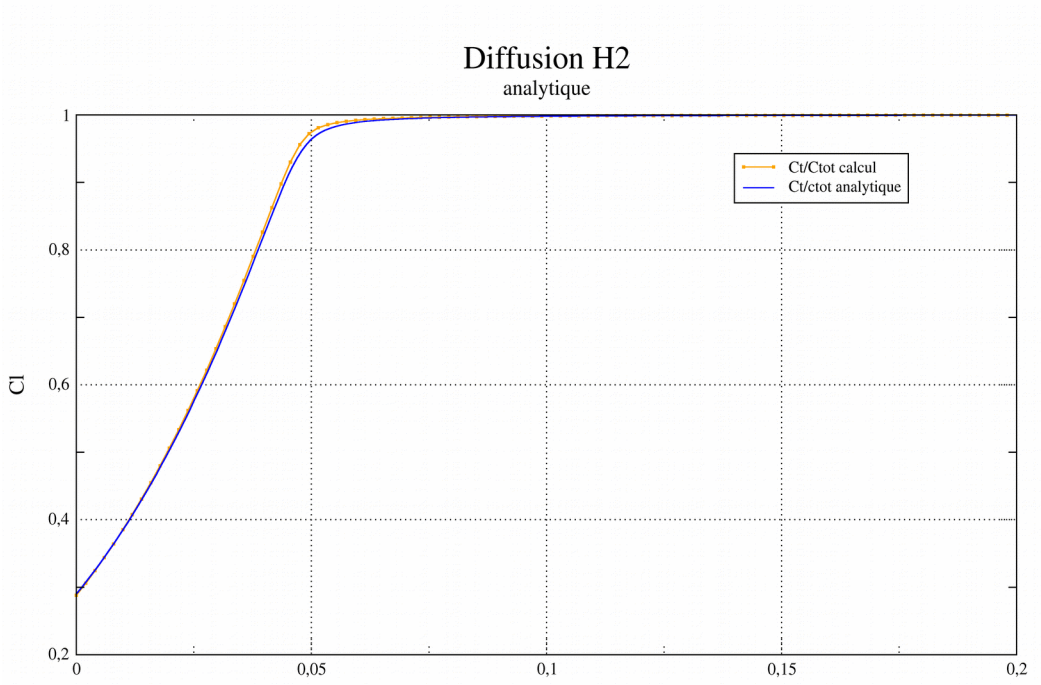
## 3.2 Caractéristiques du maillage

Un élément QUAD4. Nombre de nœuds : 4

## 3.3 Grandeurs testées et résultats

La solution analytique étant obtenue en fonction de la déformation plastique, on teste d'abord cette valeur en fonction du temps, puis la concentration en hydrogène en fonction du temps :

| Identification | Instant | Référence | *Tolérance %* |
|---|---|---|---|
| P1 | 11000000.0 | 0.0198 | 0,10% |
| P1 | 11500000.0 | 0.0297 | 0,10% |
| P1 | 12000000.0 | 0.0396 | 0,10% |
| P1 | 12500000.0 | 0.0495 | 0,10% |
| P1 | 13000000.0 | 0.0594 | 0,10% |
| P1 | 15100000.0 | 0.100980 | 0,10% |
| P1 | 20000000.0 | 0.1980 | 0,10% |
| CT2 | 11000000.0 | 0.5058 | 0,10% |
| CT2 | 11500000.0 | 0.6522 | 0.3% |
| CT2 | 12000000.0 | 0.8239 | 0.4% |
| CT2 | 12500000.0 | 0.964 | 1.0% |
| CT2 | 13000000.0 | 0.989 | 0.4% |
| CT2 | 15100000.0 | 0.99807 | 0,10% |
| CT2 | 20000000.0 | 0.999628 | 0,10% |






Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

# 4 Modélisation B

## 4.1 Caractéristiques de la modélisation B

Mécanique : modélisation 3D
Thermique : modélisation 3D_DIAG

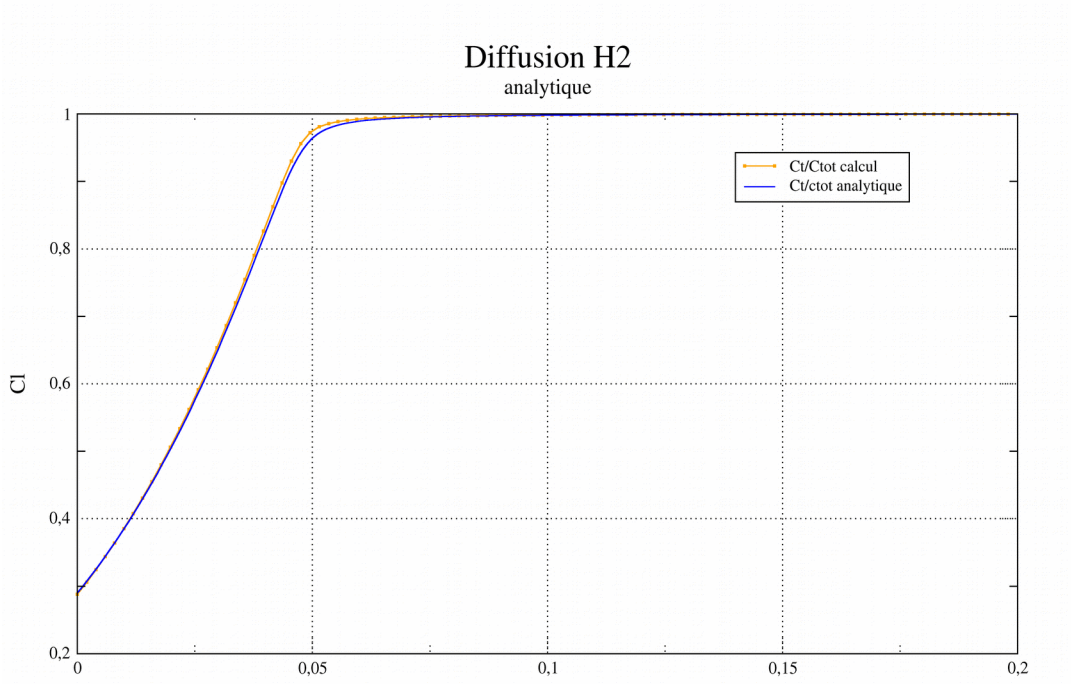
## 4.2 Caractéristiques du maillage

Un élément HEXA8. Nombre de nœuds : 8

## 4.3 Grandeurs testées et résultats

La solution analytique étant obtenue en fonction de la déformation plastique, on teste d'abord cette valeur en fonction du temps, puis la concentration en hydrogène en fonction du temps :

| Identification | Instant | Référence | *Tolérance %* |
|---|---|---|---|
| P1 | 11000000.0 | 0.0198 | 0,10% |
| P1 | 11500000.0 | 0.0297 | 0,10% |
| P1 | 12000000.0 | 0.0396 | 0,10% |
| P1 | 12500000.0 | 0.0495 | 0,10% |
| P1 | 13000000.0 | 0.0594 | 0,10% |
| P1 | 15100000.0 | 0.100980 | 0,10% |
| P1 | 20000000.0 | 0.1980 | 0,10% |
| CT2 | 11000000.0 | 0.5058 | 0,10% |
| CT2 | 11500000.0 | 0.6522 | 0.3% |
| CT2 | 12000000.0 | 0.8239 | 0.4% |
| CT2 | 12500000.0 | 0.964 | 1.0% |
| CT2 | 13000000.0 | 0.989 | 0.4% |
| CT2 | 15100000.0 | 0.99807 | 0,10% |
| CT2 | 20000000.0 | 0.999628 | 0,10% |






Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

# 5 Synthèse des résultats

La solution calculée est très proche de la solution analytique et valide la méthodologie de simulation de la diffusion d'hydrogène dans un acier.



Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)